

Chimica quantistica



Erwin Schrödinger nel 1933

La nascita della meccanica quantistica è una pietra miliare per la fisica e per la chimica.

La fisica quantistica era di difficile comprensione per i fisici stessi, e ancora dello scetticismo aleggiava intorno alle sue applicazioni nella chimica, ma la storia diede torto agli increduli.

Dopo la formulazione dell'equazione di Schrödinger (1926) si ottennero enormi progressi nell'analisi della struttura degli atomi, molecole e del legame chimico in termini fisici.

Nel 1927 Walter Heitler e Fritz London scrissero un articolo in cui si utilizzava per la prima volta la meccanica quantistica per descrivere la molecola di H_2 : era la nascita della chimica quantistica.

Negli anni seguenti molti altri studiosi contribuirono ai progressi; per citarne alcuni: Robert S. Mulliken, Max Born, Robert Oppenheimer, Linus Pauling, Erich Hückel, Douglas Hartree, Vladimir Aleksandrovich Fock. Ecco una breve cronologia dei principali sviluppi:

- 1924 - Louis de Broglie sostiene che una particella in movimento possiede doppia natura corpuscolo-ondulatoria.
- 1925 - principio di esclusione di Pauli.
- 1926 - equazione di Schrödinger e approssimazione di Born-Oppenheimer.
- 1927 - Walter Heitler e Fritz London: analisi quantistica del legame di valenza e della molecola di idrogeno.
- 1927-29 - Friedrich Hund e Robert S. Mulliken descrivono gli orbitali molecolari.
- 1928 - Linus Pauling descrive l'ibridazione degli orbitali di legame.
- 1932 - Henry Eyring e Michael Polanyi analizzano il sistema H_2+H .

Prima della metà del XX secolo si era completata l'integrazione fra chimica e fisica, le maggiori proprietà chimiche potevano essere spiegate in termini di struttura atomica.

Linus Pauling nel suo libro *La natura del legame chimico*, pubblicato nel 1937 e considerato una pietra miliare nella storia della chimica, utilizzò i principi della meccanica quantistica per dedurre angoli di legame ed altre proprietà molecolari di strutture atomiche complesse.