

סיכום הרצאה על מבנה וקישור חלק ראשון (מבנה לוואיס ו-VSEPR), כימיה כללית ופיזיקלית

23:19:30 2024-12-09

תוכן העניינים

2	מבנה לוואיס
2	שלבים לכתיבת מבנה לוואיס
2	חריגות לכלל האוקטט
2	אלקטרון לא משובץ - רדיקלים
3	אוקטט לא מושלם
3	אוקטט מורחב
3	מבנה רזוננס
4	אוזון O_3
4	מטען פורמאלי
4	נוסחה לחישוב מטען פורמאלי
4	VSEPR וצורות של מולקולות
4	לינארי AX_2
5	AX_3
5	משולש מישורי - planar trigonal
5	AX_2E
5	bent
5	AX_4
5	טטרהדרים
6	AX_3E
6	pyramidal trigonal
6	AX_2E_2
6	bent - שפנץ
6	AX_5
6	bipyramidal trigonal - ביפירמידה טריגונואלית
7	AX_4E
7	seesaw
7	AX_6
7	מבנים אוקטהדרליים
7	AX_4E_2
7	Square Planar
7	מציאת מבנה
7	מומנט דיפול (μ)
8	HCl

8	CO
8	CCl ₄
8	(אורך קשר) pm

%} orbitals.html include {%

מבנה לואיס

לואיס היה הראשון שהחליט שהוא רוצה לראות או להבין קישורים בכימיה.

העיקרון של לואיס היה מאוד פשוט. לואיס אמר את הדבר הבא: אלקטרונים של אטומים משתפים ביניהם אלקטרונים, שהכלל שדוחף אותם לעשות זאת הוא "כלל האוקטט" (Octet Rule), **שכל אחד רוצה שיהיה מסביבו אוקטט**.

בעצם אנחנו מתעסקים רק עם **אלקטרוני הערכיות**. מה זה אלקטרוני ערכיות? אלה האלקטרונים ברמה הקוונטית האחרונה (ולא ברמת תת-קוונטית). לדוגמה, עבור 2s ו-2p, אלקטרוני ה-p וה-s נחשבים יחד כאלקטרוני ערכיות.

למשל, לחנקן N יש חמישה אלקטרוני ערכיות. כל אלקטרון מסומן כנקודה, והמטרה בסופו של דבר היא ליצור שיתוף קשרים. הקשרים יכולים להיות יחידים, כפולים, או משולשים. לדוגמה, עבור מימן H מתקיים "כלל הדובלט" במקום כלל האוקטט, כך שמספיקים שני אלקטרונים סביבו.

H	C	N	O	F	Se
1	4	5	6	7	6



דיברנו על קשרים פולאריים ואיך מוצאים אותם לפי טבלת אלקטרוניגטיביות. שלב נוסף הוא חישוב אחוז יוני של קשרים. התחלנו גם לדבר על איך יוצרים מבנה לואיס.

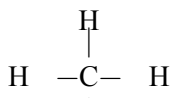
שלבים לכתיבת מבנה לואיס

1. ספירת אלקטרוני ערכיות.
2. זיהוי האטום המרכזי - בדרך כלל האטום עם האלקטרושיליות הנמוכה ביותר. פחמן C תמיד יהיה אטום מרכזי. אטומי מימן H תמיד יהיו בקצוות.
3. יצירת מבנה שלד וחיבור האטומים במבנה על ידי קשרים קוולנטיים יחידים.
4. חישוב מספר האלקטרונים שנשארו (שניים יורדים על כל קשר קוולנטי)
5. השלמת האלקטרונים שנשארו - תחילה אוקטטים של אטומי הקצה ואז של האטומים המרכזיים אם אפשר.

חריגות לכלל האוקטט

אלקטרון לא משובץ - רדיקלים

מבנה לואיס נוצר כך: לוקחים את כל האלקטרונים הוולנטיים, ומפזרים אותם בזוגות מסביב לאטום המרכזי. אם נשאר אלקטרון לא משובץ, זה נקרא "רדיקל", שהוא מצב נדיר.

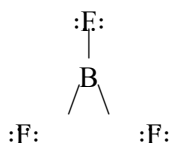


```
>-control"class="zoom <div
  ></label>Zoom:<label
  >value="3" max="10" min="1" class="zoom" type="range" <input
  ></div
```

לדוגמה, עבור CH₃, נותר אלקטרון לא משובץ, מה שיוצר רדיקל חופשי. רדיקלים הם חומרים פעילים במיוחד, שמגיבים מהר ליצירת קשרים חדשים. רדיקלים נפוצים במצבים כמו חשיפה לקרינה אולטרה-סגולה או רדיואקטיביות.

אוקטט לא מושלם

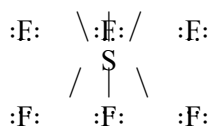
עוד חריגה מכלל האוקטט היא "אוקטט לא מושלם", לדוגמה BF₃, שבו האטום המרכזי בור (B) נותר עם שישה אלקטרונים בלבד.



```
></div>class="viewer" <div
  >-control"class="zoom <div
  ></label>Zoom:<label
  >value="3" max="10" min="1" class="zoom" type="range" <input
  ></div
```

אוקטט מורחב

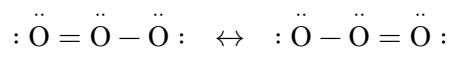
SF₆ חריגה נוספת היא "אוקטט מורחב", הנפוצה עבור אטומים עם אורביטלי *d*, כמו ב-SF₆, שבו הגופרית חורגת ל-12 אלקטרונים מסביבה.



```
></div>class="viewer" <div
  >-control"class="zoom <div
  ></label>Zoom:<label
  >value="3" max="10" min="1" class="zoom" type="range" <input
  ></div
```

מבנה רזוננס

בנושא רזוננס (Resonance) במקרים שבהם לא ניתן להכריע בין מבנים, אנו מתייחסים אליהם כמצבים רזונטיביים. דוגמה לכך היא מולקולת האוזון (O₃), שבה יש שני מבנים שקולים, והמבנה בפועל הוא ממוצע רזונטיבי ביניהם.

אוזון O_3 

מטען פורמאלי

לסיכום, כשבונים מבנה לואיס, עדיף למזער את המטענים הפורמליים (Formal Charge) במולקולה. מטען פורמלי מחושב כך:

נוסחה לחישוב מטען פורמאלי

$$\begin{aligned} \text{Formal Charge} = & \\ & \text{Electrons in Free Atom} \\ & - \text{Non-bonding Electrons} \\ & - \frac{1}{2} \times \text{Bonding Electrons} \end{aligned}$$

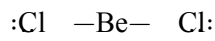
VSEPR וצורות של מולקולות

מבנים רזוננטיביים ואי-שוויון במטענים מובילים להבנה מעמיקה יותר של יציבות ואינטראקציות כימיות.

מספר	המרכזי האטום סביב הקבוצות מספר	מולקולה צורת	זווית	דוגמה
2		Linear	180°	BeCl ₂
3		Trigonal planar	120°	BF ₃
4		Tetrahedral	109.5°	CH ₄
5		Trigonal bipyramidal	90°	PF ₅
6		Octahedral	90°	SF ₆

לינארי AX₂

כל המולקולות שהן נקראות AX₂, עשיתם איזושהו מבנה, יש לכם A מרכזי ו-X₂, אטום מרכזי ושניים קשורים אליו. למשל בריליום כלוריד: BeCl₂.

BeCl₂

```
</div>class="viewer" <div
>-control"class="zoom <div
```

Zoom:

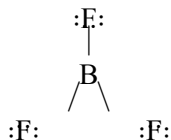
אם עשיתם בריליום כלוריד, אתם תראו שיש בריליום במרכז קשור לכלור. זה בעצם מערכת של AX₂. הדרך היחידה שהחומר האלה יצרו היא במקסימום דחייה (balance), repulsion ואמרנו שזה נעשה על ידי יצירת זווית של 180°.

רק ב-180° בין אלקטרוני הקשר מתקיים מקסימום דחייה. זה מבנה מאוד פשוט ולכן נותן מבנה לינארי. כל המולקולות שהיו לכם מהמבנה הזה AX₂ הן בעלות נטציה של AX₂, ללא זוגות אלקטרוניים לא קושרים. ל-A אין זוגות אלקטרוניים לא קושרים, הוא מסר אותם לכלור ונשאר בלי אלקטרוניים לא קושרים. המבנה הוא לינארי.

מיד תראו כי ל-AX₂E₂ עם זוגות אלקטרוניים לא קושרים, כמו מולקולת מים, נוצר מבנה שונה. מבנה כזה נראה כ"שפנפן" bent(.

AX₃**משולש מישורי - planar trigonal**

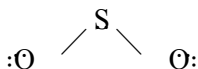
השלב הבא: משפחת חומרים שנקראת AX₃. לדוגמה, BF₃. זהו אטום מרכזי B שקשור לשלושה אטומים F. כל אחד מה-F מקיים את כלל האוקטט, אך ל-B לא מתקיים כלל האוקטט (לא נורא).

BF₃ - אוקטט לא מושלם

```
</div>class="viewer" <div
>-control"class="zoom <div
```

Zoom:

החומרים האלה צריכים ליצור מבנה במרחב עם מקסימום תחיה, וזהו מבנה של 120°, כמו צורה של "משולש מישורי" (Trigonal Planar), הדומה לסימן של "מרצדס".

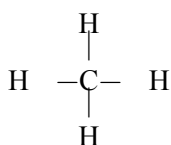
AX₂E**bent****SO₂**

לעיתים החומר ייצור מבנה AX₂E עם זוג אלקטרונים לא קושר. לדוגמה, המולקולה SO₂: כשיוצרים מבנה לואיס ל-SO₂, הגופרית חורגת מכלל האוקטט, ויש לה זוג אלקטרונים לא קושר. המבנה הזה נקרא AX₂E, עם זוויות מעט קטנות מ-120°, בשל דחיפת זוג האלקטרונים הלא קושר.

```
>class="viewer" <div
></div
>-control"class="zoom <div
></label>Zoom:<label
>value="3" max="10" min="1" class="zoom" type="range" <input
></div
```

AX₄**טטרהדרים**

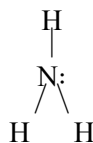
מבנים נוספים כוללים AX₄ – המבנה הטטראדרי. לדוגמה, CH₄: מבנה רגיל שבו יש 109° בין הקשרים.

CH₄

```
></div>class="viewer" <div
>-control"class="zoom <div
></label>Zoom:<label
>value="3" max="10" min="1" class="zoom" type="range" <input
></div
```

AX₃E**pyramidal trigonal**

כאשר יש זוג אלקטרונים לא קושר, כמו באמוניה (NH₃), המבנה עדיין טטראדרי, אך הזוויות קטנות ל-107°.

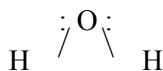
NH₃

```
></div>class="viewer" <div
>-control"class="zoom <div
```

Zoom:

AX₂E₂**bent - שפנפן**

במולקולת מים (H₂O) הזוויות קטנות עוד יותר ל-104° בשל שני זוגות אלקטרונים לא קושרים. למרות שמבנה לוואיס לכאורה נראה סימטרי, מודל VSEPR מראה שהמולקולה עצמה היא לא לינארית.

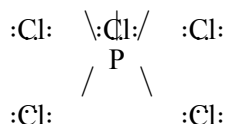
H₂O

```
></div>class="viewer" <div
>-control"class="zoom <div
```

Zoom:

AX₅**bipyramidal trigonal - ביפירמידה טריגונלית**

מבנה נוסף: AX₅, ביפירמידה טריגונלית, או דו-פירמידה משולשת (דור: לא סגור על התרגום) (Trigonal Bipyramidal). לדוגמה, PCl₅, שבו שלושה אטומים במישור וזוויות של 120°, ושני אטומים נוספים בזוויות של 90° ו-180°. תשומת הלב שבמולקולת PCl₅ יש חריגה מכלל האוקטט מהסוג של אוקטט מורחב - הגופרית חורגת ל-10 אלקטרונים. ככלל, חריגות כאלה מתקיימות ביסודות מהשורה השלישית ומעלה.

PCl₅

```
</div>class="viewer" <div
>-control"class="zoom <div
```

Zoom:



seesaw

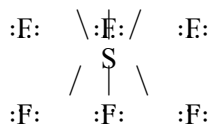
במולקולות מורכבות יותר, כמו SF₄, המבנה הוא AX₄E, עם זוג אלקטרונים לא קושר, והמבנה נותר דו-פירמידלי.



מבנים אוקטהדרליים

לבסוף, מבנים אוקטהדרליים (AX₆), כמו SF₆, כוללים שישה קשרים בזוויות של 90°. גם כאן יש חריגה מכלל האוקטט מהסוג של אוקטט מורחב - הגופרית חורגת ל-12 אלקטרונים.

SF₆ - אוקטהדר



```
</div>class="viewer" <div
>-control"class="zoom <div
```

Zoom:



Square Planar

מבנה כזה יכול לכלול זוגות אלקטרונים לא קושרים, כמו AX₄E₂, שבו המבנה הופך לשטוח מרובע (Square Planar).

מציאת מבנה

התהליך למציאת מבנה כולל:

- יצירת מבנה לואיס
- קביעת נוטציית AXE
- קביעת הגיאומטריה בהתאם למודל VSEPR

האסטרטגיה: תחילה מבצעים מבנה לואיס ולאחר מכן מפרקים כל אטום לבחון את הגיאומטריה סביבו. כעת ניגע במושג נוסף שחשוב להבין: "מומנט דיפול" או "כותביות".

מומנט דיפול (μ)

כאשר מולקולה מקבלת צורה מרחבית, מומנט דיפול (Dipole Moment) נובע מהפרש באלקטרוניביות בין האטומים. אם יש הפרש כזה, האלקטרונים נמשכים לאטום בעל האלקטרוניביות הגבוהה יותר. לדוגמה, בחיבור בין מימן לכלור, האלקטרונים נמצאים יותר זמן סביב הכלור: H → Cl



$$\mu = \delta \times d$$

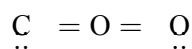
HCl

```
</div>class="viewer" <div
>-control"class="zoom <div
```

Zoom:

CO

היחידות למדידת מומנט דיפול הן, "Debye" אך ניתוח הכותביות חשוב יותר להבנה מרחבית. לדוגמה, במולקולה CO_2 : המצן מושך אלקטרונים חזק יותר מפחמן, כך שקיים מומנט דיפול בכל קשר. עם זאת, הוקטורים של מומנט הדיפול שווים בגודלם ובכיוונים מנוגדים, ולכן המולקולה אינה כותבית. למרות קיומו של מומנט דיפול בכל קשר, חיבור וקטורי מבטל את הכותביות של המולקולה.



```
</div>class="viewer" <div
>-control"class="zoom <div
```

Zoom:

CCl₄

דוגמה נוספת: CCl_4 . כאן, הפחמן נמצא במרכז, וארבעת הכלורים מסודרים בצורה טטראדרלית. אף שקיים הפרש באלקטרוניביות בין פחמן לכלור, המולקולה אינה כותבית משום שהוקטורים של מומנט הדיפול מתבטלים. אם מחליפים אחד מהכלורים במימן, מתקבלת מולקולה כותבית, שכן המבנה אינו סימטרי עוד.

```
</div>class="viewer" <div
>-control"class="zoom <div
```

Zoom:

דוגמאות אלו מדגישות כיצד צורת המולקולה משפיעה על הכותביות. חישוב וקטורי של מומנט דיפול מאפשר לקבוע האם המולקולה כותבית או לא. לדוגמה:

- H_2 – אין מומנט דיפול ואין כותביות (אטומים זהים).
- H_2O – מולקולה כותבית בשל המבנה הטטראדרלי ושני זוגות אלקטרונים לא קושרים.
- N_2 ו- O_2 – אין מומנט דיפול, משום שמדובר באטומים זהים.

אורך קשר (pm)

עכשיו נעבור למושג "אורך קשר". אורך קשר תלוי בחוזק הקשר. קשרים כפולים או משולשים קצרים וחזקים יותר מקשרים יחידים. לדוגמה:

- קשר פחמן-פחמן יחיד: 154 pm.
- קשר פחמן-פחמן כפול: 134 pm.
- קשר פחמן-פחמן משולש: 120 pm.

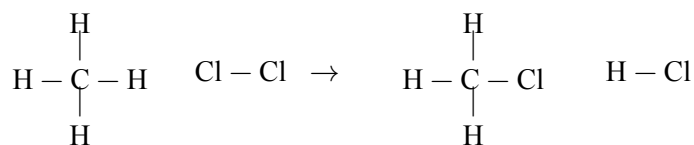
חוזק קשר ואורכו מאפשרים לחשב את אנתלפיית הריאקציה (ΔH) לפי משוואה פשוטה:

$$\Delta_{rxn}H = \Delta H(\text{bond breakage}) - \Delta H(\text{bond formation})$$

$$= \sum \text{BE}(\text{reactants}) - \sum \text{BE}(\text{products})$$

קשר	למול (בקילו-ג'ול קשר אנרגית
C-C	347
C=C	614
C≡C	839
C-H	413
C-Cl	330
Cl-Cl	243

לדוגמה, בריאקציה של $\text{CH}_4 + \text{Cl}_2 \rightarrow \text{HCl} + \text{CH}_3\text{Cl}$, ניתן לחשב את ΔH על ידי סכימת אנרגיות הקשרים שנשברו ונוצרו:



$$\Delta H = (4 \times 414) + (1 \times 243) - (1 \times 431) - (1 \times 339) = -113 \text{ kJ/mol}$$

לסיכום, מבנה לואיס הוא מודל ראשוני ומאוד אינטואיטיבי, אך הוא אינו מתאר את המציאות במלואה. לשם כך נעבור למודל אורביטלי המאפשר ניתוח מעמיק יותר של קשרים וחפיפת אורביטלים.

להמשך הקריאה על היברידיזציה