

סטוכיומטריה - בתרגולים בלבד.

**כימיה** - לימוד החומר, תכונותיו והשינויים שהוא עובר.

**חומר** - כל דבר שתופס נפח ויש לו מסה.

**חומר מורכב מאטומים** ("כדור" ברדיוס בערך  $10^{-10} m = 1A^\circ$ )

**סימון לאטומים:**  ${}^A_Z X$

$X$  - שם / סוג האטום.

$A$  - מספר מסה.

$Z$  - מספר אטומי.

לדוגמה:  ${}^{16}_8 O$  - חמצן.  ${}^{12}_6 C$  - פחמן.  ${}^1_1 H$  - מימן.

אטום מורכב מחלקיקים קטנים יותר:

$Z$  פרוטונים,  $Z$  אלקטרונים ו  $A - Z$  ניוטרונים.

פרוטון הוא חלקיק עם מטען חיובי,  $+e$ .  $1e = 16 \times 10^{-19} c$  כאשר  $c$  הוא יחידת קולון.

אלקטרון הוא חלקיק עם מטען שלילי,  $-e$ .

ניוטרון הוא חלקיק ניטרלי - בלי מטען.

המסה של הפרוטון היא  $m_p = 1.673 \times 10^{-27} kg$

המסה של הניוטרון היא  $m_n = 1.675 \times 10^{-27} kg$

המסה של האלקטרון היא  $m_e = 9.109 \times 10^{-31} kg$

נשים לב ש  $m_e \ll m_n, n_p$  כלומר, המסה של האלקטרון קטנה בהרבה מהמסה של הפרוטון והניוטרון.

$$m_e \approx \frac{1}{1840} m_p - \text{מסת האלקטרון היא בערך אחד חלקי 1840 כפול מסת הפרוטון.}$$

אטום בעל מספר אטומי  $Z$  מסוים נקרא **יסוד כימי** (chemical element).

אוסף כל האטומים מסוכם ב**טבלה המחזורית**.

כל היסודות בעלי מספר אטומי זהה  $Z$  אך עם מספר מסה  $A$  שונה, נקראים **איזוטופים** של היסוד.

לדוגמה, איזוטופים של חמצן:  ${}^{16}_8 O$  - האיזוטופ הנפוץ ביותר. (יש בו  $16 - 8 = 8$  ניוטרונים)

קיימים גם האיזוטופים  ${}^{17}_8 O$ ,  ${}^{18}_8 O$  (באיזוטופים אלו יש יותר ניוטרונים - 9 ו 10 בהתאמה).

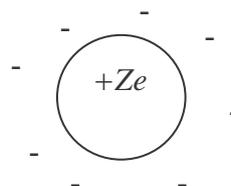
**מבנה האטום:**

כל הפרוטונים והניוטרונים מרוכזים באזור קטן מאוד (הרדיוס הוא בערך  $10^{-14} m$ ) במרכז האטום,

שנקרא גרעין.

האלקטרונים נמצאים במרחב שמסביב לגרעין.

גודל האטום הוא הגודל שענן האלקטרונים תופס.



התיאוריה הפשוטה ביותר למבנה האטום: **מודל האטום של Bohr (1913):**

(בדיעבד הסתבר שהמודל נכון רק עבור אטום המימן - אטום הכולל פרוטון אחד בגרעין ואלקטרון אחד סביבו, ועבור יונים דמויי מימן - גרעין + אלקטרון בודד, כמו למשל יון הליום  $He^+$  ( $Z = 2$ ) בעל 2 פרוטונים שחסר לו אלקטרון אחד או  $L_i^{++}$  ( $Z = 3$ ) - ליתיום).

### מודל האטום של Bohr:

1. האלקטרון נע סביב הגרעין במסלול מעגלי.
2. האלקטרון יכול לנוע רק במסלולים מיוחדים שבהם האנרגיה שלו קבועה ("מצבים קשורים").
3. התנע הזוויתי של האלקטרון במסלולים הללו הוא כפולה שלמה של  $\frac{h}{2\pi}$ .

$$(h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{sec} - \text{הקבוע של פלנק}).$$

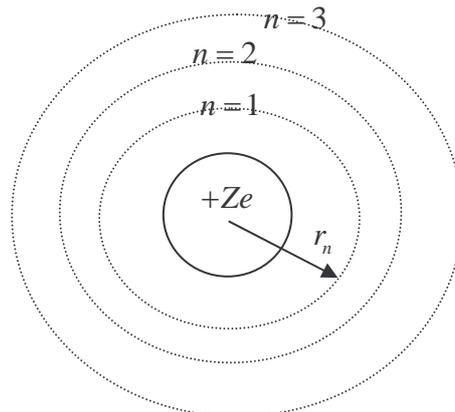
$$L = mvr = n \left( \frac{h}{2\pi} \right) - \text{תנע זוויתי.}$$

כאשר  $m$  היא מסת האלקטרון,  $v$  היא המהירות ו  $r$  הוא רדיוס התנועה.  $n$  הוא מספר טבעי כלשהו.

$$L = n \cdot \hbar \quad \text{מסמנים} \quad \frac{h}{2\pi} = \hbar$$

$n = 1, 2, 3, \dots$  - מספר שלם חיובי.  $n$  נקרא מספר קוונטי (quantum number).

4. האלקטרון יכול לעבור בין המסלולים המיוחדים השונים ע"י בליעה או קליטה של אור (פוטון).



המעגלים המקווקווים הם מסלולים אפשריים עבור האלקטרון.

1. תנועה מעגלית ברדיוס  $r_n$  של האלקטרון סביב הגרעין, בהשפעת הכוח החשמלי שבין הגרעין הטעון ב  $+Ze$  לבין האלקטרון, הטעון במטען  $-e$ .

$$\frac{mv_n^2}{r_n} = \frac{Ze^2}{(4\pi\epsilon_0)r_n^2} - \text{הכוח הצנטריפוגאלי שווה לכוח החשמלי.}$$

$m$  היא מסת האלקטרון.

$r_n$  הוא רדיוס התנועה במצב / במסלול  $n$ .

$v_n$  היא מהירות התנועה במצב / במסלול  $n$ .

$Z$  הוא מספר הפרוטונים בגרעין.

$$\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12} \text{ F/m}$$

2. התנע הזוויתי הוא כפולה שלמה של  $\hbar$ , כלומר  $mv_n r_n = n\hbar$  עבור  $n = 1, 2, 3, \dots$

$$\text{לכן} \quad v_n = \frac{n\hbar}{mr_n}$$

מציבים את המשוואה השניה בראשונה ומקבלים:  $n^2 = \frac{1}{Z} \left[ \frac{(4\pi\epsilon_0)\hbar^2}{me^2} \right]$  עבור  $n = 1, 2, 3, \dots$ .  
אלו הם רדיוסי התנועה האפשריים של האלקטרון סביב הגרעין.

$$\text{נגדיר: } a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} \text{ - רדיוס Bohr.}$$

$$\text{נקבל: } a_0 = 0.529 \text{ \AA} = 0.529 \times 10^{-10} \text{ m}$$

$$r_n = \frac{a_0}{Z} n^2 \text{ עבור } n = 1, 2, 3, \dots$$

בכל מצב אפשרי, יש לאלקטרון רדיוס תנועה שונה. כל זה נכון לאטומי מימן וליונים דמויי מימן.

המהירויות במסלולים / במצבים המותרים:

$$v_n = \frac{nh}{mr_n} = \frac{\hbar Z}{ma_0 n} \text{ עבור } n = 1, 2, 3, \dots$$

מתוך המהירות ניתן לחשב את האנרגיה הקינטית במסלולים המותרים:

$$T_n = \frac{1}{2} m v_n^2 = \frac{1}{2} \frac{\hbar^2 Z^2}{m a_0^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

האנרגיה הפוטנציאלית במסלולים המותרים:

$$V_n = -\frac{Ze^2}{(4\pi\epsilon_0)r_n} = -\frac{Z^2 e^2}{(4\pi\epsilon_0)a_0} \cdot \frac{1}{n^2}$$

האנרגיה הכללית במסלולים / במצבים האפשריים של האלקטרון:

$$E_n = T_n + V_n = \frac{-e^2 Z^2}{(8\pi\epsilon_0)a_0} \cdot \frac{1}{n^2} = -\frac{m}{2\hbar^2} \left( \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \cdot \frac{1}{n^2}$$

$$R_H = \frac{m}{2\hbar^2} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 = 2.18 \times 10^{-18} \text{ J} = 13.6 \text{ eV} \text{ :Rydberg קבוע}$$

$$\text{נקבל: } E_n = -R_H \frac{Z^2}{n^2} \text{ - האנרגיות האפשריות עבור האלקטרון.}$$

נשים לב שהאנרגיה היא שלילית.

$$E_n = -R_H \frac{1^2}{n^2} = -\frac{R_H}{n^2} \text{ ולכן } Z = 1 \text{ במימן,}$$

$$\text{עבור } n = 1 \text{ נקבל } E_1 = -13.6 \text{ eV}$$

$$\text{עבור } n = 2 \text{ נקבל } E_2 = \frac{-13.6 \text{ eV}}{4} = -3.4 \text{ eV}$$

$$\text{עבור } n = \infty \text{ נקבל } E_\infty = 0$$

$n = 1$  נקרא **מצב היסוד (ground state)** - המצב בעל האנרגיה הנמוכה ביותר (הכי שלילית)  $E_1$

ורדיוס התנועה הקטן ביותר  $r_1$ .

$n > 1$  נקראים **מצבים מעוררים (excited states)**

לערך המוחלט של  $E_n$  קוראים אנרגית קשר.

מעבר מרמת אנרגיה נמוכה לרמת אנרגיה גבוהה, מתבצע על ידי בליעת פוטון.

מעבר מרמת אנרגיה גבוהה לרמת אנרגיה נמוכה, מתבצע על ידי פליטת פוטון.

**פוטונים (photon)** - החלקיקים שמרכיבים את האור (איינשטיין, 1905).

הם נעים במהירות האור:  $C = 2.998 \times 10^8 \text{ m/sec}$ .

האנרגיה של פוטון בודד:  $E_{\text{photon}} = h\nu = h \frac{C}{\lambda}$ .

$\nu$  - התדירות שמאפיינת את הפוטון [Hz]

$\lambda$  - אורך הגל שמאפיין את המטען [m]

$$h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{sec}$$

לפעמים נוח להסתכל על הפוטון כעל חלקיק ולפעמים כעל גל של קרינה אלקטרומגנטית, כלומר: גל של

$$E(x, t) = A \sin \left[ 2\pi \left( \nu t + \frac{x}{\lambda} \right) \right].$$

שדה חשמלי ומגנטי.

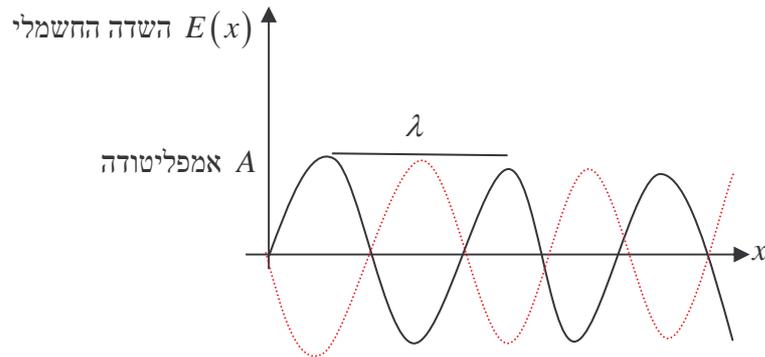
פוטונים - חלקיקים שמרכיבים את האור. ניתן להסתכל על פוטון כעל חלקיק או כעל גל. כאשר מסתכלים על פוטון כעל חלקיק:

$$E_{\text{photon}} = h\nu = h \frac{C}{\lambda}$$

$$\nu [Hz] - \text{תדירות הפוטון, נמדדת בהרץ.}$$

$$\lambda [m] - \text{אורך הגל, נמדד במטרים.}$$

כאשר מסתכלים על פוטון כעל גל (אלקטרו-מגנטי):



$$E(x, t) = A \sin \left[ 2\pi \left( \nu t + \frac{x}{\lambda} \right) \right]$$

דוגמה: מה התדירות והאנרגיה של פוטון בעל א"ג (אורך גל) של  $\lambda = 243 \text{ nm}$  (ננו מטר)?

$$\lambda = 243 \text{ nm} = 243 \times 10^{-9} \text{ m} = 2.43 \times 10^{-7}$$

$$\nu = \frac{C}{\lambda} = \frac{2.998 \times 10^8}{2.43 \times 10^{-7}} = 1.23 \times 10^{15} \text{ Hz}$$

$$E = h\nu = 6.626 \times 10^{-34} [J \cdot \text{sec}] \cdot 1.234 \times 10^{15} [Hz] = 8.15 \times 10^{-19} \text{ J}$$

זוהי האנרגיה של פוטון בעל אורך גל  $243 \text{ nm}$ .

העין שלנו מסוגלת לראות אור באורך גל של בערך  $390 \text{ nm}$  (כחול) ועד אורך גל של בערך  $760 \text{ nm}$  (אדום).

**מודל בוהר Bohr** מטפל באטומי מימן או יונים דמויי מימן (מטען חיובי בגרעין ואלקטרון בודד סביבו). האטום יכול להיות בכמה רמות אנרגיה - כאשר הוא עובר מרמת אנרגיה נמוכה לרמת אנרגיה גבוהה, הוא עושה זאת על ידי בליעת פוטון, וכאשר הוא עובר מרמת אנרגיה גבוהה לרמת אנרגיה נמוכה, הוא עושה זאת על ידי פליטת פוטון.

$$h\nu = E_2 - E_1 = -R_H Z^2 \left( \frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right)$$

(קבוע **Rydberg**:  $R_H = 13.6 \text{ eV}$ )

$Z$  - מספר הפרוטונים שבגרעין האטום.

האנרגיה של הפוטון שווה להפרש האנרגיות בין שני המצבים של האטום.

אנרגית הפוטון שנבלע או נפלט (בהתאם לתהליך) שווה בדיוק להפרש בין רמות האנרגיה שמעורבות בתהליך שביניהן היה מעבר.

- כאשר  $E_n < 0$  - האלקטרון נמצא באטום - "מצב קשור"
- רמת האנרגיה עבור  $n = \infty$  ( $E_n = 0$ ) מתאימה למצב שבו האלקטרון משתחרר מהאטום - הופך להיות חופשי.



המשמעות של אנרגיה גדולה מאפס  $E_{ele} > 0$  היא שהאלקטרון חופשי (מחוץ לאטום) עם אנרגיה קינטית השווה ל:  $E_{ele}$ .

התהליך שבו נבלע פוטון ומוציא אלקטרון מהאטום נקרא יוניזציה. (נקרא גם אפקט פוטו-אלקטרי).

הפרש האנרגיה בין רמה  $n$  והרמה  $n = \infty$  נקרא פוטנציאל יוניזציה של רמה  $n$ .

$$I_P^{(n)} = -R_H Z^2 \left( \frac{1}{\infty} - \frac{1}{n^2} \right) - R_H Z^2 \frac{1}{n^2}$$

פוטנציאל היוניזציה של רמה  $n = 1$  (רמת היסוד) נקרא גם פשוט פוטנציאל היוניזציה.

לדוגמה: עבור מימן מתקיים שפוטנציאל היוניזציה שלו היא:  $I_P^{(1)} = 13.6 \text{ eV}$

זוהי בעצם כמות האנרגיה המינימאלית הדרושה כדי להוציא את האלקטרון מהאטום.

**תרגיל:** אטום מימן שנמצא במצב היסוד עובר תהליך יוניזציה על ידי פוטון בעל אורך גל של  $60 \text{ nm}$ . מהי האנרגיה הקינטית של האלקטרון שהשתחרר מהאטום?

פתרון:

$$\lambda = 60 \text{ nm} - \text{אורך הגל של הפוטון.}$$

$$\nu = \frac{c}{\lambda} = 5 \times 10^{15} \text{ Hz} - \text{התדירות של הפוטון.}$$

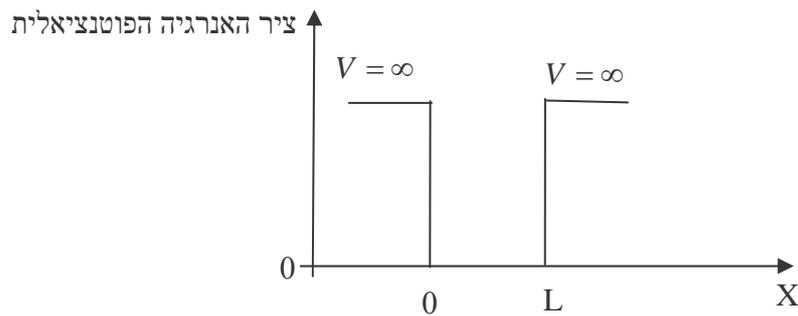
$$E_{\text{photon}} = h\nu = 3.3 \times 10^{18} \text{ J} = \underbrace{20.7 \text{ eV}}_{1 \text{ eV} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}}$$

$$E_{\text{electron}} = E_{\text{photon}} - I_P^{(1)} = 20.7 \text{ eV} - 13.6 \text{ eV} = 7.1 \text{ eV} - \text{האנרגיה הקינטית של האלקטרון שהשתחרר מהאטום.}$$

### התיאור המלא של אטום - תורת הקוונטים

(למעשה - מודל בוהר נתן במדויק רק את רמות האנרגיה של אטום המימן או של יונים דמויי מימן).

### תורת הקוונטים - משוואת שרדינגר

דוגמה בסיסית: חלקיק בתיבה חד מימדית

הפוטנציאל שהחלקיק מרגיש: עבור  $0 \leq x \leq L$  הפוטנציאל הוא  $V = 0$  - יש לו רק אנרגיה קינטית ולא פועלים עליו כוחות. עבור  $x < 0$  או  $x > L$  הפוטנציאל הוא  $V = \infty$ , כלומר - החלקיק לא יכול להימצא שם.

פתרון הבעיה בעזרת משוואת שרדינגר: - תורת הקוונטים.

$$E_n = \frac{h^2}{8mL^2} n^2$$

-  $E_n$  - האנרגיות של המצבים האפשריים של החלקיק בתיבה (אנרגיה קינטית).

$n = 1, 2, 3, \dots$  - מספר קוונטי.

$m$  - מסת החלקיק (מסת האלקטרון).

$L$  - אורך התיבה.

המיקום של החלקיק במרחב:

**פונקצית גל - wave function**

לכל מצב אפשרי של החלקיק בתיבה יש פונקצית גל מתאימה (שתלויה ב  $X$ ).

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

עבור חלקיק בתיבה, עבור  $0 \leq x \leq L$

$$\psi_n(x) = 0 : x \notin (0, L)$$

עבור

זוהי פונקציה מתמטית שתלויה ב  $x$ .

המשמעות הפיזיקאלית של פונקצית הגל:  $|\psi_n(x)|^2$  - צפיפות ההסתברות - probability density

למעשה -  $|\psi_n(x)|^2 dx$  הוא הסיכוי למצוא את החלקיק בתחום  $x$  עד  $x + dx$ .

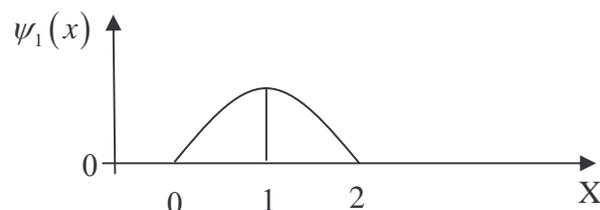
ההסתברות צריכה להיות מנורמלת, כלומר  $\int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx = 1$  - כלומר, ההסתברות של החלקיק

להיות בין  $x = 0$  ל  $x = L$  היא 1.

דוגמה:  $L = 2$

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{2}} \sin\left(\frac{n\pi x}{2}\right) = \sin\left(\frac{n\pi x}{2}\right)$$

עבור  $n = 1$  נקבל:  $\psi_1(x) = \sin\left(\frac{\pi x}{2}\right)$



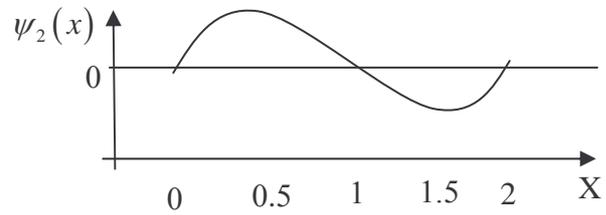
$$E_1 = \frac{h^2}{8m \cdot 2^2} \cdot 1^2 = \frac{h^2}{32m} > 0$$

(אנרגיית מצב היסוד)

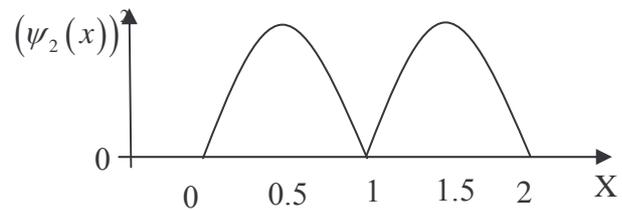
לדוגמה: מצב מעורר עם  $n = 2$  של חלקיק בתיבה עם  $L = 2$ .

$$\psi_2(x) = \sin\left(\frac{2\pi x}{2}\right) = \sin(\pi x)$$

$$E_2 = \frac{h^2}{8m}$$

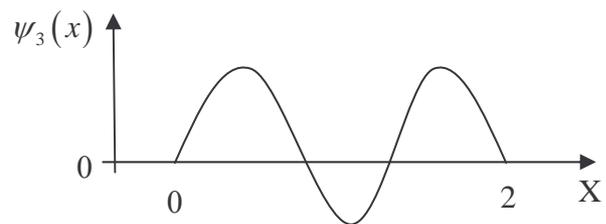


כאשר נעלה אותה בריבוע נקבל משהו מהצורה:



כלומר יש סיכוי גבוה למצוא את החלקיק באזור  $x = 0.5$  ובאזור  $x = 1.5$ .

עבור  $\psi_3(x)$  נקבל:



**אלקטרון באטום מימן - תורת הקוונטים**

בעיה תלת מימדית במרחב.

$V(r) = -\frac{1}{(4\pi\epsilon_0)} \frac{Ze^2}{r}$  - האנרגיה הפוטנציאלית החשמלית של האלקטרון כפונקציה של  $r$ , המרחק של האלקטרון מהגרעין.

נוח לתאר את הבעיה באמצעות קואורדינטות כדוריות  $(r, \theta, \phi)$  במקום קואורדינטות קרטזיות

$$x^2 + y^2 + z^2 = r^2 \quad : (x, y, z)$$

$$x = r \cdot \sin(\theta) \cdot \cos(\phi)$$

$$y = r \cdot \sin(\theta) \cdot \sin(\phi)$$

$$z = r \cdot \cos(\theta)$$

ראשית הצירים  $(x=0, y=0, z=0)$  - מיקום הגרעין.

ממשוואת שרדינגר עבור  $V(r)$  שכתבנו, נקבל את המצבים האפשריים של האלקטרון באטום המימן (או יון דמוי מימן).

כל מצב מתואר על ידי שלושה מספרים קוונטיים:  $(n, l, m_l)$

כל מצב נקרא אורביטל אטומי - *atomic orbital*.

לכל מצב יש פונקציית גל ואנרגיה.

פונקציית הגל:  $\psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \phi)$

אנרגיה:  $E_{n,l,m_l}$

$$(r, \theta, \phi) \text{ סביב המיקום } d^3V = [\psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \phi)]^2 \cdot d^3V = \text{הסיכוי למצוא את האלקטרון באלמנט נפח}$$

ביחס לגרעין. האלקטרון "מרוח" במרחב סביב הגרעין - מתואר ע"י ענן.

$n$  - מספר קוונטי ראשי - מספר שלם חיובי.  $n = 1, 2, 3, \dots$

$l$  - מספר קוונטי אורביטלי - מספר שלם המקיים:  $0 \leq l < n$

(עבור כל ערך של  $n$  יש  $n$  ערכים אפשריים עבור  $l$  -  $l \in (0, 1, 2, \dots, n-1)$ )

$m_l$  - מספר קוונטי מגנטי - מספר שלם המקיים  $|m_l| \leq l$

(עבור כל ערך של  $l$  יש  $2l+1$  ערכים אפשריים עבור  $m_l$  -  $m_l \in (-l, -l+1, \dots, 0, 1, \dots, l-1, l)$ )

$n$  מגדיר קליפה אלקטרונית ראשית (קליפה *shell*)

$l$  מגדיר קליפה משנית (תת קליפה *sub-shell*)

בקליפה  $n$  יש  $n$  תתי קליפות.

בתת קליפה  $l$  בקליפה  $n$  יש  $2l+1$  אורביטלים אטומים.

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 : n \text{ המספר הכולל של אורביטלים אטומים בקליפה}$$

סימון: מסמנים את תת הקליפה  $l$  בקליפה  $n$  ע"י מספר ואות. המספר הוא הערך של  $n$  והאות מייצגת את הערך של  $l$ .

$$. f : l = 3, d : l = 2, p : l = 1, s : l = 0$$

למשל: הסימון  $s$ , מתאים לתת קליפה  $l=0$  בקליפה  $n=1$ .

הסימון:  $s$ , 2, מתאים לתת קליפה  $l=0$  בקליפה  $n=2$ .

הסימון:  $p$ , 2, מתאים לתת קליפה  $l=1$  בקליפה  $n=2$ .

הקליפה  $n=1$  מכילה את תת הקליפה  $1, s$   
 הקליפה  $n=2$  מכילה את תתי הקליפות  $2, p$  ו-  $2, s$   
 הקליפה  $n=3$  מכילה את תתי הקליפות  $3, d$  ו-  $3, p$  ו-  $3, s$

בתת קליפה  $1, s$  יש אורביטל אטומי יחיד:  $n=1, l=0, m_l=0$   
 בתת הקליפה  $2, p$  יש שלושה אורביטלים אטומים:  $m_l \in \{-1, 0, 1\}$

### אנרגיות:

$$E_{n,l,m_l} = -R_H \frac{Z^2}{n^2} \quad \text{עבור } n=1, 2, 3, \dots$$

עבור  $R_H = -13.6 \text{ eV}$  (קבוע Rydberg)

האנרגיה תלויה רק במספר הקוונטי  $n$ . זהה למודל Bohr.  
 לכל האורביטלים בקליפה  $n$  יש אנרגיה שווה (הם "מנוונים").

### פונקציות הגל של האורביטלים האטומים באטום מימן:

$$\psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) \cdot Y_{l,m_l}(\theta, \phi)$$

$R_{n,l}(r)$  - חלק רדיאלי (שתלוי רק במרחק מהגרעין  $r$ ).

$Y_{l,m_l}(\theta, \phi)$  - חלק זוויתי (שתלוי רק בזוויות  $\theta$  ו-  $\phi$ )

מצב היסוד:  $(1, s)$ : האורביטל  $n=1, l=0, m_l=0$

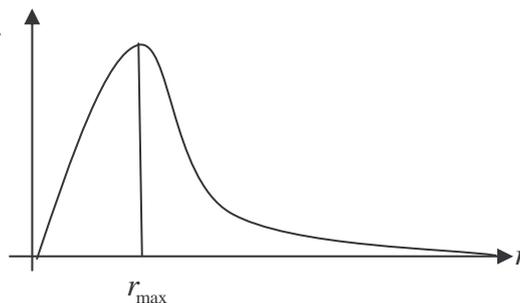
$$\psi_{n=1,l=0,m_l=0}(r, \theta, \phi) = R_{n=1,l=0}(r) \cdot Y_{l=0,m_l=0}(\theta, \phi)$$

$$\psi_{n=1,l=0,m_l=0}(r, \theta, \phi) = 2 \cdot \frac{1}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0} \cdot \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

הערך  $\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$  נקרא איזוטרופי כי הוא לא תלוי בזוויות  $\theta, \phi$ .

נקבל פונקציה מהצורה הבאה עבור מצב היסוד:  $(n=1, l=0, m_l=0)$

$$P(r) = \psi^2 d^3V = \psi^2 \cdot r^2 \cdot \sin(\theta) \cdot d\phi \cdot dr$$



המרחק שבו יש סיכוי מקסימאלי למצוא את האלקטרון גדול יותר ככל ש  $n$  (מספר הקליפה) גדול יותר.  
 עבור אורביטלים עם  $l=0$  ההתפלגות הזוויתית היא איזוטרופית.  
 עבור  $l \neq 0$  ההתפלגות היא אנ-איזוטרופית.

עבור  $l=1, m_l=+1$  מסמנים  $P_x$ . עבור  $l=1, m_l=0$  מסמנים  $P_z$ . עבור  $l=1, m_l=-1$  מסמנים  $P_y$ .

למעשה יש מספר קוונטי נוסף שמתאר את מצב האלקטרון - קשור לתכונה פנימית של האלקטרון שנקראת ספין (*spin*).

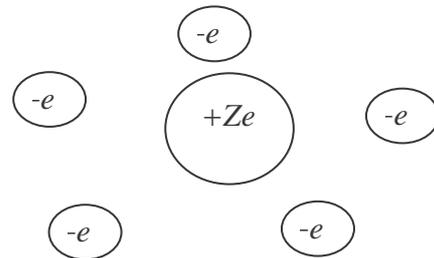
האלקטרון מסתובב סביב עצמו וכתוצאה מכך נוצר שדה מגנטי שכיוונו תלוי בכיוון הסיבוב. כיוון הסיבוב וכיוון השדה שנוצר מיוצגים על ידי המספר הקוונטי  $m_s$ .

$$\uparrow \quad m_s = +\frac{1}{2} \text{ - סיבוב נגד כיוון השעון. מסומן } \uparrow$$

$$\downarrow \quad m_s = -\frac{1}{2} \text{ - סיבוב עם כיוון השעון. מסומן } \downarrow$$

**אטומים רב אלקטרוניים**

אם האטום ניטרלי אז יש  $Z$  פרוטונים בגרעין, ומסביבו  $Z$  אלקטרונים. כל אלקטרון מרגיש את הכוחות שמפעילים עליו הגרעין (הפרוטונים) ושאר האלקטרונים.



כעת המצב של כל אחד מהאלקטרונים באטום מתואר על ידי ארבעה מספרים קוונטיים:  $(n, l, m_l, m_s)$  כאשר  $n, l, m_l$  מגדירים אורביטל אטומי.

פונקציות הגל עבור כל אחד מהאלקטרונים באטום מאוד דומות לאלו של אלקטרון באטום דמוי מימן (עם גרעין  $Z$ ).

אנרגיות האורביטלים האטומיים האפשריים **שונות** מהמקרה של אטום דמוי מימן. האנרגיה תלויה גם ב  $n$  וגם ב  $l$ .

**עקרון פאולי (1924) - חוק הברירה:**

שני אלקטרונים באטום לא יכולים להיות במצב זהה, כלומר, לא יהיו להם ארבעה מספרים קוונטיים זהים.

באורביטל אטומי  $n, l, m_l$  מסוים יכולים להיות לכל היותר שני אלקטרונים.

$$m_s = +\frac{1}{2} (\uparrow) \text{ עם } m_s = -\frac{1}{2} (\downarrow)$$

מספר האלקטרונים המקסימאלי בקליפה  $n$  הוא  $2n^2$  (כי בכל קליפה יש  $n^2$  אורביטלים). מספר האלקטרונים המקסימאלי בתת קליפה  $l$  מסוימת הוא  $2(2l + 1)$ .

האנרגיה הכללית שווה לסכום האנרגיות של כל האלקטרונים באטום.

מצב היסוד של האטום הוא המצב שבו יש לאלקטרונים בו אנרגיה מינימאלית:

$$\begin{array}{l}
 \boxed{\uparrow} \\
 1S \\
 \text{H מימן, } 1=Z: \text{ אלקטרון בודד בתת קליפה } 1s \text{ (} n=1, l=0 \text{), מסמנים } 1s^1 \text{, או }
 \end{array}$$
  

$$\begin{array}{l}
 \boxed{\uparrow\downarrow} \\
 1S \\
 \text{He הליום, } 2=Z: 1s^2 \text{, מסמנים } 1s^2 \text{ או }
 \end{array}$$

$$\begin{array}{l}
 1: \left( n=1, l=0, m_l=0, m_s=+\frac{1}{2} \right) \\
 2: \left( n=1, l=0, m_l=0, m_s=-\frac{1}{2} \right)
 \end{array}$$

(כלומר האטום נמצא במצב של קליפה  $n=1$  מלאה).

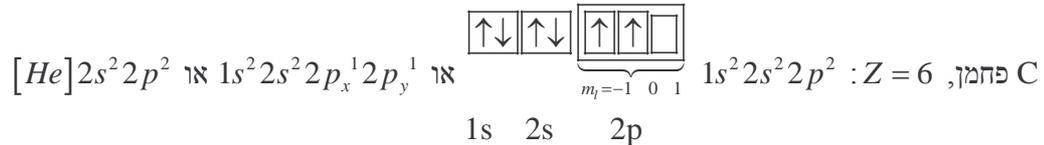
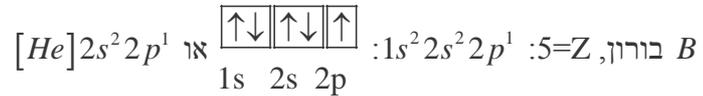
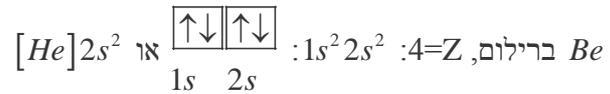
הסימון  $\boxed{\uparrow\downarrow}$ : זוג אלקטרונים מזווגים - שניהם באותו אורביטל אטומי, ורק הערך  $m_s$  מבדיל ביניהם.

$$\text{Li ליתיום, } 3=Z: 1s^2 2s^1 \text{, צורת כתיבה אחרת: } \boxed{\uparrow\downarrow} \boxed{\uparrow} \text{, צורת כתיבה אחרת: } [He] 2s^1 \text{ - כותבים רק את מספר}$$

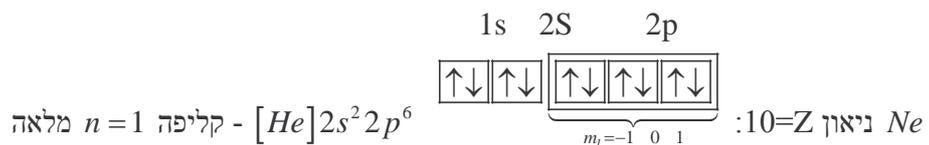
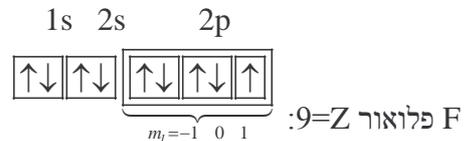
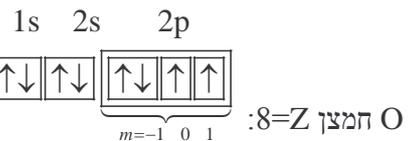
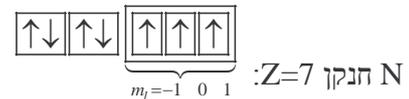
האטומים באורביטלים שאחרי הגז האציל האחרון. גז אציל: כלל תתי הקליפות  $S, P$  מלאות.

$$2 \times E(1S) + E(2S) = E(1S^2 2S^1) < E(1S^2 2P^1) = 2 \times E(1S) + E(2P)$$

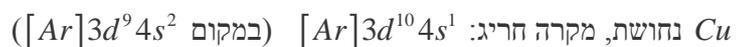
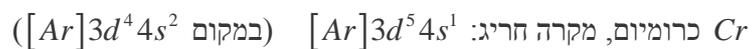
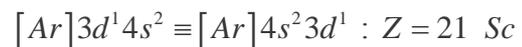
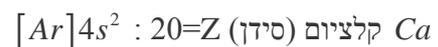
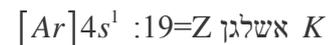
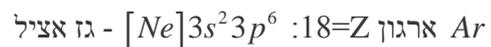
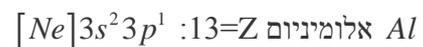
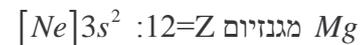
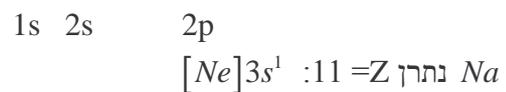
לכן  $1s^2 2s^1$  הוא מצב היסוד של הליתיום ו  $1s^2 2p^1$  הוא מצב מעורר.



ככל Hund: כאשר יש מספר אורביטלים מנוונים (עם אנרגיה זהה), האלקטרונים ישויכו תחילה לכל אורביטל באלקטרונים בודדים לא מזווגים בעלי ספינים מקבילים (אותו ערך ל  $n_s$ ), ואח"כ יאכלסו את האורביטלים כאלקטרונים מזווגים.



$[He]2s^2 2p^6$  - קליפה  $n = 1$  מלאה



**הטבלה המחזורית periodic table (מנדלייב 1808).**

כל האטומים שנמצאים באותה שורה, אומרים שהם נמצאים באותו מחזור.  
כל האטומים שנמצאים באותה עמודה, נמצאים באותה קבוצה (למשל העמודה האחרונה - גזים אצילים)  
קבוצה מספר 1:

מתכות אלקליות alkali metals (מלבד המימן) - מכילות אלקטרון בודד באורביטל  $ns^1$ .  
קבוצה מספר 17: הלוגנים - 7 אלקטרונים בקליפות  $s, p$  החיצוניות.

הקליפה בעלת ה  $n$  הגדול ביותר שמאוכלסים בה אורביטלי  $s$  או  $p$  נקראת:

**קליפת הערכיות valance shell**

**הטבלה המחזורית:**

כל שורה נקראת מחזור.  
כל טור נקרא משפחה, קבוצה של יסודות.

הטור הראשון (מלבד המימן) נקרא מתכות אלקליות.  
לכל האטומים בטור זה יש אלקטרון אחד באורביטל  $s$ .  
הטור האחרון נקרא גזים אצילים. שם קליפה הערכיות מלאה.  
בטור 17, אחד לפני האחרון, יש שבעה אלקטרוני ערכיות.

הטבלה מחולקת לסוגי אטומים:

מתכות - metals

אל-מתכות

מטלואידים

**תכונות אטומיות מחזוריות בטבלה המחזורית**

**רדיוס אטומי** - רדיוס הכדור שמכיל 90% מענן המטען האלקטרוני.  
כאשר הולכים ימינה בשורה בטבלה המחזורית, הרדיוס האטומי יורד.  
ברגע שעוברים לשורה הבאה, הרדיוס האטומי עולה, וכאשר הולכים ימינה, שוב יורד.  
כלומר - לאורך הטור יש עליה ולאורך השורה יש ירידה.

1. ככל שרמת הערכיות גדלה, הרדיוס האטומי גדל - מסביר את ההתנהגות לאורך טור.

2. מיסוך screening - מסביר את ההתנהגות לאורך שורה.

למעשה אפשר להגדיר מטען גרעיני אפקטיבי  $Z_{eff}$  שאלקטרון ערכיות (אלקטרון חיצוני) רואה כתוצאה מהגרעין ומנוכחות האלקטרונים האחרים שמנטרלים חלקית את מטען הגרעין (את משיכת הגרעין).  
דוגמה: מגנזיום  $Mg (Z = 12)$  - 2 אלקטרוני ערכיות ב  $3s^2$ .  
המטען האפקטיבי של הגרעין שאלקטרוני הערכיות רואים הוא  $Z_{eff} = +3$ , ולא  $12 - 10 = 2$ .  
בשורה:  $Z$  עולה ולכן  $Z_{eff}$  עולה (עבור אלקטרוני הערכיות). לכן הרדיוס האטומי יורד, כי המשיכה יותר חזקה.

**רדיוס יוני:** עבור אטום מסוים, עם גרעין  $Z$ .

(anion) רדיוס היון השלילי < רדיוס האטום הניטרלי (atom) < רדיוס היון החיובי (cation)

יונים שליליים איזו אלקטרוניים: למשל,  $Cl^- (Z = 17)$  ו  $S^{2-} (Z = 16)$ .  
בשניהם יש אותו מספר אלקטרוניים - 18 אלקטרוניים.  
נקבל שהרדיוס של  $Cl^-$  קטן יותר מהרדיוס של  $S^{2-}$ .

יונים שליליים איזו אלקטרוניים: למשל,  $Cl^- (Z = 17)$  ו  $S^{2-} (Z = 16)$ .

בשניהם יש אותו מספר אלקטרוניים - 18 אלקטרוניים.

נקבל שהרדיוס של  $Cl^-$  קטן יותר מהרדיוס של  $S^{2-}$ .

**אנרגיית יוניזציה ionization energy**

אנרגיית יוניזציה ראשונה = האנרגיה המינימאלית הדרושה להוצאת אלקטרון בודד מאטום ניטרלי.



לדוגמה:  $1s^2 2s^2 2p^1$  - האטום B.

האנרגיה המינימאלית הדרושה היא האנרגיה המינימאלית הדרושה כדי להעביר את האלקטרון מ  $2p$  ל

$n = \infty$

ככל שהרדיוס גדל, האנרגיה הדרושה, קטנה יותר. כאשר הולכים בשורה ימינה,  $I_1$  גדלה. כאשר מתקדמים בטור בטבלה המחזורית,  $I_1$  קטנה. לכן לגזים האצילים תהיה אנרגיית ינון הכי גדולה.

אנרגיית יוניזציה שניה  $= I_2 =$  האנרגיה המינימאלית הדרושה להוצאת אלקטרון מיון חיובי.



נקבל ש  $I_2 > I_1$  - מטען הגרעין הוא אותו מטען, אבל הרדיוס קטן יותר, ולכן האנרגיה גדולה יותר.

אפיניות אלקטרונית Electron Affinity - לכידת אלקטרון  $M + e^- \rightarrow M^-$

זוהי האנרגיה שמשתחררת מלכידת אלקטרון על ידי אטום ניטרלי.

$$E(M + e^-) + EA = E(M^-)$$

כאשר  $EA < 0$  היא אנרגיית אפיניות.

אנרגיית אפיניות עולה (בערכה המוחלט) כשהולכים לאורך השורה (מלבד גזים אצילים) ויורדת כשהולכים לאורך הטור בטבלה המחזורית. בגזים אצילים קליפת הערכיות שלהם מלאה, ולכן הם "לא רוצים" ללכוד אלקטרון, ואנרגיית האפיניות שלהם היא אפס.

כשהאטום "נוטה" ללכוד אלקטרון זה אומר ש  $|EA|$  גבוה - היון השלילי יציב.

### תכונות מגנטיות

נקבעות לפי הספין הכללי של כל האלקטרונים באטום. כלומר: לפי מספר האלקטרונים הלא מזווגים.

אטום דיאמגנטי - כל הספינים מזווגים - אין משיכה למגנט.

אטום פרמגנטי - יש ספינים לא מזווגים - יש משיכה למגנט.

מידת המשיכה - לפי מספר האלקטרונים הלא מזווגים.

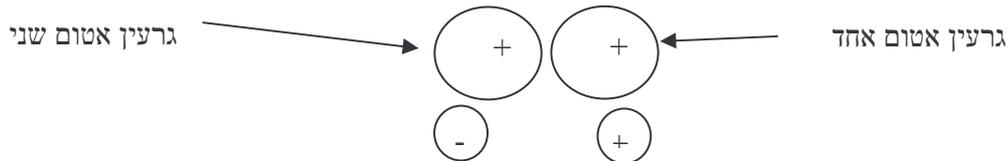
**הקשר הכימי Chemical bond**

התיאוריה של Lewis 1919

התפקיד החשוב ביותר ביצירת הקשר הכימי שמור לאלקטרונים ובמיוחד לאלקטרונים הערכיות!

ישנם שני סוגי קשרים בסיסיים:

1. קשר יוני - ionic bond: נוצר כאשר מועברים אלקטרונים ערכיות מאטום אחד לאטום שני. נוצרים למעשה שני יונים - אחד חיובי ואחד שלילי. מצד אחד הם מושכים זה את זה ומצד שני, כאשר הם קרובים מדי, ענני האלקטרונים דוחים זה את זה.

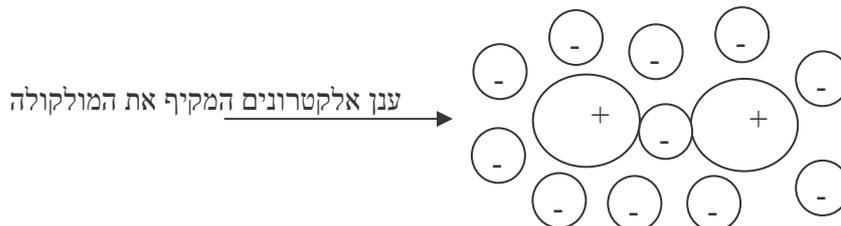


קשר יוני בדרך כלל נוצר בין יסוד בעל אנרגיית ינון נמוכה (טור 1 וטור 2 בטבלה המחזורית - קל למסור אלקטרון) לבין יסוד בעל אפיונות אלקטרונית גבוהה (טורים 15-17 - קל לקבל אלקטרון).

לדוגמה: מלח בישול:  $NaCl$  - הנתרן "אוהב" למסור אלקטרון, והכלור "אוהב" לקבל אלקטרון.

2. קשר קובלנטי covalent bond - נוצר כאשר שני האטומים מתחלקים ביניהם בזוג אחד או יותר של אלקטרונים ערכיות. ענני המטען האלקטרוני של אלקטרונים הערכיות מתפרסים מחדש על פני כל המולקולה.

דוגמאות:  $O_2, H_2, Cl_2$



ענן אלקטרונים המקיף את המולקולה

האטומים מתקשרים זה לזה מתוך נטייה להגיע כל אחד (קרוב ככל האפשר) לקליפת ערכיות מלאה, כלומר: קונפיגורציה של גז אציל - octet - שמונה אלקטרונים ערכיות.

באופן כללי:

אל מתכות שואפות לקבל אלקטרון  
מתכות שואפות למסור אלקטרון

**הסימון של Lewis**

סימון אלקטרוני הערכיות של האטום ע"י נקודות סביב אות סימון האטום. מסמנים אותם כנקודות ואח"כ כזוגות עד ל octet.

דוגמאות:

פחמן - C -  $Z = 6$  או  $1S^2 2S^2 2P^2$  - ארבעה אלקטרונים ערכיות. מסמנים:  $\cdot\dot{C}\cdot$

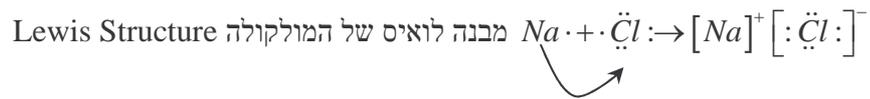
סיליקון:  $[Ne]3S^2 3P^2$  - ארבעה אלקטרונים ערכיות:  $\cdot\dot{Si}\cdot$

כלור:  $[Ne]3S^2 3P^5$  - שבעה אלקטרונים ערכיות:  $\cdot\dot{Cl}\cdot$

$\cdot\dot{Al}\cdot$                        $:\ddot{I}:$                        $\cdot\ddot{N}\cdot$

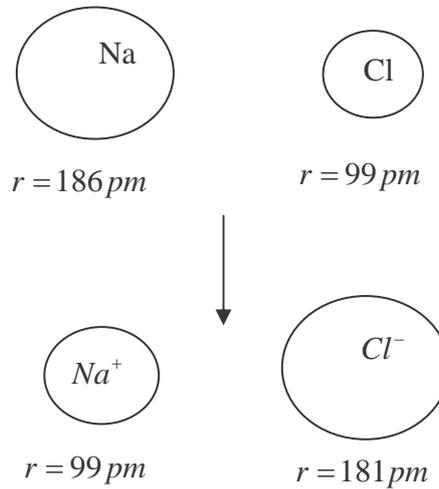
גזים אצילים:  $:\ddot{Ar}:$                        $:\ddot{Ne}:$                       octet

דוגמאות לקשר יוני:

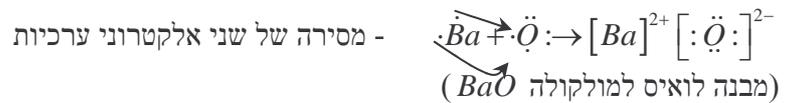


הסימון הרגיל היה:  $Na + Cl \rightarrow NaCl$

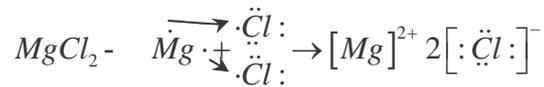
בצורה גראפית:



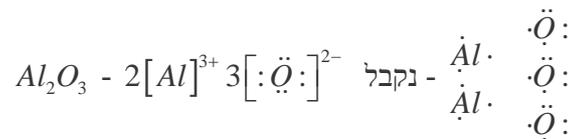
דוגמה נוספת:



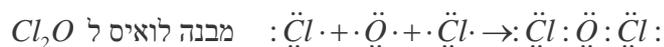
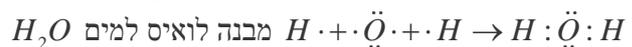
עוד דוגמה:



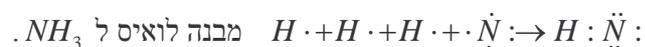
המגנזיום מוסר כל אחד מהאלקטרוני הערכיות שלו לאטום אחד של כלור - סה"כ שני אטומים של כלור.



קשר קובלנטי:

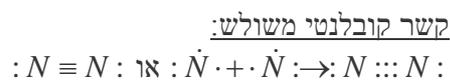
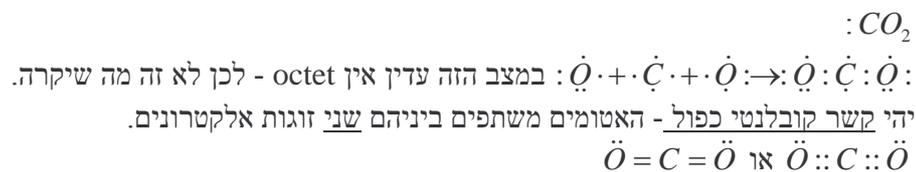
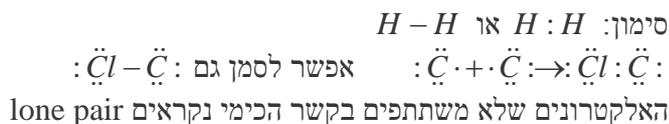


H



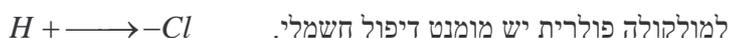
H

קשר קובלנטי בודד single covalent bond - שיתוף של זוג אלקטרונים בודד בין אטומים קשורים  
 זוג האלקטרונים המשותף נקרא bond pair



קשר קובלנטי פולרי: קשר קובלנטי שבו האלקטרונים אינם משותפים בצורה שווה בין האטומים.  
 קובלנטי טהור - שיתוף מלא  
 יוני טהור - העברה מלאה של אלקטרונים

$\delta^-:\ddot{Cl}:\delta^+H$  - קשר קובלנטי פולרי (קוטבי) - הפרדת מטענים  
 גם המימן וגם הכלור "אוהבים" לקבל אלקטרון" אבל הכלור "אוהב" זאת יותר ולכן המימן נשאר קצת  
 טעון חיובי והכלור נשאר קצת טעון שלילי. (קצת = פחות מ 1).  
 $EA(Cl) > EA(H) = 72.8 [KJ / mole]$   
 $EA$  - אפיניות אלקטרונית.



אלקטרו-שליליות - EN - מדד שמבטא את נטיית כל אטום כשהוא במולקולה למשוך אליו אלקטרונים.  
 (קשור ל EA ול-  $I_1$  - אנרגיית יוניזציה)

ערך ה EN בין 0 ל 4. ככל שהוא נמוך יותר היסוד נוטה יותר למסור אלקטרון, כלומר הוא בעל אופי יותר מתכתי.

ככל שהערך גבוה יותר היסוד נוטה יותר למשוך אלקטרון, כלומר הוא בעל אופי אל-מתכתי.

כאשר מתקדמים ימינה בטבלה המחזורית בתוך אותה שורה, EN גדלה.  
 כאשר מתקדמים למטה בטבלה המחזורית בתוך אותו הטור, EN קטנה.

מה שקובע את אופי הקשר זה ההפרש באלקטרו-שליליות. נסמן:  $\Delta EN$  - הערך המוחלט של ערכי EN של האטומים שמתקשרים במולקולה.

אם  $\Delta EN$  הוא קטן, (בין 0 ל 0.3) אז הקשר הוא בעיקרו קובלנטי.  
 אם  $\Delta EN$  בינוני, (בין 0.3 ל 1.9) אז הקשר קובלנטי קוטבי.  
 אם  $\Delta EN$  גדול, (מעל 1.9) אז הקשר הוא בעיקרו יוני טהור.

דוגמה:  $EN(H) = 2.1$ ,  $EN(Cl) = 3.0$ ,  $\Delta EN = 0.9$  - קובלנטי פולרי.

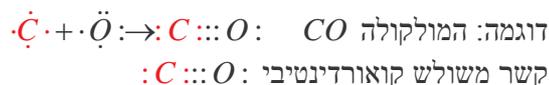
דוגמה:  $EN(H) = 2.1$ ,  $EN(F) = 4.0$ ,  $\Delta EN = 1.9$  - קשר יוני חלש / פולרי חזק.

$\frac{\delta}{e}$  = Ionic character של הקשר: אחוז האופי היוני של הקשר:

כאשר  $\delta$  הוא המטען החלקי (הפרש האלקטרו-נגטיביות) ו  $e$  הוא מטען האלקטרון.  
 $\mu = \delta \cdot d$  - מומנט הדיפול שווה למטען החלקי כפול אורך הקשר.  
 אם יודעים את  $\mu, d$  (את שניהם ניתן למדוד במעבדה) אז ניתן למצוא את  $\delta$ .

- קשר קובלנטי (פולרי) רגיל = 2 האטומים תורמים מספר שווה של אלקטרונים ל bond pairs שבהם שותפים האטומים.

- קשר קובלנטי (פולרי) קואורדינטיבי = קשר קובלנטי שבו שני האטומים תורמים מספר שונה של אלקטרונים ל bond pairs.

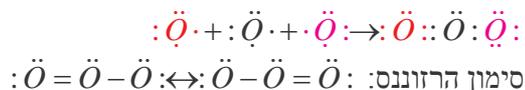


התרומה של הפחמן לקשר היא שני אלקטרונים והתרומה של החמצן לקשר היא ארבעה אלקטרונים.

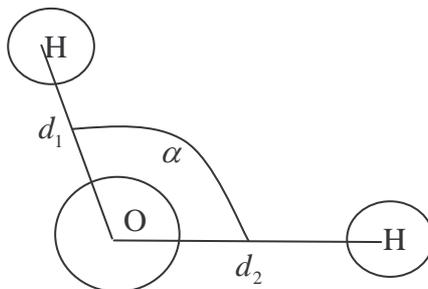
**רזוננס: Resonance**

כאשר קיימים מספר מבני לואיס המתאימים לאותה מולקולה, המולקולה מתוארת כשילוב של שני המבנים. בשני מבני הרזוננס מקומם היחסי של הגרעינים זהה ומה משתנה זה רק מיקום האלקטרונים.

דוגמה:  $O_3$  - אוזון. (בניח שלא יכול להיות קשר משולש, כלומר שכל אטום מחובר לשני האטומים האחרים).



דוגמה: מים:  $H : \ddot{O} : H$  - איך יסתדרו האטומים בתוך המולקולה מבחינת זווית?

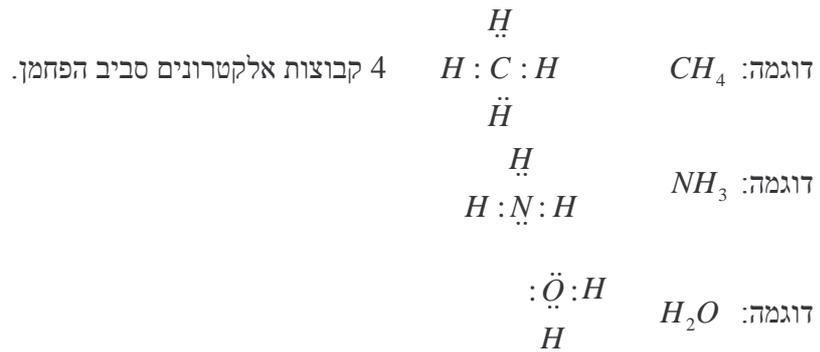


במקרה זה: המרחקים:  $d_1 = d_2 = 0.96 \text{ \AA}$  והזווית:  $\alpha = 105^\circ$

**תיאוריה: המבנה המרחבי של המולקולה VSEPR**  
 Valence Shell electron pair repulsion

- הסתכלות על אלקטרו ערכיות שסביב האטום המרכזי במבנה לואיס של המולקולה.  
 - חלוקתם של האלקטרונים לקבוצות לפי הקריטריונים: lone pair, bond pair, אלקטרוני קשר כפול או משולש ואלקטרון בודד לא מזווג.

העיקרון של התיאוריה: קבוצות האלקטרונים דוחות זו את זו דחייה חשמלית.  
 הן מסתדרות בכיוונים השונים במרחב כך שסך כל כוחות הדחייה השונים מאזנים זה את זה והם מינימאליים.



גיאומטריית הקבוצות של האלקטרונים בכל שלושת המקרים האחרונים היא טרהדרלית.

גיאומטריית הגרעינים (גיאומטריה מולקולרית)

$\text{NH}_3$  - פירמידה משולשת.

$\text{H}_2\text{O}$  - מכופפת bent או V-sharped

בטרהדר זווית הקשר היא  $109.5^\circ$  - זה אכן מה שנמדד ב  $\text{CH}_4$

$\text{NH}_3$  - הזווית היא  $\alpha = 107^\circ$

$\text{H}_2\text{O}$  - הזווית היא  $\alpha = 104.5^\circ$

יחס גדלי הדחיות:

$$\text{lonelpair} - \text{lonelpair} > \text{lonelpair} - \text{bondpair} > \text{bondpair} - \text{bondpair}$$

סימון VSEPR:

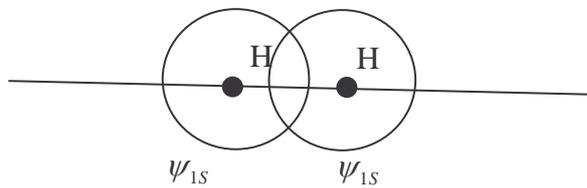
$\text{X}$  - אטומי קצה       $\text{E}$  -  $\text{lonelpairs}$

A - אטום מרכזי

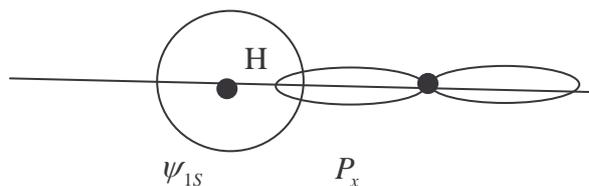
Valence Bond Theory

הקשר המולקולארי נובע מחפיפה בין אורביטלים אטומיים של אלקטרוני ערכיות באטומים שמתקשרים.

דוגמה:  $\text{H}_2$  - מולקולת מימן.



דוגמה:  $\text{HF}$

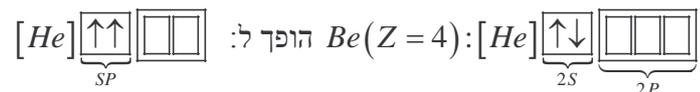


מולקולות פולי אטומיות - תיאורית ההיברידיזציה  
 באטום המרכזי - האורביטלים השונים של אלקטרוני הערכיות שלו עוברים הכלאה hybridization,  
 כלומר הם מתערבבים זה עם זה ויוצרים סט של אורביטלים היברידיים.

ההכלאה מקיימת:

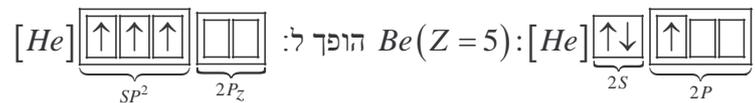
1. מספר האורביטלים המוכלאים שווה למספר האורביטלים האטומיים המקוריים שהוכלאו.
2. ההתפלגות המרחבית של האורביטלים המוכלאים מתאימה לגיאומטרית קבוצת האלקטרונים ע"פ VSEPR.

דוגמה:  $\text{Cl}:\text{Be}:\text{Cl}$ :

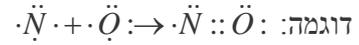


דוגמה: שלוש קבוצות אלקטרונים סביב האטום המרכזי:  
 גיאומטריה קבוצת האלקטרונים - משלוש מישורי, ע"פ VSEPR

$\text{BF}_3$



חריג מכלל ה **OCTET** (התיאוריה של לואיס) כאשר יש מספר אי זוגי של אלקטרוני ערכיות (בשני האטומים ביחד) במקרה כזה יש בהכרח אלקטרון אחד לא מזווג. מולקולה כזאת נקראת **רדיקל חופשי**

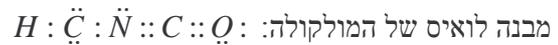


אפשר לתאר את המולקולה גם כך:  $\cdot\ddot{N} = \ddot{O}\cdot$  או  $\cdot NO$  מולקולה כזאת נוטה להגיב עם מולקולות אחרות.

VSEPR התיאוריה של

הגיאומטריה של  $CH_3NCO$ :

H



H

H

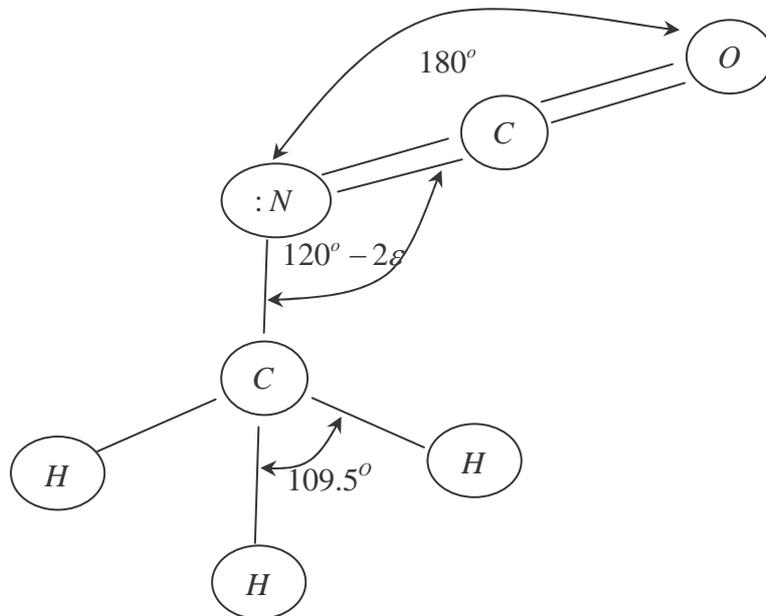
א.  $AX_4$  - טטראדר  $H : \ddot{C} : (NCO)$

H

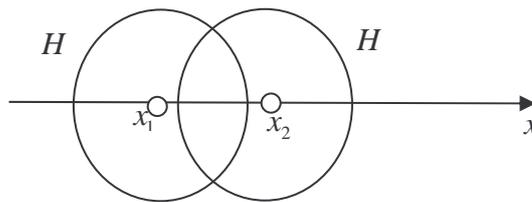
ב.  $AX_2E$  - שני אטומי קצה ו *lonepair* - זוויות של קצת פחות מ 120 מעלות בין אטומי הקצה וזוויות של קצת יותר מ 120 מעלות בין כל אטום קצה לבין ה *lonepair*. כל זה במשולש מישורי.

ג.  $AX_2$  - מולקולה קווית. זוויות של 180 מעלות.  $CH_3N = C = \ddot{O}$

סה"כ:



Valence Bond Theory (VB) - הקשר המולקולארי נובע מחפיפה של אורביטלים אטומים



פונקציות הגל הן:  $\psi_1(x) = \psi_{1s}(x - x_1)$      $\psi_2(x) = \psi_{1s}(x - x_2)$

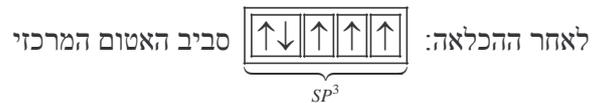
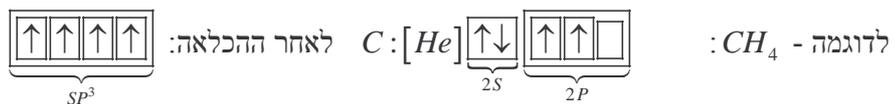
בקטע החופף:  $\psi_{tot}(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x)$

צפיפות המטען:

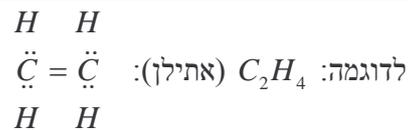
$$[\psi_{tot}(x)]^2 = [\psi_1(x)]^2 + [\psi_2(x)]^2 + 2\psi_1(x)\psi_2(x)$$

החלק:  $2\psi_1(x)\psi_2(x)$  מהווה התאבכות בונה - הגדרה של ריכוז המטען השלילי באזור החפיפה.

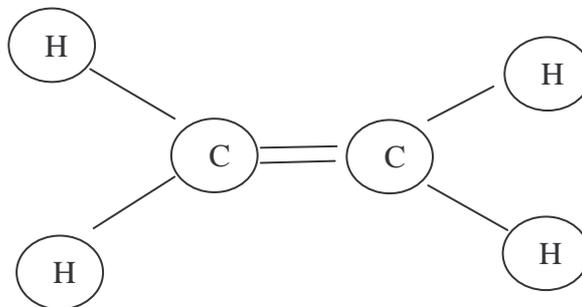
עבור 4 קבוצות אלקטרונים סביב האטום המרכזי: ע"פ VSEPR נקבל טטראדר. זה מתבצע ע"י הכלאה של 3 אורביטלי P ואורביטל S אחד - זה נקרא הכלאת  $SP^3$ .



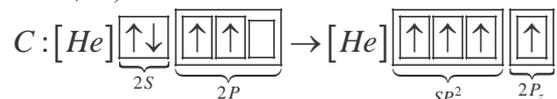
תיאור של קשרים כפולים ומשולשים ע"י תיאורית VB:



ע"פ VSEPR: כל הזוויות הן 120 מעלות:



היברידיזציה של כל אטום C מסוג  $SP^2$  (3 קבוצות אלקטרוניים)

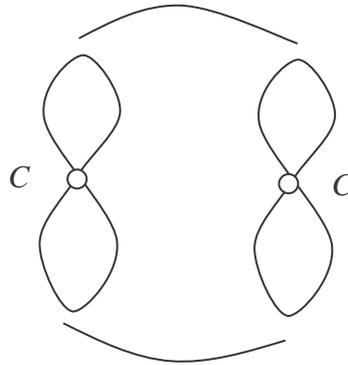


חפיפה עם אורביטל של אטום שכן לאורך הקו שמקשר בין הגרעינים נקרא:

קשר סיגמא ( $\sigma$ ) *Sigma-bond*

הקשר השני שנוצר בין שני אטומי הפחמן נובע מחפיפה של האלקטרונים באורביטלי  $2P_z$ , בכל אחד מהם (שלא עברו הכלאה).

קשר כזה נקרא  $\pi = bond$  (קשר שהוא *side-by-side*)



קשר כפול - קשרי  $\sigma + \pi$

קשר בודד - קשר  $\sigma$

אנרגית קשר: יחיד  $E_b(\sigma + \pi) > E_b(\sigma)$  כפול

$$E_b(\sigma + \pi) < 2E_b(\sigma)$$

קשר משולש:  $C_2H_2$   $H-C \equiv C-H$

קשר משולש = 2 קשרי  $\pi$  + קשר  $\sigma$ .

אנרגית הקשר של קשר משולש גדולה מאנרגית הקשר של קשר כפול, שגדולה מאנרגית הקשר של קשר יחיד.

תכונות החומר במצב של גז:

$n$  - כמות החומר, מספר המולקולות או מספר המולים (תלוי ביחידות).

הגז נמצא בכלי בעל נפח  $V$ .

$T$  - טמפרטורת הגז (האנרגיה הקינטית של החלקיקים)

המולקולות מפעילות כוח על דפנות הכלי. נוצר לחץ על הדפנות.

$P = \frac{F}{A}$  - לחץ הוא כוח ליחידת שטח שמופעל על דפנות הכלי.

לחץ: הלחץ שמפעיל עמוד נוזל כספית  $Hg$  בגובה  $760mm$  מוגדר כלחץ של  $1$  אטמוספירה ( $1atm$ ).

$$1atm = 760mmHg$$

טמפרטורה:  $T[k = kelvin] = t[^\circ C] + 273.15$   $0_k = -273.15^\circ C$

לדוגמה: מים רותחים ב  $100$  מעלות צלזיוס השוות ל  $375.15$  קלווין.

מים קופאים ב  $0$  מעלות צלזיוס השוות ל  $273.15$  קלווין.

גז אידיאלי:

- הגז מורכב ממספר רב של מולקולות הנעות בתנועה אקראית.
- המרחקים בין המולקולות בגז גדולים מאוד. רוב נפח הגז הוא ריק ממולקולות
- ההתייחסות למולקולות כחלקיקים נקודתיים - בעלי מסה, חסרי נפח עצמי.
- המולקולות מתנגשות זו בזו ועם דפנות הכלי. זמן ההתנגשות קצר מאוד. רוב הזמן המולקולות נעות ללא התנגשות בקו ישיר.
- אין כוחות הפועלים בין המולקולות מלבד בזמן ההתנגשות.

עבור גז אידיאלי מתקיימת המשוואה:  $PV = RnT$  (משוואת מצב)

כאשר  $R$  נקרא קבוע הגזים.  $R = 0.082057 \frac{L \cdot atm}{mole \cdot K}$  (L - ליטר)

$$R = \frac{PV}{nT} \quad \text{לכן לכל שני גזים יתקיים:} \quad \frac{P_1V_1}{n_1T_1} = \frac{P_2V_2}{n_2T_2}$$

תנאים סטנדרטיים STP:

תנאים סטנדרטים עבור גזים:  $P = 1atm$ ,  $T = 0^\circ C = 273.15K$ .

$$V = \frac{RnT}{P} \quad \text{נציב את } P \text{ ואת } T \text{ ונקבל:}$$

עבור  $n = 1$  מול של חומר, נקבל  $V = 22.4L$  - הנפח שתופס החומר, בתנאי STP.

תערובת של מספר סוגי גזים - חוק הלחצים החלקיים של Dalton:

כל גז בתערובת ממלא את כל נפח הכלי.

הלחץ של כל גז בתערובת (הלחץ החלקי) הוא כאילו הגז המסוים ממלא את כל נפח הכלי.

הלחץ הכולל שווה לסכום הלחצים החלקיים השונים.

$$P_{tot} = \sum_i P_i = \sum_i n_i \frac{RT}{V} = \frac{RT}{V} \sum_i n_i = \frac{RT}{V} n_{tot}$$

$$\frac{P_i}{P_{tot}} = \frac{n_i}{n_{tot}} \equiv X_i \quad \text{יחס לחצים חלקיים:}$$

$$\sum_i X_i = 1$$

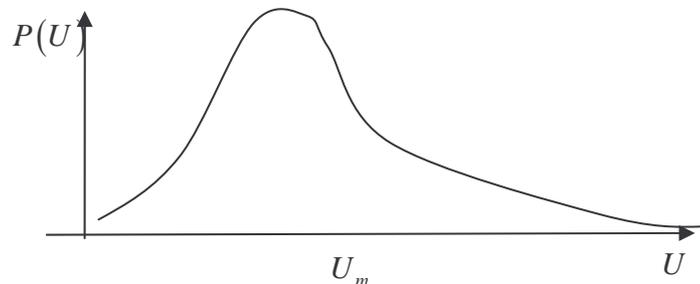
טמפרטורה  $T \leftarrow$  אנרגיה קינטית. מהירות

ברגע נתון יש התפלגות של מהירויות למולקולות.

בכל רגע, לא לכל המולקולות יש אותה מהירות.

ההתפלגות של המהירויות של המולקולות נקראת התפלגות מקסוול. Maxwell.

הצורה הכללית היא:



המהירות השכיחה ביותר:  $U_m$ .

המהירות הממוצעת:  $U_{AV} = \bar{U}$  (ממוצע משוקלל)

(root mean square - מהירות ממוצעת ריבועית)  $U_{rms} = \sqrt{\overline{U^2}}$

נשים לב ש  $[(\bar{U})^2 \neq \overline{U^2}]$

אנרגיה קינטית ממוצעת של מולקולה בודדת.  $\bar{E}_k = \frac{1}{2} m \overline{U^2} = \frac{1}{2} m (U_{rms})^2$

$U_{rms} = \sqrt{\overline{U^2}} = \sqrt{\frac{3RT}{M}}$  כאשר  $M =$  מסה מולרית,  $T =$  טמפרטורה,  $R =$  קבוע גזים.

$U_{rms} \propto \sqrt{\frac{T}{M}}$  יחס פרופורציוני ליניארי בין השורש הריבועי של המהירות לבין שורש הטמפרטורה חלקי המסה המולרית.

$\bar{E}_k = \frac{1}{2} m (U_{rms})^2 = \frac{1}{2} m \frac{3RT}{M} = \frac{3}{2} \frac{R}{N_A} T = \frac{3}{2} K_B T$  - לא תלוי בסוג החלקיק.

קבוע בולצמן.  $K_B = \frac{R}{N_A} = 1.3810^{-23} \frac{J}{k}$

דוגמה:  $T = 300k$  - טמפרטורה של 300 קלווין.

נקבל שהאנרגיה הממוצעת של המולקולות של הגז היא:  $\bar{E}_k = 6.21 \cdot 10^{-31} J = 0.04 eV = 40 meV$

כדי לשבור את הקשר של האטומים בתוך המולקולה צריך  $E_b$  אנרגיה.

לכן צריך טמפרטורה מאוד גבוהה בשביל שההתנגשות בין מולקולות הגז יגרמו למולקולות להתפרק.

$E_b(H_2) \sim 4.5 eV \rightarrow "T" = 34000k$

**תהליך דיפוזיה** - תהליך המעבר של מולקולות מאזור אחד בכלי לאזור שני.

המעבר הוא מאזור עם ריכוז גבוה לאזור עם ריכוז נמוך.

קצב הדיפוזיה הוא פרופורציונאלי ל  $U_{rms}$

**גזים לא-אידיאליים - גזים ריאליים - non-ideal gases**

- עבור גז אידיאלי מתקיים  $\frac{PV}{nRT} = 1$
- בלחצים נמוכים כל הגזים מתנהגים כגזים אידיאליים.
- כאשר הלחץ עולה, מולקולות הגז מרגישות אחת את השניה, והן נמשכות או נדחות זו מזו.
- נפח המולקולה אינו יכול להיחשב לנקודתי.
- בגז ריאלי  $\frac{PV}{nRT} \neq 1$
- כמו כן - משוואת המצב תהיה שונה.

**משוואת ון דר וולס:**  $\left(P + \frac{n^2 a}{V^2}\right)(V - nb) = nRT$

- P - הלחץ הנמדד
- n - מספר המולים
- V - נפח הכלי
- a, b - קבועי ון דר וולס

בגז אידיאלי נקבל  $a = b = 0$ .

האיבר  $\frac{n^2 a}{V^2}$  קשור לכוחות הבין-מולקולאריים.

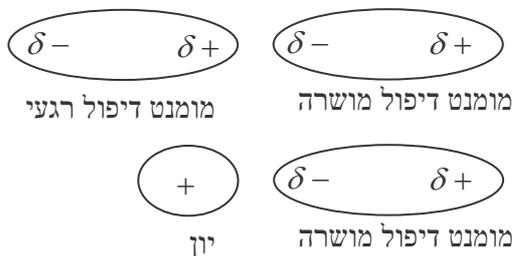
- לחץ "מתוקן". אם  $a > 0$  אז יש כוחות משיכה בין המולקולות.  $\left(P + \frac{n^2 a}{V^2}\right)$

- nb - נפח עצמי של המולקולות.

- (V - nb) - נפח "מתוקן" - הנפח החופשי בתוך הגז.

ככל שהרדיוס האטומי גדול יותר, גם b גדול יותר. לדוגמה:  $b(Xe) > b(He)$

**כוחות דיספרסיה - כוחות לונדון**  
כוחות בין מולקולות לא פולאריות



נוזל - קיימים כוחות משיכה בין מולקולאריים חזקים הגורמים למולקולות לתפוש נפח מוגדר. (בטמפרטורה "מספיק" נמוכה או בלחץ "מספיק" גבוה עוברים ממצב גז למצב נוזל).

אנרגיה אופיינית לקשרים בין מולקולאריים:  $1-10KJ / mole$   
 אנרגית קשר קובלנטי:  $100-1000KJ / mole$

כוחות בין מולקולאריים בנוזל - גורם למתח פנים. לכן כאשר מניחים מחט על כוס מים, היא יכולה להמשיך לצוף ולא לשקוע. בשביל שהיא תשקע היא צריכה לשבור כוחות בין מולקולאריים שבמולקולות המים. כוחות המשיכה שפועלים על מולקולות בפנים הנוזל גדולים מאלה שפועלים על מולקולות שעל פני הנוזל.

האנרגיה הפוטנציאלית של המולקולות שבפנים הנוזל נמוכה משל אלו שעל פני שטח הנוזל. הנוזל נוטה להגיע לצורה שבה שטח הפנים מינימאלי.

**נידוף / אידוי** - התנתקות מולקולות מפני השטח של הנוזל ומעברן לפאזה הגזית.

נוזל בכלי סגור:

בהתחלה יש נידוף - חלק מהנוזל הופך לגז.

לאחר מכן מתחיל עיבוי חלקי - חלק מהאדים הופכים חזרה לנוזל.

לבסוף קצב העיבוי משתווה לקצב הנידוף ואז יש שיווי משקל דינאמי בין הנוזל לאדים.

לחץ האדים של הנוזל = לחץ אדי הנוזל במצב שיווי משקל עם הנוזל. Vapor pressure  
הלחץ הזה תלוי בטמפרטורה ובסוג הנוזל.

בכלי פתוח כשקיים לחץ חיצוני קבוע:

כאשר מחממים את הנוזל הוא מתחמם עד שלחץ אדי הנוזל שווה ללחץ החיצוני, ואז הנוזל רותח.

רתיחה - מצב בו מתרחש אידוי של הנוזל בכל חלל הנוזל ולא רק מפני השטח שלו.

בזמן רתיחה - טמפרטורת הנוזל נשארת קבועה! כל האנרגיה שנספגת בנוזל הולכת לשבירת הקשרים המולקולאריים.

נקודת הרתיחה - הטמפרטורה שבה מתרחש תהליך הרתיחה. boiling point

נקודת רתיחה נורמאלית - נקודת רתיחה של נוזל בלחץ חיצוני של 1 אטמוספירה.

משוואה לתלות לחץ האדים בטמפרטורה - משוואת קלזיוס קלפרון:

$$\ln P = -\frac{\Delta H_{vap}}{R} \cdot \left(\frac{1}{T}\right) + C$$

P - לחץ האדים

T - טמפרטורה

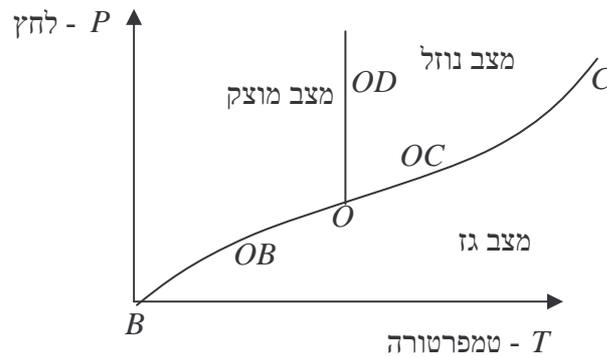
C - קבוע שתלוי בסוג המולקולה.

$\Delta H_{vap}$  - חום האידוי enthalpy of vaporization - כמות האנרגיה הדרושה כדי להעביר מול של חומר

מנוזל לאדים בטמפרטורה קבועה מסוימת.

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

דיאגרמת פאזות (מצבי צבירה של החומר - גז, נוזל, מוצק)



בכל טמפרטורה ולחץ, החומר נמצא במצב צבירה מסוים - גז, נוזל או מוצק.

OC - קו לחץ האדים של הנוזל

OB - קו לחץ האדים של מוצק

OD - עקומת נקודת ההיתוך - שיווי משקל בין מוצק לנוזל.

הנקודה הקריטית  $(T_c, P_c)$  - הטמפרטורה הגבוהה ביותר שהחומר יכול להיות בה בפאזה הנוזלית.

הנקודה O - הנקודה המשולשת - החומר יכול להיות קיים בו זמנית ב-2-3 פאזות.

המעבר ממוצק לנוזל נקרא התכה.

המעבר מנוזל למוצק נקרא קפיאה או התמצקות.

המעבר ממצב נוזל למצב גז נקרא אידי או נידוף.

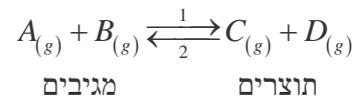
המעבר ממצב גז למצב נוזל נקרא עיבוי.

המעבר ממוצק למצב גז נקרא המראה.

המעבר ממצב גז למצב מוצק נקרא הנחתה

**שיווי משקל כימי** - שיווי משקל של ריאקציה כימית.

בפאזה גזית: A, B, C, D - מולקולות או אטומים.



קצב הריאקציה בכיוון ימינה  $\xrightarrow{1}$  :  $r = k[A][B]$

קבוע קצב בכיוון  $\rightarrow$  - *rate constant* :  $k$

[X] : הריכוז המולרי של המולקולה X ביחידות של מול חלקי ליטר.

קצב הריאקציה בכיוון שמאלה  $\xleftarrow{2}$  :  $r = k[C][D]$

בשיווי משקל (דינאמי):  $r = r$  כלומר  $k[A][B] = k[C][D]$

- קבוע שיווי המשקל לפי ריכוזים מולריים.  $K_c \equiv \frac{k}{k} = \frac{[C][D]}{[A][B]}$

$K_c$  - בהינתן טמפרטורה הוא קבוע. הוא תלוי בטמפרטורה.

דוגמה:  $(A + B + B \rightleftharpoons C + C + C + D) \quad A + 2B \rightleftharpoons 3C + D$

$$r = k[A][B][B] = k[A][B]^2$$

$$r = k[C]^3[D]$$

$$K_c = \frac{k}{k} = \frac{[C]^3[D]}{[A][B]^2} \quad \text{לכן}$$

דוגמה:  $aA + bB + cC \rightleftharpoons dD + eE + fF$

$$K_c = \frac{[D]^d [E]^e [F]^f}{[A]^a [B]^b [C]^c}$$

דוגמה: מתנול  $CO_{(g)} + 2H_{2(g)} \rightleftharpoons CH_3OH_{(g)}$

$$K_c = \frac{[CH_3OH]}{[CO] \cdot [H_2]^2}$$

איך יודעים באיזה כיוון תרחש הריאקציה?

$$Q_c(t) = \frac{[CH_3OH]_t}{[CO]_t [H_2]_t^2} \quad \text{- ביטוי פעילות המסות ע"פ ריכוזים מולריים בזמן } t.$$

אם  $Q_c(t) < K_c$  אז הריאקציה תתרחש ימינה.

אם  $Q_c(t) > K_c$  אז הריאקציה תתרחש שמאלה.

קבוע שיווי המשקל מוגדר עבור ריאקציה נתונה, כלומר מקדמים סטוכיומטריים מסוימים, תוצרים ומגיבים.

דוגמה: (1)  $2H_{2(g)} + O_{2(g)} \rightleftharpoons 2H_2O_{(g)}$

$$K_c^{(1)} = \frac{[H_2O]^2}{[H_2]^2 \cdot [O_2]}$$

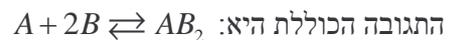
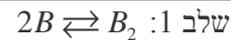
אפשר להסתכל על הריאקציה גם הפוך: (2)  $2H_2O_{(g)} \rightleftharpoons 2H_{2(g)} + O_{2(g)}$

$$K_c^{(2)} = \frac{[H_2]^2 \cdot [O_2]}{[H_2O]^2} = \frac{1}{K_c^{(1)}} \quad \text{במקרה כזה:}$$

אם לא נצמצם את האיזון נוכל לרשום את הריאקציה גם כ: (3)  $4H_{2(g)} + 2O_{2(g)} \rightleftharpoons 4H_2O_{(g)}$

$$K_c^{(3)} = \frac{[H_2O]^4}{[H_2]^4 \cdot [O_2]^2} = (K_c^{(1)})^2 \quad \text{במקרה כזה נקבל:}$$

לכן חשוב לאזן את הריאקציה.

**אם הריאקציה מתרחשת בשלבים:**

$$K_c^{(1)} = \frac{[B_2]}{[B]^2} \quad \text{- קבוע שיווי משקל של שלב ביניים ראשון.}$$

$$K_c^{(2)} = \frac{[AB_2]}{[A][B_2]} \quad \text{- קבוע שיווי משקל של שלב ביניים שני.}$$

$$K_c^{tot} = K_c^{(1)} \cdot K_c^{(2)} = \frac{[AB_2]}{[B]^2 \cdot [A]} \quad \text{- קבוע שיווי משקל עבור התגובה הכוללת.}$$

**קבוע שיווי משקל לפי לחצים חלקיים:**

$$PV = n_i RT$$

$$[X_i] = \frac{n_i}{V} = \frac{P_i}{RT} \quad \text{- ריכוז מולרי ביחידות של מול חלקי ליטר.}$$

$$R = 0.08206 \left[ \frac{L \cdot atm}{mol \cdot K} \right]$$

אם הריאקציה היא  $aA + bB + cC \rightleftharpoons dD + eE$  קבוע שיווי המשקל הוא:

$$K_c = \frac{[D]^d [E]^e}{[A]^a [B]^b [C]^c} = \frac{\left(\frac{P_D}{RT}\right)^d \left(\frac{P_E}{RT}\right)^e}{\left(\frac{P_A}{RT}\right)^a \left(\frac{P_B}{RT}\right)^b \left(\frac{P_C}{RT}\right)^c} = \frac{(P_D)^d (P_E)^e}{(P_A)^a (P_B)^b (P_C)^c} \left(\frac{1}{RT}\right)^{\Delta n}$$

$K_p$  - קבוע שיווי משקל לפי לחצים חלקיים.

$$K_c = K_p \left(\frac{1}{RT}\right)^{\Delta n}$$

$$K_c = \frac{[NH_3]^2}{[N_2][H_2]^3} = \frac{(P_{NH_3})^2}{(P_{N_2})(P_{H_2})^3} \cdot \left(\frac{1}{RT}\right)^{-2} \quad \text{דוגמה: } N_2 + 3H_2 \rightleftharpoons 2NH_3$$

**עקרון לה-שטלייה - עקרון כללי להתנהגות המערכת בתגובה להפרעה לשיווי משקל:**

כאשר מפירים את שיווי המשקל של תגובה כימית, המערכת תגיב כך שהתגובה תפנה לכיוון שבו תהיה הקטנה של ההפרעה לשיווי המשקל.

הפרת שיווי משקל: שינוי טמפרטורה, שינוי לחץ, שינוי נפח או שינוי ריכוז החומרים.

המערכת תגיע לנקודת שיווי משקל חדשה שתקטין (עד כמה שניתן) את השפעת השינוי.

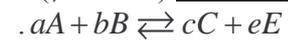
שינוי כמות המגיבים:



הוספת  $SO_3$  - המערכת תנסה להקטין את כמות ה-  $SO_3$  - הריאקציה תהיה בכיוון שמאלה.

$$K_c > Q_c \text{ (אחרי ההוספה)} \Leftarrow Q_c \text{ הריאקציה תהיה בכיוון שמאל.}$$

שינוי נפח: (שינוי לחץ)



$$K_c = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b} = \frac{(n_C)^c (n_D)^d}{(n_A)^a (n_B)^b} \cdot V^{(a+b)-(c+d)}$$

אם נתון שמתקיים  $a + b > c + d$ :

אם מקטינים את הנפח  $V$  (מגדילים את הלחץ), הערך  $V^{(a+b)-(c+d)}$  קטן.

$$A = \frac{(n_C)^c (n_D)^d}{(n_A)^a (n_B)^b} \text{ גדל. } K_c \text{ קבוע, זה מחייב ש}$$

כלומר יהיו לנו יותר תוצרים ופחות מגיבים, כלומר הריאקציה תהיה בכיוון ימין. פעולה זו תקטין את מספר המולים הכולל, כלומר תקטין את הלחץ.

אם נתון שמתקיים  $a + b < c + d$ :

הקטנת הנפח תגרום להגדלת הערך  $V^{(a+b)-(c+d)}$ .

$$A = \frac{(n_C)^c (n_D)^d}{(n_A)^a (n_B)^b} \text{ לכן הערך יקטן.}$$

לכן יהיו לנו יותר מגיבים ופחות תוצרים, כלומר הריאקציה תהיה בכיוון שמאל.

אם נתון שמתקיים  $a + b = c + d$  אז שינוי הנפח לא יגרום לשינוי  $V^{(a+b)-(c+d)}$  ולכן

$$A = \frac{(n_C)^c (n_D)^d}{(n_A)^a (n_B)^b} \text{ לא ישתנה - כלומר לא יגרם שום שינוי כימי מלבד שינוי הלחץ.}$$

קבוע שיווי המשקל בתגובות הטרונגניות:

$$\left[ X_{(s/l)} \right] = 1 \quad \text{ריכוז מוצקים ונוזלים הוא קבוע ונלקח כשווה ל 1.}$$



$$K_c = \frac{[CO][H_2]}{[H_2O]} \text{ - כלומר הריכוז של הפחמן במגיבים לא מופיע בנוסחה.}$$

$$K_p = \frac{P(CO) \cdot P(H_2)}{P(H_2O)}$$

$$\Delta n = 1 + 1 - 1 = 1$$

**תרמוכימיה**

אנרגיה וחום בתהליכים כימיים.

מדברים על המערכת מול הסביבה. המערכת - כמות ידועה ומוגדרת של חומר.

**סוגי מערכות**

1. מערכת פתוחה - יכולה להחליף אנרגיה וחומר עם הסביבה.
2. מערכת סגורה - יכולה להחליף אנרגיה עם הסביבה אבל לא יכולה להחליף חומר עם הסביבה.
3. מערכת מבודדת - לא יכולה להחליף אנרגיה וחומר עם הסביבה.

דוגמאות:

תרמוס - מערכת מבודדת.

נוזל בתוך מיכל סגור - מערכת סגורה.

נוזל בתוך כוס פתוחה - מערכת פתוחה.

**החוק הראשון של התרמודינאמיקה:**

$$\Delta E = q + w$$

שינוי האנרגיה הפנימי של המערכת  $\Delta E$  שווה לחום  $q$  ועוד העבודה  $w$ .

E - האנרגיה הפנימית של המערכת - סה"כ כל האנרגיה הקינטית והפוטנציאלית מכל צורה שהיא של החומר במערכת.

דוגמה לאנרגיה פוטנציאלית - האנרגיה הכימית הקשורה לקשרים הכימיים.

למשל אנרגיה בין אלקטרונים וגרעינים - אנרגיה פוטנציאלית חשמלית.

אנרגיה קינטית - נקראת גם תרמית - האנרגיה הקינטית הממוצעת של החלקיקים:  $\bar{E}_k = \frac{3}{2}KT$ .

$$\Delta E = E_{final} - E_{initial} \quad \text{- השינוי באנרגיה.}$$

$$\Delta E = 0 \quad \text{במערכת מבודדת מתקיים תמיד}$$

q - חום - אנרגיה תרמית שמועברת בין המערכת והסביבה כתצורה מהפרש טמפרטורות ביניהן.

q &gt; 0 - חום נבלע ע"י המערכת מן הסביבה.

q &lt; 0 - חום נפלט מהמערכת אל הסביבה.

החום עובר מהמקום החם (T גדול יותר) אל המקום הקר (T קטן יותר).

החום עובר עד להשוואת טמפרטורות.

קיבול חום (C) - כמות החום שיש לספק למערכת כדי להעלות את הטמפרטורה שלה ב 1 מעלה צלסיוס.

קיבול חום מולרי - כמות החום שיש לספק למול של תרכובת כדי להעלות את הטמפרטורה שלה ב 1

מעלה צלסיוס.

קיבול חום ספציפי - החום שיש לספק ל 1 גרם של תרכובת כדי להעלות את הטמפרטורה שלה ב 1 מעלה

צלסיוס.

$$\Delta T \times \text{קיבול החום הספציפי (חום סגולי)} \times \text{מסת החומר} = q$$

$$\Delta T = T_{final} - T_{initial} \quad \text{- הטמפרטורה של המערכת}$$

$$q > 0 \Leftrightarrow \Delta T > 0$$

$$q < 0 \Leftrightarrow \Delta T < 0$$

C - קיבול חום של המערכת כולה.

$w =$  עבודה = אנרגיה שנובעת מפעולה של כוח לאורך דרך מסוימת.  
 אם  $w > 0$  אז הסביבה ביצעה עבודה על המערכת.  
 אם  $w < 0$  אז המערכת ביצעה עבודה על הסביבה.

$w = -P_{ext} \cdot \Delta V$  כאשר  $P_{ext}$  - הלחץ החיצוני שפועל על המערכת ו  $\Delta V$  - שינוי הנפח.

אם  $\Delta V > 0$  אז  $w < 0$  - המערכת ביצעה עבודה על הסביבה.  
 אם  $\Delta V < 0$  אז  $w > 0$  - הסביבה ביצעה עבודה על המערכת.

במערכת מבודדת:  $\Delta E = 0$  וגם  $q = 0$  וגם  $w = 0$ .  
 במערכת סגורה: אם נתון שבמערכת שהתפשטה ( $w < 0 \Leftarrow \Delta v > 0$ ), אין שינוי באנרגיה הפנימית  $\Delta E = 0$  אז  $q > 0$ .

אם נתון ש  $q = 0$  במערכת שהתפשטה, אז  $\Delta E < 0$ .

פונקציות מצב - תכונות המערכת במצב שיווי משקל מסוים: [צפיפות החומר,  $E, T, V, P$ ] עבודה  $w$  וחום  $q$  הן פונקציות דרך ולא פונקציות מצב

אנטלפיה (H) (פונקצית מצב נוספת):  $H = E + PV$  כאשר:  
 E - אנרגיה פנימית.  
 P - לחץ המערכת.  
 V - נפח המערכת.  
 (בשיווי משקל  $P = P_{ext}$ ).

שינוי האנטלפיה -  $\Delta H = H_{final} - H_{initial}$   

$$\Delta H = (E_{final} + P_{final} V_{final}) - (E_{initial} + P_{initial} V_{initial})$$
  
 לכן:  $\Delta H = \Delta E + \Delta(PV)$

\* אם התהליך (ממצב התחלתי למצב סופי) מתרחש בלחץ קבוע:  $P_f = P_i = P$  אז:

$$\Delta H = \Delta E + P(V_f - V_i) = \Delta E + P\Delta V$$

מצד שני:  $\Delta E = q + w$

$$\Delta E = q_p - P \cdot \Delta V$$

$$\Delta H = q_p \text{ לכן}$$

שינוי האנטלפיה שווה לחום שנבלע או נפלט מהמערכת.

\* אם התהליך מתרחש בנפח קבוע ( $w = 0$ )  $\Delta V = 0$  אז נקבל:  $\Delta E = q_v$



$$T = 950^\circ C, P(CO_2) = 1atm$$

$$\Delta H = 176kJ \leftarrow$$

בהנחה שהשינוי בנפח המוצק קטן מאוד, חשב את השינוי באנרגיה  $\Delta E$  עבור הריאקציה הזו בלחץ קבוע של  $P = 1atm$  בטמפרטורה קבוע של  $T = 950^\circ C = 1223K$ .

$$\Delta H = \Delta E + P \cdot \Delta V$$

$$\Delta E = \Delta H - P \cdot \Delta V \quad \text{לכן}$$

$$\Delta V = V_f - V_i = V_{CO_2} = \frac{N_{CO_2} \cdot RT}{P} \quad \text{השינוי בנפח המוצקים זניח.}$$

$$P \cdot \Delta V = N_{CO_2} \cdot RT = (1mol) \times \left( 8.31 \frac{J}{mol \cdot K} \right) \times 1223K = 10.2kJ$$

$$\Delta E = 176kJ - 10.2kJ = 166kJ \quad \text{לכן:}$$

דוגמה נוספת: בטמפרטורה של 0 מעלות צלסיוס בלחץ של 1 אטמוספירה, צפיפות הקרח היא

$$0.917 \frac{gr}{cm^3} \quad \text{וצפיפות מים נוזלים היא } 0.9998 \frac{gr}{cm^3}$$

$$\Delta H = 6010 \frac{J}{mol} \quad \text{עבור תהליך המסה נתון}$$

חשב את  $\Delta E$  במסת 1 מול של קרח בלחץ קבוע של 1 אטמוספירה בטמפרטורה קבועה של  $0^\circ C$ .

$$\Delta E = \Delta H - P \Delta V$$

$$\Delta V = V_{liquid} - V_{solid} = 18.015gr \quad \text{עבור 1 מול.}$$

$$\Delta V = \frac{18.015gr}{0.9998 \frac{gr}{cm^3}} - \frac{18.015gr}{0.917 \frac{gr}{cm^3}} = -1.63cm^3 = -0.000163litter$$

$$P \Delta V = 1atm \cdot (-0.000163litter) = -0.165J$$

$$\Delta E = \Delta H - P \cdot \Delta V = 6010J + 0.165J \approx 6010J$$

$$\Delta E \approx \Delta H \quad \text{כלומר}$$

ריאקציה אנדותרמית ואקזותרמית

$$\Delta H = H_{final} - H_{initial}$$

$\Delta H > 0$  - אנדותרמית (H מגיבים > H תוצרים) - בליעת חום.

$\Delta H < 0$  - אקזותרמית (H מגיבים < H תוצרים) - שחרור חום.

$$\Delta H = q_p = C_p \Delta T \quad \text{בלחץ קבוע:}$$

אם  $\Delta H > 0$  אז לצורך הגדלת  $\Delta H$  יש לספוג חום מהסביבה

אם  $\Delta H < 0$  אז לצורך הקטנת  $\Delta H$  יש לפלוט חום אל הסביבה

עקרון לה שטלייה - השפעת שינוי טמפרטורה

בהעלאת הטמפרטורה של מערכת שנמצאת בשיווי משקל, המערכת תגיב בכיוון הריאקציה האנדותרמית (כלומר בכיוון ספיגת חום,  $\Delta H > 0$ ).

בהורדת הטמפרטורה של מערכת שנמצאת בשיווי משקל, המערכת תגיב בכיוון הריאקציה האקזותרמית (כלומר בכיוון פליטת חום,  $\Delta H < 0$ ).

**חוק HESS:** הפרש האנטלפיה של הריאקציה הכימית לא תלוי במספר השלבים שבהם היא מתרחשת (גם אם הם תיאורטיים) והוא שווה לסכום הפרשי האנטלפיה של השלבים השונים.

\* מקובל להגדיר לכל תרכובת מצב **סטנדרטי** שהוא צורתו היציבה של החומר בלחץ של 1 אטמוספירה בטמפרטורה שמגדירים.

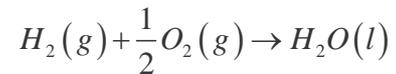
לדוגמה: מצבים סטנדרטיים בטמפרטורה של 25 מעלות צלסיוס -  $298K$ .

לדוגמה:  $H_2O(l)$ ,  $C(s)$ ,  $N_2(g)$ ,  $O_2(g)$ ,  $H_2(g)$ ,  $Na(s)$

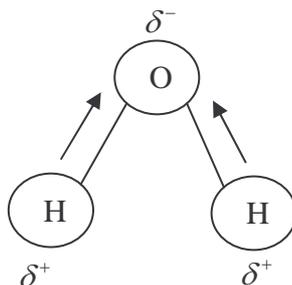
מגדירים לכל חומר **ריאקצית היווצרות**.

יצירת מול של חומר מהיסודות שלו במצבן הסטנדרטי.

לדוגמה - ריאקצית היווצרות של מים ב  $25^\circ C$



שינוי האנטלפיה נקרא אנטלפית היווצרות של החומר.

מים  $H_2O$ 

קשר מימן - קשר דיפול - דיפול בעזרת מימן.  
בקשר בין שתי מולקולות, החמצן של אחת מהמולקולות נקשר אל אחד מהמימנים של המולקולה השניה.  
החמצן במולקולה אחת, יכול להתחבר לשני מימנים שונים, של שתי מולקולות אחרות.

תמיסות מימיות

תערובת אחידה של מים נוזלים וחומר נוסף.  
המים נקראים **ממים**, solvent, ויש כמות גדולה שלהם.  
החומר הנוסף נקרא **מומס**, solute, ויש כמות קטנה ממנו. הוא יכול להיות גז, נוזל או מוצק.

**מולריות = Molarity** - מספר המולים של המומס בליטר של תמיסה. מסומן ביחידות של M  
(molar), והיחידות שלו הן mol/liter.  
הוא שווה למספר המולים של המומס חלקי נפח התמיסה.  
לדוגמה:  $[H_2SO_4] = 3M$  המומס במים.

מומסים:

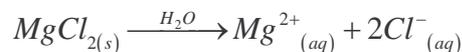
1. אלקטרוליטים - מומסים שמתפרקים בתמיסה מימית ליונים.
2. לא אלקטרוליטים.

אלקטרוליטים חזקים - 100% מהחומר מתפרק ליונים.  
אלקטרוליטים חלשים - רק אחוזים בודדים (10% בערך) מתפרקים ליונים.

דוגמה: התמוססות של אלקטרוליט שהוא גביש יוני:



(aq) - נמצא בתמיסה מימית, "ממוים", hydrated.

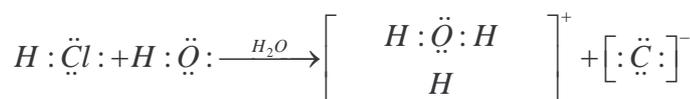
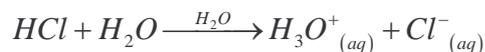


התמוססות של אלקטרוליט שאיננו יוני:

לדוגמה,  $HCl$  (משחררת למים יוני  $H^+$ ).



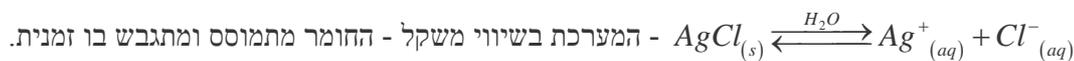
$H^+$  ממוים  $\leftarrow$  למעשה הפרוטון נקשר למולקולת מים ומתקבלת מולקולה  $H_3O^+$ , הידרוניום.



**תמיסה רוויה** - תמיסה שמכילה כמות מקסימאלית של מומס. רלוונטי לאלקטרוליט חלש.  
נקרא באנגלית saturated solution

הריכוז של המומס בתמיסה הרוויה, נקרא **מסיסות**, solubility.

**תמיסה בלתי רוויה** - תמיסה בה ריכוז המומס קטן מהמסיסות.



$$K = \frac{[Ag^+][Cl^-]}{[AgCl_{(s)}]}$$

K - קבוע שיווי משקל לפי ריכוזים חלקיים:

$$[AgCl_{(s)}] = 1 \text{ כי מדובר במוצק}$$

$[Ag^+]$ ,  $[Cl^-]$  - ריכוזי היונים.

$$K = [Ag^+][Cl^-] \text{ לכן}$$

עבור תמיסה רוויה מגדירים גודל שנקרא **מכפלת מסיסות**: K בתמיסה רוויה =  $K_{sp}$

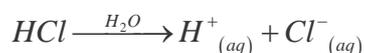
אם המוצק היוני יכול להיווצר בריאקציה סתירה בין בסיס וחומצה, החומר נקרא "מלח קשר-תמס"

חומצות ובסיסים - סוגים שונים של תמיסות.

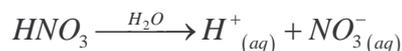
חומצה - חומר שבתמיסה מימית משחרר יוני  $H^+$  (פרוטון).

בסיס - חומר שבתמיסה מימית משחרר יוני  $OH^-$  (הידרוקסיד).

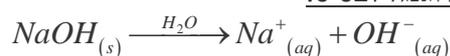
**דוגמה לחומצות:**



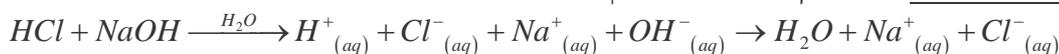
Hydrochlorid – Ocid - HCl



**דוגמה לבסיס:**



תגובת סתירה: תגובה בין חומצה ובסיס לקבלת מים ומלח.

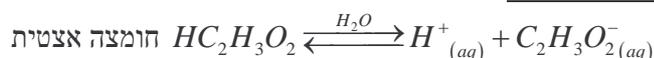


החומצה HCl והבסיס NaOH.

מלח מומס במים.  $Na^+_{(aq)} + Cl^-_{(aq)}$

**למעשה:** הריאקציה  $H^+ + OH^- \rightarrow H_2O$  היא באמת:  $H_3O^+ + OH^- \rightarrow 2H_2O$ .

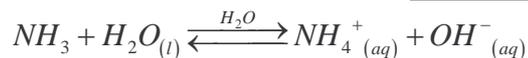
**חומצה חלשה:**



$$K_a = \frac{[H^+][C_2H_3O_2^-]}{[HC_2H_3O_2]} = 1.8 \cdot 10^{-5}$$

קבוע שיווי משקל לחומצה, קבוע החומצה, קבוע ההתפרקות -

בסיס חלש:



$$K_b = \frac{[OH^-][NH_4^+]}{[NH_3]} = 10^{-5}$$

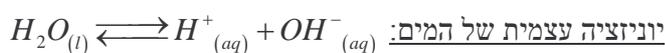
קבוע שיווי משקל לבסיס:  $10^{-5}$

חוזק החומצה / הבסיס: נמדד גם על ידי מושג ה- $pH$  וה- $pOH$ .

$$pOH = -\log([OH^-]) \quad pH = -\log([H^+])$$

$$[H^+] = 10^{-pH} = \frac{1}{10^{pH}}$$

כאשר  $pH$  עולה, הריכוז  $[H^+]$  יורד (ולהפך).



$$K_w = [H^+][OH^-] = 10^{-14}$$

קבוע ההתפרקות של מים, קבוע שיווי המשקל של המים.

(הערך  $10^{-14}$  מתאים לטמפרטורת החדר  $T = 25^\circ C$ ).

$$pK_w = -\log(K_w) = -\log([H^+]) - \log([OH^-]) = pH + pOH = 14$$

$$pH = pOH = 7 : T = 25^\circ C$$

במים טהורים בטמפרטורה

אם  $pH = 7$  אז התמיסה ניטרלית.

אם  $pH > 7$  אז התמיסה היא בסיסית.

אם  $pH < 7$  אז התמיסה היא חומצית.

בתמיסות מימיות: תמיד מתקיים:  $pH + pOH = 14$  .  $K_w = 10^{-14}$

אם נוסף חומצה,  $[H^+]$  גדל ( $pH$  קטן). ריכוז ה- $OH^-$  יקטן. התפרקות המים תקטן.

$$K_w = [H^+][OH^-] = 10^{-14} \text{ במים טהורים:}$$

$$pK_w = -\log(K_w) = pH + pOH = 14$$

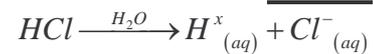
ריכוז מולקולת המים הוא:  $55.4 \frac{\text{mol}}{\text{liter}}$

$$[OH^-] = [H^+]^{x^2} = x$$

$$x^2 = 10^{-14}$$

$$x = 10^{-7} M$$

### דוגמה 1:



חשב את ריכוזי  $H^+$ ,  $OH^-$ ,  $Cl^-$  בחומצה חזקה  $HCl$  שהוכנה בריכוז  $0.015M$  (חומצה חזקה - כל החומצה שהתפרקה).

$$[H^+] = [Cl^-] = 0.015M$$

$$K_w = [H^+][OH^-] = 10^{-14} \text{ נכון תמיד בתמיסה מימית:}$$

$$[OH^-] = \frac{10^{-14}}{[H^+]} = \frac{10^{-14}}{0.015M} = 6.7 \cdot 10^{-13} M$$

קיבלנו הקטנה של היוניזציה העצמית:  $pOH = -\log([OH^-]) = -\log(6.7 \cdot 10^{-13}) = 12.2$

### דוגמה 2:

אם ניקח חומצת בריכוז  $10^{-8} M$ :



$$[H^+] = 10^{-8} + x$$

$$[OH^-] = x$$

$$[H^+][OH^-] = (10^{-8} + x) \cdot x = 10^{-14}$$

$$\text{לכן } x = 9.5 \cdot 10^{-8} M$$

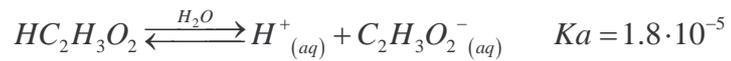
$$[H^+] = 10^{-8} + 9.5 \cdot 10^{-8} = 1.05 \cdot 10^{-7} M$$

$$[OH^-] = 9.5 \cdot 10^{-8} M$$

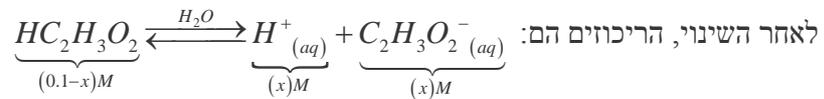
$$pH = -\log([H^+]) = -\log(1.05 \cdot 10^{-7}) = 6.98$$

הערה: בדוגמה 1 אין צורך להתחשב ביוניזציה עצמית של המים כי הוא סדר גודל של  $10^{-7} M$  וזניח לעומת החומצה.

חומצה חלשה:  $K_a \sim 10^{-5} - 10^{-6}$ .



מהו ערך ה  $pH$  של חומצת  $HC_2H_3O_2$  בריכוז  $0.1M$ ?



$$Ka = \frac{[H^+][C_2H_3O_2^-]}{[HC_2H_3O_2]} = \frac{x \cdot x}{0.1 - x} = 1.8 \cdot 10^{-5}$$

לכן  $x = 1.34 \cdot 10^{-3}$ .

$$pOH = 14 - 2.89 = 11.11 \quad pH = 2.89 \quad [H^+] = (x)M = 1.34 \cdot 10^{-3} M$$

### מוצקים

מתחלקים לגבישים בעלי סדר מוגדר ואמורפיים.  
גבישים יש תא יחידה. המבנה הכולל של הגביש הוא חזרה על תא היחידה בכל הכיוונים.  
גביש (סריג) קובי - תא היחידה הוא קובייה. יש שלושה סוגים בסיסיים:

1. קובי פשוט - SC - יש אטומים רק בקודקודים.
2. קובי ממורכז גוף - BCC - יש אטומים בקודקודים ועוד אחד במרכז.
3. קובי ממורכז פאה - FCC - יש אטומים בקודקודים וגם על הפאות.

### מספר החלקיקים בתא יחידה

על מנת לחשב את מספר החלקיקים בתא יחידה סוכמים את מספר האטומים, אבל כל אטום שמשותף ל  $n$  תאי יחידה - סוכמים רק את החלק ה  $n$  שלו.

1. SC - יש שמונה אטומים וכל אחד מהם משותף ל 8 תאי יחידה. לכן כל אטום תורם  $\frac{1}{8}$ . סה"כ - 1.
2. BCC - שמונה האטומים בקודקודים תורמים 1 והאטום שבמרכז, השייך רק לתא יחידה זה תורם עוד חלקיק אחד. סה"כ 2 חלקיקים בתא היחידה.
3. כל אטום על הפאה משותף לשני תאי יחידה, ומכיוון שיש שש פאות, הם תורמים סה"כ 3 חלקיקים לתא היחידה. יחד עם החלקיק היחיד שתורמים האטומים שבקודקודים מגיעים בסך הכל ל 4 חלקיקים.

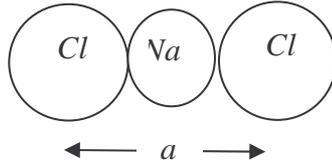
סוגי גבישים

1. גבישים יונים - בנקודות הסריג יושבים יונים אטומיים.
2. גבישים קובלנטיים - בנקודות הסריג יושבים אטומים.
3. גבישים מולקולאריים - בנקודות הסריג יושבות מולקולות.
4. גבישים מתכתיים - שיתוף האלקטרונים בין כל אטומי המוצק.

דוגמה לגביש יוני:  $NaCl$  - נתון כלורי - מלח בישול.



היונים השליליים גדולים מהחיוביים.



$$r(Na^+) = 98 \cdot 10^{-12} \text{ cm} \quad r(Cl^-) = 181 \cdot 10^{-12} \text{ m}$$

$$a = 2 \cdot r(Cl^-) + 2 \cdot r(Na^+) = 560 \cdot 10^{-12} \text{ m}$$

נוסחת הסריג היא:  $Na_4 Cl_4$ .

הנוסחה האמפירית היא:  $NaCl$ .

חישוב צפיפות החומר ביחידות של  $\frac{gr}{cm^3}$  לפי גודל תא היחידה:

$$\rho = \frac{4(m(Na) + m(Cl))}{a^3} = 2.2 \frac{gr}{cm^3}$$

גבישים קובלנטיים

מורכבים מאטומים שמחוזקים ע"י "רשת" של קשרים קובלנטיים.

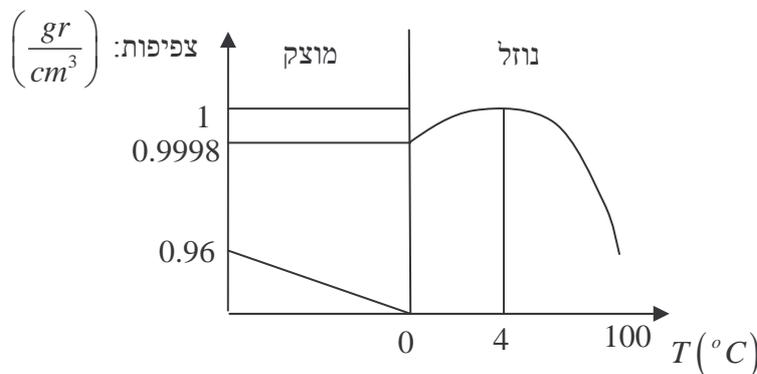
דוגמאות: יהלום, גרפיט (מאטומי פחמן).

יהלום: כל פחמן נמצא בקונפיגורציה של  $sp^3$  ומקיים קשר קובלנטי עם ארבעה אטומים שכנים (בצורת

טטרה-אדר).

גרפיט: כל אטום פחמן בתצורה של  $sp^2$  עם קשרי  $\pi$  בין השכבות וקשרי  $\sigma$  בתוכם.

האנומליה של המים:



משקלו הסגולי של הקרח קל מהמשקל הסגולי של המים הנוזלים.