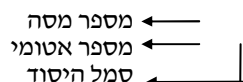


כימיה כללית ופיסקלית למדעי החיים – תשס"ד

הגדרות:

כל חומר מורכב מחלקיקים קטנים הנקראים **אטומים**, המתקשרים ביניהם בקשרים שונים ליצירת תרכובות - **מולקולות**.

לכל יסוד כימי המופיע בטבלה המחזורית, יש **סימן כימי**, הנקבע לפי האותיות הראשונות בשמו הלטיני.



כל יסוד מתואר באופן הבא, למשל עבור פחמן (carbon): $^{12}_6\text{C}$

מספר אטומי: מספר הפרוטונים שמכיל האטום, הוא שווה גם למספר האלקטרונים (באטום נייטרלי).

מספר מסה: מספר הפרוטונים + מספר הנויטרונים בגרעין האטום.

איזוטופים: אטומים בעלי אותו מספר פרוטונים, אך מספר נויטרונים שונה.

למשל: $^{35}_{17}\text{Cl}$, $^{37}_{17}\text{Cl}$; $^{14}_6\text{C}$, $^{13}_6\text{C}$, $^{12}_6\text{C}$

משקל אטומי: הממוצע המשוקלל של משקל האיזוטופים השונים, על-פי שכיחותם בטבע.

$$\text{A.W.} = \sum_i^N P_i \mu_i$$

A.W - משקל אטומי

Pi - שכיחות איזוטופ

μ_i - משקל איזוטופ;

N - מספר האיזוטופים הקיימים (לגבי יסוד מסוים).

Atomic Mass Unit - A.M.U: יחידת המידה בה נמדדו המשקלים האטומיים.

הגדרתה: 1/12 מהמשקל של אטום פחמן $^{12}_6\text{C}$. כלומר, משקל אטום פחמן $^{12}_6\text{C}$ בודד הוא

12 AMU

מולקולה: מספר אטומים הקשורים יחדיו בקשרים כימיים .. XaYbZc .

משקל מולקולרי: סכום המשקלים האטומיים של כל האטומים המרכיבים את המולקולה (M.W).

מספר אבוגדרו: מספר אטומי הפחמן $^{12}_6\text{C}$ ב- 12 גרם חומר בדיוק (N_A).

$$N_A = 6.022 \times 10^{23} \text{ molecules or atoms}$$

(זהו המעבר בין יחידות מסה אטומיות ליחידות מסה בגרמים).

מול: כמות החומר המכילה מספר אבוגדרו של חלקיקים.

מתוך ההגדרות נובע: משקל 1 מול חומר שווה תמיד למשקל האטומי שלו (או המולקולרי, במקרה ומדובר במולקולה)

המבוטא בגרמים:

$$n \text{ מס' מולים} = \frac{\text{משקל החומר בגרמים}}{\text{משקל אטומי (או מולקולרי)}} = \frac{(\text{גרם})}{(\text{גרם/מול})} = \frac{\text{מס' האטומים (או המולקולות)}}{\text{מס' אבוגדרו}}$$

נוסחה אמפירית: יחס מינימלי בין האטומים המרכיבים את המולקולות. היחס מתואר במספרים שלמים.

נוסחה מולקולרית: מתארת את הרכב האטומים המדויק במולקולה.

ראקציה כימית (משוואה כימית): תגובה של שני אטומים או יותר ליצירת תרכובת אחת (או יותר), תוך שבירת קשרים קיימים ויצירת קשרים אחרים.

סטוכיומטריה: היחס בין היסודות בתרכובת מסוימת, או במשוואה.

סוגי ראקציות כימיות:

יון – אטום טעון. קטיון - יון חיובי, אטום שהוציאו ממנו אלקטרון. אניון – יון שלילי, אטום שהוסיפו לו אלקטרון. תמיסה מורכבת ממס ומומס. המומס יכול להיות מוצק נוזל או גז. בתמיסה מימית, הממס הינו מים. תכונה חשובה של התמיסה היא הריכוז שלה. קיימות יחידות שונות של ריכוז:

1. אחוז משקלי: משקל המומס ב 100 גרם של ממס.

$$100 * [\text{משקל תמיסה (גרמים)} / \text{משקל מומס (גרמים)}] = \text{אחוז משקלי}$$

2. אחוז נפחי: נפח המומס ב 100 מיליליטר (מ"ל) של תמיסה.

$$100 * [\text{נפח תמיסה (מ"ל)} / \text{נפח מומס (מ"ל)}] = \text{אחוז נפחי}$$

3. מולריות: מספר מולים של מומס בליטר (1000 מ"ל) תמיסה. מולריות מסומנת באות M.

$$C (M) = n(\text{mole}) / V (\text{liter}) = [\text{נפח התמיסה (ליטר)} / \text{מס המולים של המומס}]$$

מיהול תמיסות: מיהול תמיסה בריכוז C_1 ובנפח V_1 ייתן תמיסה בנפח V_2 ובריכוז C_2 .

$$C_1 V_1 = C_2 V_2$$

תגובות שיקוע:

כאשר ערבוב של שתי תמיסות נותן חומר קשה תמס ששוקע בתוך הנוזל.

1. רוב מלחי הניטראט (NO_3^-) מסיסים במים.

2. רוב המלחים המכילים Na^+ , K^+ , NH_4^+ מסיסים במים.

3. רוב מלחי הכלוריד (Cl^-) מסיסים במים, מלבד: AgCl , PbCl_2 , Hg_2Cl_2 .

4. רוב מלחי הסולפאט (SO_4^{2-}) מסיסים במים, מלבד: CaSO_4 , PbSO_4 , BaSO_4 .

5. רוב מלחי ההידרוקסיד (OH^-) הינם קשי תמס, מלבד: NaOH , KOH , Ca(OH)_2 .

6. רוב מלחי הסולפיד (S^{2-}), קרבונאט (CO_3^{2-}) ופוספאט (PO_4^{3-}) הינם קשי תמס.

תגובות חימצון-חיזור:

תגובות אשר במהלכן חל שינוי במצב החימצון של המגיבים עקב מסירת אלקטרונים על ידי אחד המגיבים, הוא המחזור, וקבלתן על ידי המגיב האחר, הוא המחמצן.

תהליך חימצון – תהליך בו חומר (המחזור) מוסר אלקטרונים, ומספר החימצון שלו עולה.

תהליך חיזור – תהליך בו חומר (המחמצן) מקבל אלקטרונים ומספר החימצון שלו יורד.

כללים לקביעת מספר החימצון של יסודות בתוך התרכובת:

1. מספר החימצון של יסוד טהור הוא אפס.

2. מספר החימצון של חמצן הוא 2- בכל התרכובות חוץ מבפראוקסידים, שבהם החמצן בעל דרגת חימצון 1 (כמו ב

– H_2O_2).

3. מספר החימצון של מימן הוא +1 חוץ מבתרכובות הידרידים של מתכות בהן דרגת החימצון של המימן היא -1 (כמו ב - NaH, CaH₂)
4. סכום מספרי החימצון של כל היסודות בתרכובת בלתי טעונה שווה לאפס.
5. סכום מספרי החימצון של כל היסודות בתרכובת טעונה שווה למטענה.

איזון משוואות חמצון-חיזור

- רשמו את מספרי החמצון של כל האטומים במשוואה.
- זהו את החומרים שבהם חל שינוי במספר החמצון, וחלקו את המשוואה לשני חצאי תגובה: חמצון וחיזור.
- עבור כל חצי תגובה, בצעו:
 - איזון כל היסודות מלבד חמצן ומימן.
 - איזון חמצן ע"י שימוש במים (H₂O).
 - איזון מימן ע"י שימוש ב- H⁺.
 - איזון מטען ע"י שימוש באלקטרונים.
- לקבלת מספר שווה של אלקטרונים בשני חצאי התגובה, הכפילו כל אחד מהם במספר מתאים.
- חברו את שני חצאי התגובה וצמצמו מולקולות זהות משני צידי המשוואה.
- אם התגובה נעשית בסביבה בסיסית:
 - הוסיפו משני צידי המשוואה מספר יוני OH⁻ כמספר יוני H⁺.
 - חברו יוני OH⁻ ויוני H⁺ ליצירת מולקולות מים.
 - צמצמו מולקולות מים משני צידי המשוואה.
- ודאו שהמשוואה מאוזנת מבחינת חומר ומטען.

גזים

עקרון אבוגדרו: בתנאי לחץ וטמפרטורה שווים, נפחים שווים של גזים מכילים אותו מספר מולקולות.

משוואת המצב של הגזים האידיאליים:

$$PV = nRT$$

P - לחץ (1 atm = 760 mm Hg)

V - נפח (1 liter = 1000 cm³)

T - טמפרטורה, במעלות קלווין (0°C = 273.15 K)

n - מספר מולים

R - קבוע הגזים

$$R = 0.082 \frac{\text{liter} \times \text{atm}}{\text{mole} \times ^\circ\text{K}} = 82.1 \frac{\text{cm}^3 \times \text{atm}}{\text{mole} \times ^\circ\text{K}} = 8.31 \times 10^7 \frac{\text{erg}}{\text{mole} \times ^\circ\text{K}} = 1.98 \frac{\text{cal}}{\text{mole} \times ^\circ\text{K}} = 8.313 \frac{\text{joul}}{\text{mole} \times ^\circ\text{K}} = 62.33 \frac{\text{lit} \times \text{mmHg}}{\text{mole} \times ^\circ\text{K}}$$

צורות נוספות למשוואת הגזים:

$$PV = \frac{W}{M} RT$$

W - משקל החומר

M - משקל מולקולרי

$$PM = \rho RT$$

$$\rho - \text{צפיפות}, \frac{W}{V}$$

לחץ חלקי: הלחץ שהגז היה נמצא בו אילו הוא היה לבדו בכלי.

חוק הלחצים החלקיים של דלתון: הלחץ הכללי בכלי הוא סכום הלחצים החלקיים של כל הגזים הנמצאים בכלי.

$$P_{\text{total}} = \sum_i P_i$$

P_i – הלחץ החלקי של כל אחד מהגזים

P_{total} – הלחץ הכללי של המערכת

$$\frac{P_i}{P_{\text{tot}}} = \frac{n_i}{n_{\text{tot}}} = X_i$$

החלק שכל גז תורם לתערובת נקרא שבר לחצים = שבר מולים.

חוק ואן-דר-ולס:

$$\left(P + \frac{an^2}{V^2} \right) (V - nb) = nRT$$

התורה הקינטית של הגזים:

חוק גרהם: בטמפרטורה ובלחץ קבועים, מהירויות הדיפוזיה של גזים שונים משתנות ביחס הפוך לשורש הריבועי של הצפיפויות או המשקלים המולקולריים:

$$\frac{V_1}{V_2} = \sqrt{\frac{d_2}{d_1}} = \sqrt{\frac{M_2}{M_1}}$$

← לשני גזים באותם תנאי לחץ וטמפרטורה אנרגיה קינטית שווה:

$$(P, T \text{ const}) \quad \frac{1}{2} m_1 V_1^2 = m_2 V_2^2$$

האנרגיה הקינטית של מול אחד של גזים:

$$E_k = \frac{3}{2} RT = \frac{1}{2} M V^2$$

האנרגיה הקינטית של מולקולה אחת של גז:

$$E_k = \frac{3}{2} K_B T = \frac{1}{2} m V^2$$

R – קבוע הגזים למול.

$$K_B = \frac{R}{N_A} - \text{קבוע בולצמן} - \text{קבוע הגזים למולקולה.}$$

M – משקל מולקולרי ביחידות $\frac{Kg}{mole}$.

m – משקל של מולקולה אחת.

מהירות ממוצעת:

$$\bar{V} = \sqrt{\frac{3RT}{M}} = \sqrt{\frac{3K_B T}{m}}$$

תרמוכימיה

קלורимטריה מדידת שינוי החום בראקציה כימית

קיבול החום (Cp) - כמות החום הדרושה כדי להעלות את הטמפרטורה של כמות חומר ב - 1°C

קיבול החום הספציפי/ סגולי כמות החום הדרושה כדי להעלות את הטמפרטורה של 1 גר' חומר ב - 1°C .

$$C_p = m S$$

m-מסה

ע"מ לחשב את כמות החום (Q) שנקלטה או שוחררה בתהליך מסויים יש לדעת את הפרש הטמפ'.

$$\Delta t = t_{\text{final}} - t_{\text{initial}}$$

$$Q = m S \Delta t = C_p \Delta t$$

תרמודינמיקה

התרמודינמיקה דנה בקשר שבין הצורות השונות של האנרגיה (כימית, חשמלית).

החוק הראשון של התרמודינמיקה:

השינוי באנרגיה הפנימית של מערכת שווה לסכום העבודה והחום שהושקעו או נפלטו מהמערכת.

$$\Delta U = Q + W$$

ע"פ חוק שימור האנרגיה

U - אנרגיה פנימית: אנרגיה של תנועות ויברציה של אטומים, אנרגיה קינטית של מולקולות ואנרגיה פוטנציאלית האגורה בקשרים כימיים.

Q - חום: החום הנקלט או הנפלט ע"י המערכת ($Q > 0$ - החום נקלט ע"י המערכת מהסביבה).

W - עבודה: עבודה מוגדרת ככח שמופעל לאורך דרך ($W < 0$ - העבודה מתבצעת ע"י המערכת על הסביבה).

עבודת נפח (התפשטות נפחית) בלחץ קבוע:

$$W = -P\Delta V$$
$$\Delta V = V_2 - V_1$$

$$H = U + PV$$

H - אנטלפיה: האנרגיה הכוללת של המערכת:

$$\Delta H = \Delta U + \Delta(PV)$$

ΔH - השינוי באנטלפיה:

$$\Delta H = \Delta U + P\Delta V$$

בלחץ קבוע, השינוי באנטלפיה:

אנטלפיית הווצרות (חום הווצרות): האנטלפיה הנקלטת ומשתחררת כתוצאה מהווצרות מול אחד של חומר מהיסודות במצבם הסטנדרטי. חום ההווצרות של יסוד מוגדר כאפס.

חוק הס: אנטלפיית ההווצרות בלחץ קבוע אינה תלויה בדרך או במספר השלבים:

$$\Delta H_{\text{tot}} = \Delta H_f (\text{מגיבים}) - \Delta H_f (\text{תוצרים})$$

תגובה אקסותרמית - תגובה שבה נפלטת אנרגיה לסביבה, $\Delta H < 0$.

תגובה אנדותרמית - תגובה שבה נקלטת אנרגיה מהסביבה, $\Delta H > 0$.

ספקטרום אטומי מודל בוהר

גלים וקרינה

$$E = h\nu = h \frac{c}{\lambda}$$

אנרגיה E=

$$h = 26 \cdot 10^{-27} \text{ erg} \cdot \text{sec} = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{sec}$$

$$C = 3 \times 10^{10} \text{ cm/sec} = 3 \times 10^8 \text{ m/sec}$$

$$\nu = \frac{c}{\lambda} (\text{sec}^{-1}) \quad \text{תדירות}$$

$$\lambda = \frac{c}{\nu} (\text{m}) \quad \text{אורך גל}$$

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} (1/\text{m}) \quad \text{מספר גל}$$

$$E = E_0 + E_k$$

אפקט פוטואלקטרי

↓
פונקציית העבודה: אנרגיית הסף
האנרגיה הקינטית של הדרושה לשחרור אלקטרון
הפוטואלקטרוניים 0.5 mV^2

מודל האטום של בוהר - עבור אטום מימן ואטומים דמויי מימן ($\text{He}^+, \text{Li}^{++}, \dots$)

רמות אנרגיה - $n = 1, 2, 3, \dots$

מצב היסוד - $n = 1$

מצבים מעוררים - $n = 2, 3, 4, \dots$

רדיוס הרמה ה-n:

$$r_n = \frac{n^2}{z} a_0, n = 1, 2, 3, \dots$$

↓
מס' הפרוטונים בגרעין האטום

$$a_0 = \frac{h^2}{4\pi k m e^2} = 0.05292 \text{ nm} \equiv 0.5 \text{ \AA}$$

$$K = 8.98 \cdot 10^9 \text{ Nm}^2/\text{c}^2 \quad \text{קבוע}$$

$$m = 9.1 \cdot 10^{-31} \text{ Kg} \quad \text{מסת האלקטרון}$$

$$e = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ c} \quad \text{מטען האלקטרון}$$

אנרגיית הרמה ה-n:

$$E_n = -R_H \frac{Z^2}{n^2}$$

R_H - קבוע רידברג

$$R_H = 2.18 \times 10^{-18} \text{ Jaule} = 2.18 \times 10^{-11} \text{ erg} = 109678 \text{ cm}^{-1} = 3.29 \times 10^{15} \text{ sec}^{-1} = 13.6 \text{ ev}$$

הפרש אנרגיה בין שתי רמות - משוואת רידברג

$$\Delta E = h \nu = E_f - E_i = R_H z^2 \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right) \quad i = \text{intial}; f = \text{final}$$

$$\nu = \frac{|\Delta E|}{h} = \frac{R_H}{h} z^2 \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right) \quad \text{תדירות המעבר}$$

אנרגיית יוניזציה

$$E_I = R_H z^2 \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{\infty^2} \right) = R_H z^2 \frac{1}{n_i^2} \quad \Leftarrow n_f = \infty$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m_e \nu} \quad \text{אורך גל זה-ברולי}$$

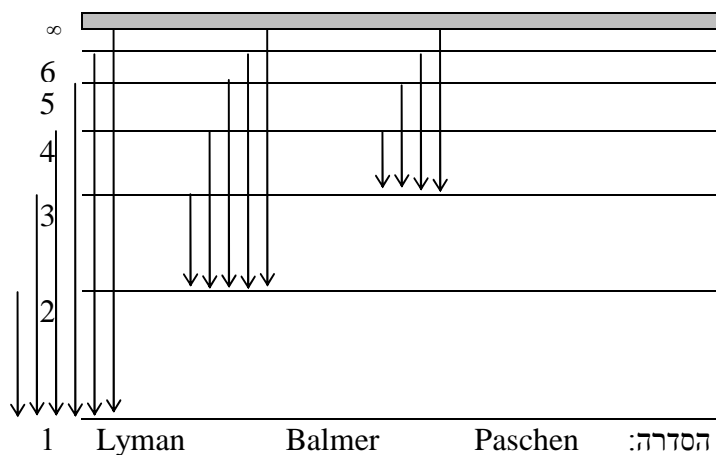
p - תנע

m_e - מסת האלקטרון

v - מהירות

רמות האנרגיה באטום מימן וסדרות הפליטה השונות:

n



אטומים רב אלקטרוניים

אורביטל – אזור (מסלול) בו יש סיכוי למצוא אלקטרון.

מיקום האלקטרון באורביטל מסוים מאופיין בעזרת 4 מספרים קוונטיים, המספרים הללו נובעים מפיתרון פונקציית הגל:

n - מספר קוונטי ראשי, מתאר את הרמה האנרגטית שבה נמצא האלקטרון. מאפיין את הנפח האפקטיבי של האורביטל סביב הגרעין. יכול לקבל ערכים שלמים וחיוניים. $n=1,2,3,\dots$. (עבור אטום מימן או דמוי מימן, זהו המספר היחיד שקובע את האנרגיה, כלומר אורביטלים בעלי אותו n הנם שווים אנרגיה \equiv מנוונים).

l - מספר קוונטי משני, קובע את התנע הזוויתי של האלקטרון. מתאר את צורת האורביטל במרחב. יכול לקבל ערכים: $l=0, 1, 2, 3, \dots, (n-1)$

s p d f סוג האורביטל

עבור אטום רב אלקטרוני גם ערך זה משפיע על האנרגיה, כל האורביטלים בעלי ערכים זהים של n ושל l הנם שווים אנרגיה \equiv מנוונים, אלא שכיוונם במרחב שונה: p_x, p_y, p_z

m_l - מספר קוונטי מגנטי, נובע מהיווצרות אפקט מגנטי כתוצאה מתנועת האלקטרון, מתאר את הכיוונית המרחבית של האורביטל האטומי. יכול לקבל ערכים של: $m_l = -l, \dots, 0, \dots, +l$

בסה"כ $2l+1$ ערכים אפשריים.

m_s - מספר קוונטי של ספין, מאפיין את סיבוב האלקטרון סביב עצמו. יכול לקבל שני ערכים בלבד:

$$m_s = +1/2, -1/2$$

כללים לאכלוס אלקטרונים:

עקרון פאולי: לא יתכנו שני אלקטרונים באותו אטום בעלי אותו סט של מספרים קוונטים זהים. מכאן, שאורביטל המוגדר ע"י n, l, m_l יכול להכיל לכל היותר שני אלקטרונים בעלי ספינים הפוכים: $+1/2, -1/2$

כלל הונד (כלל האוטובוס): כאשר מאכלסים אלקטרונים באורביטלים מנוונים, הם יכנסו קודם כל כבודדים בעלי ספינים מקבילים (אותו מספר ספין), ורק אחר כך מתחילים לזווג אותם.

המספר המירבי של אלקטרונים ברמה קוונטית ראשית n הוא $2n^2$.

סדר מילוי האורביטלים: כלל $n+1$: האלקטרונים ימולאו בסדר עולה של הסכום $n+l$. אם הסכום הזה שווה עבור שני אורביטלים שונים, ממלאים ראשית את האורביטל בעל n נמוך יותר. (מלבד מקרים חריגים !!!)

תכונות מגנטיות של חומר:

פאראמגנטי: חומר בעל אלקטרונים בלתי מזווגים. נמשך מעט למגנט.

דיאמגנטי: חומר שבו כל האלקטרונים מזווגים. לא נמשך למגנט.

פרומגנטי: חומר פאראמגנטי אשר בו האלקטרונים הבלתי מזווגים מסודרים בספינים מקבילים. נמשך חזק למגנט.

נתונים פיזיקליים והמערכה המחזורית

[illegible]

- תכונות משתנות
כשהולכים משמאל
לימין.

- תכונות דומות
כשהולכים מלמעלה
למטה.

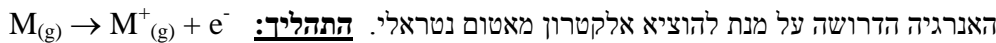
לנטיניים	*	} מופרדים כי יש להם תכונות דומות, והיו מפריעים למחזוריות
אקטיניים	•	

רדיוס אטומי:

רדיוס קטן עקב מטען
אפקטיבי חזק יותר

רדיוס היום השלישי < רדיוס האטום < רדיוס היום החיובי

אנרגיית (פוטנציאל) יוניזציה:



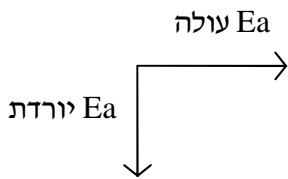
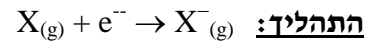
E_I גדלה עקב מטען אפקטיבי גדול ורדיוס קטן

E_r קטנה עקב
 רדיוס אטומי
 עולה -
 האלקטרון
 ממוסך יותר

מיסוד - אפקט של הקטנת המטען הגרעיני המורגש ע"י אלקטרונים חיצוניים עקב נוכחותם של אלקטרונים פנימיים.

אפניויות אלקטרוניות:

האנרגיה המשתחררת כשמוסיפים אלקטרון לאטום ניטרלי.



הקשר הכימי

הקשר היוני- קשר אשר בו אלקטרונים מאטום אחד עוברים לקליפת הערכיות (הקליפה החיצונית) של האטום השני, כך שכל אחד מגיע למצב של קליפה מלאה. לדוגמה:

הקשר נוצר בין אטום בעל אנרגיית יון נמוכה (מתכת אלקלית או מתכת אלקלית עפרורית) לבין אטום בעל אפניויות אלקטרונית גבוהה (למשל הלוגן). הקשר יוצר אם בסה"כ התהליך נפלטת אנרגיה:

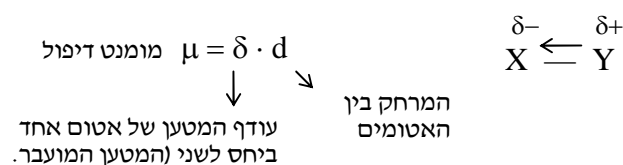
קשר קוולנטי: קשר שבו האלקטרונים משותפים במידה שווה ע"י שני אטומים, בכדי להשלים את קליפת הערכיות של שניהם.

אלקטרושליליות: מבטאת את היכולת של האטום למשוך כלפיו אלקטרונים המשתתפים בקשר כימי. סקלת המספרים 0-

4. היסוד F הוגדר כ- 4. גודל זה אינו מדיד והוא נגזר מחישובים מתמטיים. ככל שהאלקטרושליליות גבוהה יותר כך גם כך האלקטרון רוצה יותר למשוך אליו את האלקטרון הקשר.

האלקטרושליליות עולה עם ההתקדמות ימינה בטבלה המחזורית, ויורדת לאורך הטורים. כאשר ההפרש באלקטרושליליות גדול מ- 1.9 יוצר קשר יוני.

מומנט דיפול: זהו גודל מדיד (יחידות: Debye), המודד את מידת קוטביות (פולריות) הקשר הנובע מכך שאחד האטומים יותר אלקטרו שלילי, כלומר, אלקטרוני הקשר יהיו מוסטים לכיוונו.



מומנט הדיפול הוא גודל וקטורי ובכל מולקולה ניתן לחשב את גודל מומנט הדיפול הכולל כסכום וקטורי של המומנטים של הקשרים היחידים.

קשר קוולנטי קוטבי: קשר קוולנטי בין אטומים שיש הבדל באלקטרושליליות שלהם, כך שאלקטרוני הקשר מוסטים לעבר האטום האלקטרושלילי יותר.

נוסחת לואיס: ציור האלקטרונים הוולנטים (החיצוניים, אלקטרוני הערכיות) המשתתפים בקישור + האלקטרונים הוולנטים שלא משתתפים בקישור, ומהווים זוגות גלמודים (lone pair). הציור נעשה בדו"כ על בסיס כלל האוקטט – השאיפה של כל אטום למלא את הקליפה החיצונית ב- 8 אלקטרונים. כלל זה אינו תקף מהשורה השלישית (במערכה במחזורית) ומטה, ולגבי יוצאים מין הכלל מהשורה השנייה.

כללים לכתיבת מבנה לואיס

- I. נוסחת המולקולה והקשרים בין האטומים נקבעים באופן ניסיוני, וניתנים בבעיה.
- II. יש לספור את סך כל האלקטרונים הערכיים במולקולה.
- III. יש לחבר בין האטומים הקשורים ביניהם על ידי שתי נקודות (זוג אלקטרונים) או על ידי קו.
- IV. ספור את מספר האלקטרונים בקשרים שכתבת, והשווה את המספר שקבלת למספר האלקטרונים הוולנטים הכללי.
- V. הוסף זוגות אלקטרונים כך שמספר רב ככל האפשר של אטומים יגיע לאוקטט (מלבד מימן שמקבל רק שני אלקטרונים). אם מספר האלקטרונים אינו מספיק לקבלת אוקטט לכל האטומים, הוסף אלקטרונים לאטומים לפי סדר אלקטרושליליות יורד.
- VI. אם יש אטומים שלא קבלו אוקטט, השתמשו באלקטרונים בלתי קושרים לקבלת קשר כפול או משולש עד לקבלת אוקטט.
- VII. יש לחשב מטען פורמלי לכל אטום.

חישוב מטען פורמלי:

- I. ספור את מספר האלקטרונים סביב אטום כלשהו המופיע בנוסחת לואיס.
- II. הפחת ממספר זה את כל האלקטרונים שהאטום קיבל כתוצאה מהקשרים הקוולנטים שבהם הוא משתתף.
- III. אם מספר האלקטרונים שקבלת בסעיף ב' קטן ממספר אלקטרוני הערכיות של האטום, לאטום יהיה מטען פורמלי חיובי. אם מספר האלקטרונים גדול ממספר אלקטרוני הערכיות של האטום, לאטום יהיה מטען פורמלי שלילי. אם המספרים זהים, המטען הפורמלי יהיה אפס.

קשר קואורדינטיבי: קשר הנוצר כאשר אטום אחד תורם 2 אלקטרונים לשותף.

רזוננס: מבנים אלקטרוניים של מולקולות (בשיטת לואיס) כך שקיימים מספר מבנים המתארים את אותה המולקולה (כל המבנים הם בעלי אותה אנרגיה). המרכזים הגרעיניים נשארים במקום קיים הבדל בסידור של האלקטרונים.

המבנה המרחבי של מולקולות

תורת VSEPR

לפי מודל זה יקבע המבנה המרחבי של מולקולות באופן הבא:

1. צייר נוסחת לואיס למולקולה.
2. קבע מהו מספר הכיוונים במרחב סביב האטום המרכזי. כל קשר כימי (יחיד, כפול או משולש) תופס כיוון אחד. זוג אלקטרונים בודד תופס גם הוא כיוון אחד.
3. קבעו את המבנה לפי מספר הכיוונים במרחב:
 - 2 כיוונים \Leftarrow מבנה קוי (זווית 180°).
 - 3 כיוונים \Leftarrow מבנה מישורי (זווית 120°) או זוויתי.
 - 4 כיוונים \Leftarrow מבנה טטרהדרלי (זווית 109°), פירמידלי, או זוויתי.
 - 5 כיוונים \Leftarrow מבנה דופירמידה משולשת, טטרהדרי מעוות, צורת T, או קווי.
4. קבעו מבנה מרחבי סופי של המולקולה לפי הכיוונים שבהם יש קשרים (ולא זוגות בודדים).

(2) היברידיזציה (הכלאה)

האורביטאלים האטומיים המתאימים (מבחינה מרחבית) של האטומים משתתפים בקשר יתערבבו ויווצרו אורביטאלים מולקולריים שהם הכלאה (היברידיזציה) של האורביטאלים האטומיים. לפי צורתם במרחב של האורביטאלים ההברידים יקבע גם המבנה המרחבי של המולקולה

שיטת האורביטלים המולקולריים (M.O)

כללים ליצירה ואיכלוס של אורביטלים מולקולריים:

- מספר האורביטלים המולקולריים שנוצרים הוא כמספר האורביטלים האטומיים שיצרו אותם.
- האורביטלים המולקולריים נוצרים מחיבור וחיסור של אורביטלים אטומיים. אורביטל פירושו פונקציית גל: חיבור פירושו התאבכות בונה, כלומר ירידה באנרגיה. חיסור פירושו התאבכות הורסת, כלומר עליה באנרגיה.
- לאחר יצירת האורביטלים המולקולריים ניתן לאכלסם. אין חשיבות למקור האלקטרון (מאיזה אטום), אלא רק למספר הכללי של האלקטרונים שיש לאכלס.
- כל אורביטל מולקולרי יכול להכיל רק 2 אלקטרונים בעלי ספינים הפוכים (עקרון פאולי).
- סדר מילוי האורביטלים המולקולריים – מהאנרגיה הנמוכה לגבוהה.
- אם יש אורביטלים מנוונים (בעלי אותה אנרגיה), הם מאוכלסים עפ"י כלל הונד – ז"א כלל האוטובוס – האלקטרונים יכנסו לחוד, בספינים מקבילים, ורק אח"כ יזווגו.
- אורביטל מולקולרי שהינו סימטרי ביחס לציר הבין-גרעיני נקרא אורביטל σ
- אורביטל מולקולרי שהינו אנטי סימטרי ביחס לציר הבין-גרעיני נקרא אורביטל π .
- אורביטל הנוצר ע"י התאבכות הורסת (חיסור) נקרא אורביטל אנטי קושר ומסומן בכוכבית - σ^* , π^* .
- אורביטל הנוצר ע"י התאבכות בונה (חיבור) נקרא אורביטל קושר ומסומן - σ , π .
- אורביטל שאינו עובר שום אינטרקציה עם אורביטל נוסף נקרא לא קושר - n.b

סדר הקשר, B.O (bond order):

מדד לחוזק הקשר נתון ע"י:

$$B.O = 0.5 * (\text{מספר אלקטרונים אנטי קושרים} - \text{מספר אלקטרונים קושרים})$$

ככל ש-B.O גדול יותר, הקשר חזק יותר וקצר יותר.

מוצקים

מוצקים נבדלים מנוזלים וגזים בהיותם בעלי נפח וצורה מוגדרים.

מבנה גבישי

הגביש הוא מוצק המסודר במבנה מחזורי בשלושה ממדים. יחידת המבנה הקטנה ביותר המתארת את מבנה הגביש נקראת **תא יחידה**. תא היחידה הוא בעל סימטריה אופיינית בשלושה צירים: a, b, c. מערך שלם של תאי יחידה מרכיב את השריג הגבישי.

קיימים שבעה סוגים בסיסיים של תאי יחידה הנבדלים אלה מאלה הן על פי אורכי הצלעות a, b, c והן על פי גודל הזוויות α, β, γ . אולם, בתאי יחידה קוביים, שהם תאי היחידה בעלי הסימטריה הגבוהה ביותר ($a=b=c, \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$). קיימים שלושה סוגים של תאי יחידה קוביים:

I. קובי פשוט – SC.

II. קובי ממורכז גוף – BCC.

III. קובי ממורכז פאה – FCC.

הקשר בין אורך צלע תא היחידה a לבין רדיוס האטום r.	מס' האטומים בתא היחידה	סוג תא היחידה
$a = 2r$	$1/8 \times 8 = 1$	sc
$a = 4r/\sqrt{3}$	$1/8 \times 8 + 1 = 2$	bcc
$a = \sqrt{8}r$	$1/8 \times 8 + 1/2 \times 6 = 4$	fcc

נפח של אטום (מקורב לנפח של כדור): $V(\text{atom}) = (4/3)\pi r^3$

רדיוס אטומי-r

צפיפות המוצק-

$$\rho = W/V = (M_w * Z) / (V * N_a)$$

ρ - צפיפות המוצק

W – משקל

V – נפח (שווה ל- a^3)

M_w – משקל מולקולרי

Z – מס' האטומים בתא יחידה

N_a – מס' אבוגדרו

מתח פנים (γ) – האנרגיה הדרושה ליצירת שטח פנים חדש ע"י העברת מולקולות מנפח הנוזל אל פני השטח. כוחות אינטרמולקולריים גדולים יותר, (בעיקר קשרי מימן), גורמים למתח פנים גבוה יותר.

פעילות קפילרית – עליית נוזל במעלה צינורית דקה עקב כוחות משיכה בין הנוזל לשטח הפנים הפנימי של הצינורית \Leftarrow כוחות אדהזיה. כוחות המשיכה של מולקולות הנוזל בינם לבין עצמם נקראים כוחות קוהזיה.
הקשר שבין הפעילות הקפילרית למתח פנים:

$$h = 2\gamma / \rho g r$$

h – גובה הנוזל בצינור הקפילרי

ρ – צפיפות הנוזל

r – רדיוס הקפילרה

g – תאוצת הכבידה (9.8 m/sec^2)

לחץ אדים – הלחץ הנוצר על פני הנוזל ע"י אדי הנוזל כאשר הם נמצאים בשיווי משקל דינמי (בכלי סגור). ככל שהטמפרטורה גבוהה יותר לחץ האדים גבוה יותר. ככל שהאידיוי איטי יותר לחץ האדים נמוך יותר. ככל שהכוחות האינטרמולקולריים חזקים יותר לחץ האדים נמוך יותר.

הקשר בין לחץ האדים לטמפ' – משוואת קלאוסיוס-קלפירון Clausius-Clapeyron :

$$\ln P = - \frac{\Delta H_v}{RT} + C$$

R = gas constant

ΔH_v = enthalpy of vaporization

עבור שתי נקודות של לחץ וטמפרטורה, המשוואה מקבלת את הצורה:

$$\ln \frac{P_1}{P_2} = - \frac{\Delta H_v}{R} \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)$$

P_1 = Pressure at temperature T_1

P_2 = Pressure at temperature T_2

באותה הצורה ניתן להתייחס למעבר פאזה בין מוצק לגז, דהיינו לתהליך ההמראה (סובלימציה). כאשר P הינו לחץ האדים מעל המוצק ו ΔH_s (אנתלפית הסובלימציה) מחליף את ΔH_v .

דיאגרמת פאזות: דיאגרמה המתארת את היחסים ההדדיים ואת תנאי שיווי המשקל בין מצבי הצבירה השונים כתלות בלחץ ובטמפרטורה.

הנקודה המשולשת שלושת הפאזות נמצאות בשיווי משקל
הנקודה הקריטית מעל טמפרטורה זו אין אפשרות לקיום נוזל.

לחץ אדים ונקודת רתיחה T_b הנורמלית – טמפרטורת רתיחה כאשר הלחץ החיצוני משתווה ללחץ האטמוספרי היינו 1 atm .

נקודת קיפאון T_f הנורמלית – מוגדרת כטמפרטורה בה הנוזל קופא תחת לחץ של 1 atm . בלחץ גבוה יותר רב הנוזלים קופאים בטמפ' גבוהה יותר (אולם אפקט הלחץ הוא נמוך) – מים הינם יוצאים דופן!

טמפרטורה קריטית T_c – הטמפ' אשר מעליה החומר אינו יכול להתקיים יותר כנוזל. (גז הנמצא מעל לטמפ' הקריטית לא יוכל להתעבות לנוזל).

טבלת מיון המוצקים:

יוני	אטומי	מולקולרי	מתכתי
היחידות המרכיבות	יונים	אטומים	מולקולות
כוחות הקישור	משיכה אלקטרוסטטית M^+-X^-	קוולנטים - אלקטרונים משותפים	משיכה אלקטרוסטטית M^+-e^-
תכונות	קשים, נק' היתוך גבוהה, מוליכים בתמיסה	קשים מאוד, נק' היתוך גבוהה, לא מוליכים	קשים/רכים מוליכים חשמל, בעלי ברק מתכתי
דוגמאות	KNO_3 , NaCl	יהלום, קוורץ: SiO_2	Na, Cu, Fe

תמיסות

תמיסה - תערובת הומוגנית של חומר אחד (מומס) בחומר אחר (ממס).

תמיסה רוויה - תמיסה אשר חלק המומס שבה הנמצא במצב מסיס וחלק המומס אשר עדיין לא התמוסס נמצאים בשיווי משקל דינמי. (כלומר, קצב המסת המומס שווה בדיוק לקצב התהליך ההפוך לו).

מסיסות (S) - מסיסות חומר בממס הוא הריכוז של התמיסה הרוויה שלהם.

יחידות	נוסחה	סימון	
$\frac{\text{mole}}{L}$	$\frac{n}{V}$	[x]	ריכוז מולרי
$\frac{gr}{L}$	$\frac{w(\text{מומס})}{V(\text{נמיסה})}$	C_x	ריכוז משקלי
$\frac{\text{mole}}{Kg}$	$\frac{n(\text{מומס})}{w(\text{ממס})}$	m	מולליות
חסר יחידות	$\chi(\text{מומס}) = \frac{n(\text{מומס})}{n(\text{ממס}) + n(\text{מומס})}$	χ	שבר מולי
ppm	מספר מולקולות מומס למיליון מולקולות ממס		ppm
חסר יחידות	$\%(\text{מומס}) = \frac{w(\text{מומס})}{w(\text{ממס}) + w(\text{מומס})} \times 100$	%	אחוז משקלי

תלות המסיסות של גז בלחץ

חוק הנרי: מסיסות גז בנוזל היא פרופורציונלית ללחצו החלקי של הגז.

$$C = k_H \cdot P$$

P - הלחץ החלקי של הגז

k_H - קבוע הנרי (תלוי בגז, בממס ובטמפ')

השפעת הטמפ' על המסיסות

עבור גזים- המסיסות קטנה עם העלייה בטמפ'

עבור מוצקים - אצל רובם המסיסות עולה עם העלייה בטמפ'

ΔH_{sol} - אנתלפיית התמיסה היא החום המשתחרר/הנצרך עקב תגובת ההמסה.

$$\Delta H_{sol} = \Delta H_L + \Delta H_H$$

ΔH_L - אנתלפיית הסריג

ΔH_H - אנתלפיית ההדרטציה

תכונות קולגטיביות

אפקט המומס על התכונות הפיסיקליות של התמיסה.

תכונה קולגטיבית - תכונה התלויה רק במספר יחידות המומס הנמצאים בתמיסה ולא בהרכבם הכימי.

קיימים 4 שינויים עיקריים התלויים בתכונות קולגטיביות:

1. הורדת לחץ האדים.
2. העלאת נקודת הרתיחה הנורמלית של התמיסה (יחסית לממס הטהור).
3. הורדת נקודת הקיפאון הנורמלית של התמיסה (יחסית לממס הטהור).
4. יצירת לחץ אוסמוטי.

• הורדת לחץ האדים:

חוק Raoult: לחץ האדים של תמיסה (עבור מומס לא נדיף) הינו פרופורציונלי לשבר המולי של הממס בתמיסה

$$P = \chi_{\text{תמיסה}} \cdot P^*$$

P^* - לחץ האדים של הממס הטהור

P - לחץ האדים של התמיסה

תמיסה אידיאלית - תמיסה המקיימת את חוק ראול בכל ריכוז.

• העלאת נקודת הרתיחה הנורמלית:

נובע ישירות מהירידה בלחץ האדים, (לרב העלייה לא גבוהה). העלייה בנקודת הרתיחה הינה

פרופורציונלית למולליות של התמיסה:

$$\Delta T_b = i k_b m$$

ΔT_b - מידת העלייה בנקודת הרתיחה

m - מולליות

k_b - קבוע נקודת הרתיחה של הממס

i - מקדם ונט הוף. בתמיסות מהולות בהן ניתן להתייחס ליונים בעלי מטענים הפוכים בתמיסה כיונים מופרדים מולליות התמיסה מושפעת מכל אחד מהיונים. (אם NaCl מומס יש שני יונים בתמיסה ולכן $i = 2$). i הוא ההבדל בין מולליות אפקטיבית ומולליות מעשית של היונים.

הורדת נקודת הקיפאון - הירידה בנקודת הקיפאון של תמיסה פרופורציונלית גם היא למולליות:

$$\Delta T_f = i k_f m$$

ΔT_f - מידת הירידה בנקודת הקיפאון

k_f - קבוע נקודת הקיפאון של הממס

m - מולליות

i - מקדם ונט הוף.

שימוש בירידה בנקודת הקיפאון למציאת המשקל המולקולרי (כאשר משקל המומס ומשקל הממס הטהור ידועים). מחילוך מספר מולי המומס ומידעת משקל המומס ניתן לחשב את המשקל המולקולרי.

$$m = \frac{\Delta T_f}{k_f} = \frac{n(\text{מומס})}{w(\text{ממס})}$$

אוסמוזה:

המעבר של ממס דרך ממברנה חצי חדירה לתמיסה מרוכזת יותר.

לחץ אוסמוטי Π - הלחץ הדרוש כדי להפסיק את זרימת הממס.

משוואת ונט הוף: $\Pi = i \times RT \times [\text{מומס}]$

R - קבוע הגזים (0.082 lit atm/mole K)

T - טמפרטורה (K)

i - מקדם ונט הוף

[מומס] - ריכוז המומס.

ב- 25°C : $RT = 24 \text{ lit atm/mole}$