

דף נוסחאות כימיה כללית

ספקטרום אטומי ומודל בוהר נכון עבור אטומים דמויי מימן (בעלי אלקטרון בודד בקליפת הגרעין).

רדיוס הרמה ה-n: $r_n = a_0 \frac{n^2}{z}$ **אנרגיית הרמה ה-n:** $E_n = -R_H \frac{z^2}{n}$

$R_H = 13.6 \text{ eV} = 2.18 \times 10^{-18} \text{ J} = 2.18 \times 10^{-11} \text{ [erg]} = 3.29 \times 10^{15} \left[\frac{1}{\text{sec}} \right]$

$a_0 = \frac{h^2}{4\pi k m e^2} = 0.0529 \text{ [nm]} = 0.53 \text{ [Å]}$

מסת ומטען האלקטרון: $m = 9.1 \times 10^{-31} \text{ [kg]}$ $e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ c}$

משוואת רידברג (הפרש אנרגיה בין 2 רמות): $\Delta E = R_H z^2 \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right)$

לשים לב!! איזוטופים הם בעלי אותו Z (מספר אטומי)!!

אנרגיית יוניזציה: $E_I = R_H z^2 \frac{1}{n_i^2} \leftarrow n_f = \infty$ $\frac{R_H}{h} = 3.29 \times 10^{15} \frac{1}{\text{sec}}$

תדירות פוטון המעורב במעבר רמה: $\nu = \frac{|\Delta E|}{h} = \frac{R_H}{h} z^2 \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right)$

סדרות פליטה (חזרה אל הרמה) Lyman n=1, Balmer n=2, Paschen n=3

איך הגיעו לרדיוסים המותרים? ע"י הגדרת כימות תנע זוויתי $m v r = \frac{n h}{2\pi}$

אורך גל דה ברולי (דואליות גל חלקיק): $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m_e v}$

תנע של אלקטרון: $p = m v = \sqrt{2 m_e E_k}$

אורך גל של אור נראה: $400 \text{ [nm]} < \lambda < 700 \text{ [nm]}$

מהירות פוטואלקטרון הנפלט מאטום בעל אנ' קשר E0 לאחר שהוקרן באנרגיה

פוטונית Eph וצבר אנרגיה קינטית Ek: $E_k = E_{ph} - E_0$ $V = \sqrt{\frac{2 E_k}{m}} = \sqrt{\frac{2 (E_0 - E_{ph})}{m}}$

$\frac{R_H}{h} = \frac{2.18 \times 10^{-18} \text{ [J]}}{6.626 \times 10^{-34} \text{ [J} \times \text{sec]}} = 3.29 \times 10^{15} \text{ [Hz]}$

גדלים במטרים:

mili	micro	nano	pico	kilo	°
					A
10 ⁻³	10 ⁻⁶	10 ⁻⁹	10 ⁻¹²	10 ⁺³	10 ⁻¹⁰

המרות	J	erg	eV	kcal/mole
1 J =	1	10 ⁷	6.24 · 10 ¹⁸	1.44 · 10 ²⁰
1 erg =	10 ⁻⁷	1	6.24 · 10 ¹¹	1.44 · 10 ¹³
1 eV =	1.6 · 10 ⁻¹⁹	1.6 · 10 ⁻¹²	1	23.06
1 kcal/mole =	6.95 · 10 ⁻²¹	6.95 · 10 ⁻¹⁴	4.34 · 10 ⁻²	1
1 cm ⁻¹ =	1.99 · 10 ⁻²³	1.99 · 10 ⁻¹⁶	1.24 · 10 ⁻⁴	2.86 · 10 ⁻³

$1 \text{ atm} = 760 \text{ mmHG} = 760 \text{ Torr} = 101325 \text{ N / m}^2$
 $= 101.325 \text{ kPa (kilo Pascal)} = 1.01325 \text{ bar}$

$1 \text{ liter} \times \text{atm} = 24.2 \text{ cal} = 101.3 \text{ J}$ $1 \text{ cal} = 4.184 \text{ J}$

$1 \text{ a.m.u} = 1.66 \times 10^{-27} \text{ kg}$ $1 \text{ Molar} = 1 \text{ mol / liter}$

$1 \text{ J} = 0.239 \text{ kal} = 1 \text{ c} \times 1 \text{ volt}$ $1 \text{ C} = 3 \times 10^9 \text{ esu}$

$1 \text{ Deybe} = 10^{-18} \text{ esu} \times \text{cm} = 3.34 \times 10^{-30} \text{ cm}$

הגדרות בסיסיות

סימון כימי של יסוד $^{12}_6\text{C}$ (12 מספר מסה, 6 מספר אטומי)

מספר אטומי – מס' הפרוטונים שמכיל אטום = מס' האלקטרונים (באטום נייטרלי)
מספר מסה – מס' הפרוטונים + מס' הניוטונים בגרעין

איזוטופים – אטומים בעלי אותו מספר פרוטונים Z אבל מספר ניוטרונים שונה
יון – אטום בעל מטען קטיון – יון עם מטען חיובי (הוצא אלקטרון) **אניון** – יון עם מטען שלילי (נוסף אלקטרון)

משקל אטומי = תוחלת המשקלים של כל האיזוטופים

A.M.U יחידת המידה של משקל האטומי = 1/12 משקל של פחמן (יש בטבלה) בד"כ נשתמש בגרם למול ולא A.M.U

מולקולה מספר אטומים בקשר כימי **דוגמא NaCl** (נתרן כלורי)

משקל מולקולרי M.W סכום משקלים אטומיים של אטומים המרכיבים מולקולה

מספר אבוגדרו: מספר אטומי הפחמן ב-12 גרם חומר - $N_A = 6.022 \times 10^{23}$

מול כמות החומר המכילה מספר אבוגדרו של חלקיקים $1 \text{ mol} = \frac{W \text{ gr}}{M.W} = \frac{\#(\text{atoms})}{N_A}$

נוסחא אמפירית יחס מינימלי בין האטומים מרכיבים את המולקולה (צמצום שברים)
נוסחא מולקולרית הרכב האטומים המדויק במולקולה

ריאקציה כימית משוואה כימית שמתארת קשר בין תוצרים שנוצרים למגיבים.

מספר האטומים וסך המטען החשמלי שווה בתוצרים ובמגיבים.

תמיד, קודם צריכים לאזן את המשוואה וממליץ להתחיל מהאטומים שמופיעים בכמה נפחות מגיבים ותוצרים!

גורם מגביל המגיב שישגמר ראשון בריאקציה ויקבע את כמות התוצר המתקבל
סטויכיומטריה היחס בין היסודות בתרכובות מסוימות או במשוואה (לפי המקדמים)

אחוז נפחי $\frac{V_i}{V_{\text{total}}} \times 100$ **אחוז משקלי** $\frac{m_i}{m_{\text{total}}} \times 100$

המודל האטומי של בוהר (אטומים ויונים דמויי מימן-אלקטרון בודד)

- אלקטרון נע סביב הגרעין במסלול מעגלי בהשפעת הכוח החשמלי בין הגרעין והאלקטרון.
- אלקטרון יכול לנוע רק במסלולים מיוחדים סביב הגרעין (מצבים קשורים) ולכל מסלול רדיוס מסוים ובו אנרגיה מסוימת לגרעין. כל מסלול מסומן ב-n (מס' קוונטי).
- האלקטרון נע במסלולים ע"י בליעה או פליטה של פוטון.

קליטת פוטון- עלייה באנרגיה, פליטת פוטון- ירידה באנרגיה.

$n = 1$ - מצב יסוד, אנרגיה הכי נמוכה.

$n \neq 1$ - מצבים מעוררים.

$n = \infty$ - יינון, בו האלקטרון משתחרר מהאטום (האפקט הפוטואלקטרי).

האפקט הפוטואלקטרי אורך גל λ תדירות $\nu = \frac{c}{\lambda}$ **מספר הגל** $\frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c}$

אנרגיה של גל א"מ (פוטון) $E = h\nu$

אנרגיה קינטית של אלקטרון ששותרר ע"י פוטון: $E_k = E_{ph} - E_0$

פונקציית עבודה/ אנרגיית סף הדרושה לשחרור האלקטרון.

קבוע פלאנק $h = 6.626 \times 10^{-27} \text{ [erg} \times \text{sec]} = 6.626 \times 10^{-34} \text{ [J} \times \text{sec]}$

קבוע שימושי לאנרגיה: $hc = 12400 \left[\frac{\text{eV} \cdot \text{Å}}{\text{Å}} \right] = 1.9878 \times 10^{-25} \text{ [J} \cdot \text{m]}$ $J = \frac{\text{kg} \cdot \text{m}^2}{\text{sec}^2}$

מודל חלקיק בתיבה תלת מימדית

עבור תיבה באורך L וקואורדינטת מקום x **פונקציית הגל המתאימה לאלקטרון**

$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi n}{L} x\right)$ $n = 1, 2, 3, \dots$

רמות האנרגיה של האלקטרון בעל מסה m: $E_n = \frac{h^2 n^2}{8mL^2}$ **הפרשי רמות**

אנרגיה: $E_n = \frac{h^2}{8mL^2} (n_f^2 - n_i^2)$ **קבוע שימושי:** $\frac{h^2}{8m A^2} = 6.03 \times 10^{-18} \text{ J}$

המבנה האלקטרוני של האטום n- מספר קוונטי ראשי = הרמה האנרגטית של האלקטרון (עבור אטום מימן או דמוי מימן אין מספרים קוונטיים חוץ מ-n וכל האורביטלים שווים אנרגיה = מנוונים)

l- מספר קוונטי משני = קובע את התנע הזוויתי של האלקטרון, וצורת האורביטל במרחב

ml- מספר קוונטי מגנטי נובע מהזוויות אפקט מגנטי מתנועת האלקטרון מתאר את הכיוון המרחבי של האורביטל.

ms- מספר קוונטי של ספין לא נובע ממשוואת שרדינגר ולא תלוי במספרים האחרים

ערכים: $n=1,2,\dots$; $l=0,1,\dots,(n-1)$; $m_l=0,\pm 1,\pm 2,\dots,\pm l$; $m_s=\pm 1/2$

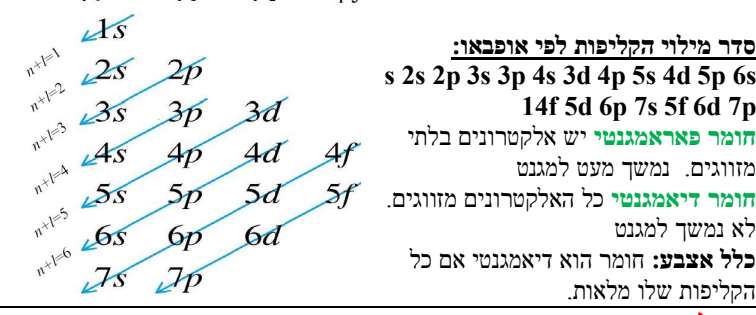
יש בסה"כ n^2 אורביטלים בכל קליפה אלקטרונית (צירופי l, m_l אפשריים).

יש לכל היותר $2n^2$ ברמה קוונטית ראשית n.

עקרון פאולי: לא יתכנו 2 אלקטרונים באטום עם אותו סט של מספרי (n, l, m_l, m_s)

כלל הונד: כשממלאים אלקטרונים באורביטלים מנוונים קודם כל מכניסים את אלה בעלי אותו ספין ואח"כ מזווגים אותם

עקרון אופבאו - סדר מילוי האורביטלים - עקרון $n+l$ ממלאים אלקטרונים בסדר עולה של הסכום $n+l$ כמו בדוגמא:



הטבלה המחזורית

היסודות מסודרים לפי מספר אטומי עולה החל מהפינה השמאלית העליונה, מעבר שורה משמעו קליפה אלקטרונית חדשה.

אותו טור = אותה קבוצה = אותה משפחה = תכונות דומות הנובעות מקונפיגורציה דומה של אלקטרוני הערכיות.

ואתה שורה = אותו מספר קוונטי = אותו n = אותה קליפה

מיסוך מטען הגרעין שמרגישים האלקטרונים החיצוניים קטן עקב נוכחות אלקטרונים פנימיים. ההשפעה של מיסוך משמעותית בירידה בטור כי נוספות קליפות

קליפת הערכיות = הקליפה בעלת ה-n הכי גבוה שמאכלס אורביטלי p או s

גז אציל = קליפת ערכיות מלאה = אנרגיית יינון גבוהה מאוד

מתכת אלקלית = אלקטרון יחיד בקליפת הערכיות = אנרגיית יינון נמוכה.

פוטנציאל יוניציפיה של X הוא הגדול בקבוצה אליה הוא משתייך = X ראש הטור

הרדיוס האטומי: נקבע עפ"י (1) המספר הקוונטי הראשי n (יותר דומיננטי) (2) המטען הגרעיני האפקטיבי Z_{eff}

EI אנר' יינון: האנר' הדרושה להוציא אלקטרון מאטום ניטרלי:
 $M \rightarrow M^+ + e^-$

EA אפניות (זיקה אלקטרונית): משתחררת כשמוסיפים אלקטרון לאטום ניטרלי:
 $M + e^- \rightarrow M^-$

רדיוס היון השלילי < רדיוס האטום < רדיוס היון החיובי

רדיוס היון השלילי < רדיוס האטום < רדיוס היון החיובי

סיכום:

- לאטומים עם אותו מס' אלקטרוניים: מטען גרעיני אפקטיבי גדול => רדיוס קטן
- אחרי יינון המרחק של האלקטרון מהגרעין קטן

מקרים יוצאי דופן: קליפה מלאה או חצי מלאה (האלקטרוניים לא מזווגים) הן בעלות יציבות מיוחדת וגם תת-רמה חצי מלאה (Mg שממלא את 3s).

כלומר קשה יותר ליינן אלקטרון.

$E_I(Na) < E_I(Al) < E_I(Mg)$



קונפיגורציה אלקטרונית תיאור חלוקת האלקטרונים בין האורביטלים השונים. דוגמא בפחמן C יש 6 אלקטרונים לכן

הקונפיגורציה היא: $1s^2 2s^2 2p^2$

תבנית לקונפיגורציה אלקטרונית:

1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p		

קונפיגורציה אלקטרונית של מתכות המעבר

למתכות המעבר תכונות מיוחדות הנובעות ממילוי קליפות פנימיות. הקונפיגורציה האלקטרונית של השורה הראשונה של מתכות המעבר (Z=21) $(\rightarrow 30)$:

המתכת	Z	הקונפיגורציה
Sc	21	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2$
Ti	22	$3d^2 4s^2$
V	23	$3d^3 4s^2$
Cr	24	$3d^5 4s^1$
Mn	25	$3d^5 4s^2$
Fe	26	$3d^6 4s^2$
Co	27	$3d^7 4s^2$
Ni	28	$3d^8 4s^2$
Cu	29	$3d^{10} 4s^1$
Zn	30	$3d^{10} 4s^2$

הסבר: כשיש מצב בו יש לרמה 3d אפשרות להשלים חצי קליפה או קליפה מלאה היא לוקחת אלקטרון מרמה 4s (ואז היא עוקפת את רמה 4s ברמת האנרגיה שלה).

כל הזמן נשארים 2 אלקטרונים ב-4s, חוץ מאשר ב-Cr וב-Cu.

Cr - הרמות 3d ו-4s מאוד קרובות באנרגיה, ויש ירידה באנרגיה הכללית כאשר אלקטרון אחד מהזוג 4s עובר לאורביטל 3d

קליפת הערכיות: הקליפה בעלת ה-n הגדול ביותר שמאכלסים בה אורביטלי s ו-p. מספר מקסימאלי של אלקטרונים בה הוא: $8 (ns^2 np^6)$.

גזים אצילים: כאשר קליפת הערכיות מלאה.

שיווי משקל כימי

זהו מצב בו 2 תגובות הפוכות מתרחשות בקצב זהה, בסה"כ אין שינוי בריכוזי החומרים בתגובה. עבור $aA + bB \rightleftharpoons cC + dD$

קבוע ש"מ לפי ריכוזים: $K_c = \frac{[C]_{eq}^c [D]_{eq}^d}{[A]_{eq}^a [B]_{eq}^b}$

ריכוז מולרי $[X]_{eq}$ = $\frac{mol}{liter}$

קבוע ש"מ לפי לחצים: $K_p = \frac{(P_C)_{eq}^c (P_D)_{eq}^d}{(P_A)_{eq}^a (P_B)_{eq}^b}$

P_x = הלחץ החלקי.

מעבר בין הקבועים: $K_p = K_c (RT)^{\Delta n}$; $k_c = k_p \left(\frac{1}{RT}\right)^{\Delta n}$

$(c+d) - (a+b) = \Delta n$

- הכפלת מקדמי התגובה בקבוע X קבוע ש"מ החדש: K_c^X
- בחיבור משוואות, קבוע ש"מ הוא מכפלת הקבועים של התגובות שחבורו.

$Q_c = \frac{[C]_i^c [D]_i^d}{[A]_i^a [B]_i^b}$

לכיוון ימין - לתוצרים - אקסותרמי - פולט חום $Q_c < k_c$

לכיוון שמאל - למגיבים - אנדותרמי - קולט חום $Q_c > k_c$

השפעות גורמים היציניים על ש"מ:

- לחץ - הגדלתו תגרום לכיוון בו מספר המולים קטן יותר. k קבוע.
- הוספת גז אינרטי לחץ קבוע תגרום לעלייה בנפח, ירידה בלחצים החלקיים, ולכן התגובה בכיוון שיש בו יותר מולים.
- טמפל - התגובה תהיה בכיוון האנדותרמי. k משתנה
- כימי - בהקטנת ריכוז, התגובה תהיה בכיוון שיגדיל אותו. k קבוע

מלחים קשי-תמס בעלי מסיסות מוגבלת במים, יוצרים ש"מ בין המוצק ליונים

מכפלת המסיסות: $M_a X_b(s) \rightleftharpoons aM^+(aq) + bX^-(aq)$

בתמיסה: $K_{sp} \geq [M^+]^a [X^-]^b$ - שוויון

מסיסות: כמות החומר שאפשר להמיס בתמיסה.

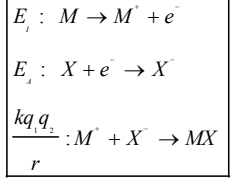
אפקט היון המשותף: אם מוסיפים לתמיסה רוויה של מלח קשה תמס, מלח נוסף המכיל יון משותף, מסיסות המלח המקורי יורדת (המערכת תיטה לכיוון המגיבים כדי לחזור לש"מ).

קשרים כימיים

קשר יוני נוצר מאינטרקציה של קטיון (מולקולה מיונת חיובית) ואניון (מולקולה שלילית שהוכנס לה אלקטרון עודף) – נוצר בעקבות מעבר אלקטרונים מקליפת הערכיות של הקטיון לזו של האניון כך ששניהם מגיעים לקונפיגורציה של גז אציל. התהליך מורכב מ-3 חלקים:

$$E = E_i - E_A + \frac{kq_1q_2}{(rX + rM)}$$

והאנרגיה דרושה:



$$k = 14.4 eV \text{ \AA}$$

E_A בסימן הפוך ל- E_i

עבור CaF_2 יש פעמים משיכה $Ca \leftrightarrow F$ ופעם אחת דחייה $F \leftrightarrow F$

כדי שהתהליך ישתלם אנרגטית אנרגיית הקטיון צריכה בעלת אנרגיית יינון נמוכה (טור ראשון או שני) והאניון יהיה בעל אנרגיית זיקה לא נמוכה מדי (אל מתכת).

קשר קוולנטי נוצר משיתוף אלקטרונים בין אטומים כך ששני בני הזוג בקשר מגיעים לקונפיגורציה של גז אציל. דרושים 2 אלקטרונים ליצירת קשר שנמצאים בין שני הגרעינים. כך נוצרות מולקולות. הקשר בד"כ בין אל-מתכות

קשר קווארדינטיבי קשר קוולנטי, שבו אטום אחד תורם את שני האלקטרונים בעוד שאטום אחר לא תורם כלום.

אלקטרושליליות היכולת של אטום במולקולה להתחרות על זוג אלקטרונים.

הפרש אלקטרושליליות קטן - הקשר קוולנטי יותר.

קשר פולרי: שיתוף אלקטרונים בין שני יסודות אינו במידה שווה – יש הפרדת מטען כך שהאטום אליו האלקטרונים נוטים – זהו האטום האלקטרושלילי יותר והוא נושא מטען חלקי שלילי והאטום השני נושא מטען חיובי שלילי: נוצר מומנט דיפול הקשר פולרי יותר ככל שההפרש באלקטרושליליות גדול יותר.

מומנט דיפול: מודד את מידת הקוטביות של הקשר $\mu = \delta d$

מומנט הדיפול $\mu [D = 10^{-18} \text{esu} \cdot \text{cm}]$

המרחק בין האטומים/אורך הקשר: $d [A = 10^{-8} \text{cm}]$

הפרש אלקטרושליליות $\delta [C = 3 \cdot 10^9 \text{esu}]$

אחוז הקשר היוני (100=יוני, 0=קוולנטי):

$$\% \text{ הקשר היוני} = \frac{\mu [D]}{4.8 \cdot 10^{-10} [\text{esu}] \cdot d [\text{cm}]} \cdot 100 = \frac{\mu [D]}{4.8 \left[\frac{D}{A} \right] \cdot d \left[\frac{A}{A} \right]} \cdot 100$$

כיוון הדיפול: שקול וקטורי אל הכיוון הכי אלקטרו שלילי (לגלמודים אין משמעות מבחינת החישוב הקוטרי).

מבני VSEPR: אלקטרונים דוחים זה את זה ולכן יסתדרו במרחק מקסימאלי

מספר זוגות גלמודים	גאומטריה מולקולרית	זווית אידיאלית	היברידיזציה
0	לינארי	180	180
0	משולש מישורי	120	120
1	זוויתי	קטן מ-120	120
0	טטרהדר	109.5	109.5
1	פירמידה משולשת	107	109.5
2	זוויתי	104.5	104.5

סימון לואיס

מבנה לואיס:

- ספירת כמה e וולנטיים יש (כולל התחשבות במטען המולקולה).
- מיקום האטום האלקטרוחיובי במרכז (מימן תמיד טרמינלי, חמצן כמעט תמיד חוץ מאשר בקשר OH).
- חיבור האטומים הנותרים בקשר לאטום המרכזי.
- השלמת אוקטט לאטומים ההיקפיים. פיזור האלקטרונים לפי סדר אלקטרושליליות יורד. לאטומים להם לא הושלם אוקטט נוסף קשרים כפולים (או משולשים ע"י שימוש בזוגות גלמודים).
- אם יש אלקטרונים נותרים הם ימוקמו על האטום המרכזי.

לא חייבים להשלים לאוקטט: Al, B, Be

6. קביעת המטען הפורמלי של האטומים.

מטען פורמלי: (מידת חלוקת האלקטרונים בין האטומים)

(מס אלק' ערכיות קושרים) - 0.5 - (מס אלק' ערכיות לא קושרים) - (N) = מספר אלקטרוני ערכיות באטום.

סכום המטענים הפורמליים כמטען כל המולקולה. עבור מולקולה ניטראלית המטען פורמלי הוא 0. עבור יון = מטען היון.

טיפים למבנה לואיס:

2 - אטומים עם מטען פורמלי זהה לא יהיו שכנים.

- אטומים משורה שלישית ומטה יכולים לחרוג מכלל האוקטט כך שיהיו יותר מ-8 אלקטרונים בקליפת הערכיות (היפרולנטיות)

- חמצן בד"כ לא יהיה אטום מרכזי ולא יהיה קשר חמצן חמצן במולקולה המכילה יותר מחמצן אחד פרט למקרים מיוחדים.

- בחומצות המורכבן מחמצן ומימן המימן בד"כ קשור לחמצן

- האטום היותר אלקטרושלילי אמור להיות בעל מטען פורמלי שלילי או אפס. - לא משאירים זוגות בלתי מזווגים.

מבנים רזונטיביים: מיקום האטומים זהה, אך מיקום האלקטרונים שונה.

סטייה מזוויות אידיאליות:

- זוג גלמוד תופס יותר מקום מזוג קושר
- מקום שהקשר תופס: קשר בודד > כפול > זוג גלמוד > משולש
- ככל שהמתמיר יותר אלקטרושלילי, כך תופס פחות מקום.

אורכי קשרים:

קשר בודד < קשר כפול < משולש

היברידיזציה (קשר קוולנטי = כל אחד תורם אלק'):

אורביטלים שנוצרים מחפיפה של אורביטלים חצי מלאים המתאימים מרחבית. **הכלאה SP:** אורביטל P ו-1 יוצרים 2 אורביטלי SP בשתי מערכות צירים שונות הכיוונית נקבעת ע"י אורביטל P שמתחת בהכלאה לכן הגיאומטריה ליניארית

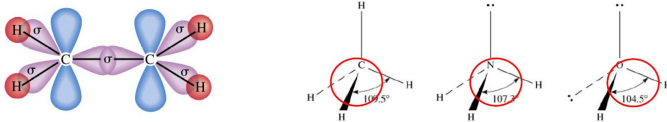
הכלאה SP²: אורביטל S ושני אורביטלי P יוצרים 3 אורביטלי SP²

הכלאה SP³: אורביטל S ושלושה אורביטלי P יוצרים 4 אורביטלי SP³

כללים להיברידיזציה:

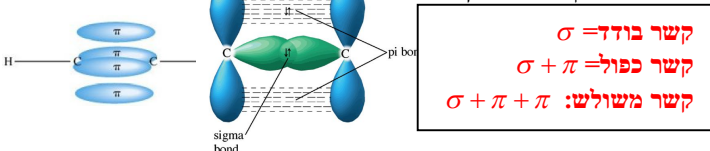
- כתיבת מבנה לואיס 2. זיהוי מספר הכיוונים במרחב א. קביעת מבנה VSEPR ב. קביעת סוג ההיברידיזציה 3. קביעת הגיאומטריה המרחבית לפי הטבלה:

צורת האורביטל	קישור	מספר אורביטלים אחרים היברידיזציה	אורביטלים אחרים היברידיזציה
Linear	קשר בודד אחד/זוג גלמוד וקשר משולש אחד או שני קשרים כפולים	2 קשרי σ 2 קשרי π	sp
Trigonal Planar	2 קשרים בודדים/זוגות גלמודים וקשר כפול אחד	3 קשרי σ 1 קשרי π	sp ²
Tetrahedral	4 קשרים בודדים/זוגות גלמודים	4 קשרי σ	sp ³



קשר σ: נוצר בין האורביטלים ההיברידיים צפיפות האלקטרונים בין הגרעינים.

קשר π: נוצר בין אורביטלי p שלא עברו הכלאה. צפיפות האלקטרונים מעל ומתחת לקו המחבר בין האטומים.



קשר בודד = σ
קשר כפול = σ + π
קשר משולש = σ + π + π

עקרון אבוגדרו: בתנאי לחץ וטמפרטורה שווים, נפחים שווים של גזים מכילים אותו מספר מולקולות.
גז אידיאלי: נפח החלקיקים ממנו הוא מורכב אפסי. אין אינטראקציות בין חלקיקי הגז.

משוואת המצב של הגזים האידיאליים: PV = nRT = m / Mw

P לחץ (1 atm = 760 mm Hg), V נפח, m משקל (גרם), T טמפרטורה (קלווין), n מספר מולים, R קבוע הגזים.

R = 0.082 (litre x atm) / (moles x k) = 82.1 (cm^3 x atm) / (moles x k) = 8.31 x 10^7 (erg) / (moles x k)
= 1.98 (cal) / (moles x k) = 8.31 (Joule) / (moles x k) = 62.33 (lit x mm Hg) / (moles x k)

עוד צורות למשוואת הגזים: rho = m/V צפיפות, PMw = rhoRT

תנאי S.T.P: T=0C, P=1 atm נפח של 1 מול גז כלשהו יהיה 22.4 ליטר

לחץ חלקי: הלחץ של גז בתערובת, שווה ללחץ שהיה לגז אילו היה לבדו בכלי.

חוק הלחצים החלקיים של דלטון: P_i = (n_i RT) / V_tot
chi_i = n_i / n_tot
P_i V_tot = n_i RT
P_i = chi_i P_tot
P_tot = p_1 + ... + p_i
n_tot = n_1 + ... + n_i
(P + n^2/V^2 * a)(V - nb) = nRT

a-קבוע הפרופרציה המביע את עוצמת כוחות המשיכה בין המולקולות.
b-נפח אפקטיבי של מול חומר (גדל ככל שרדיוס האטום גדל).

nb-נפח התפוס ע"י n מולים של גז הנפח האסור הרכב האוויר: 20% חמצן
גז מתנהג כאידיאלי בלחץ נמוך ובטמפרטורה גבוהה. ו-80% חנקן (N2).

התורה הקינטית של הגזים:

אנ' קינטית של מול אחד של גזים: E_k = (3/2) RT = (1/2) MwV^2

Mw - משקל מולקולארי ביחידות kg/mol

אנ' קינטית של מולקולת גז: E_k = (3/2) K_B T = (1/2) mV^2 K_B = R / N_A

מהירות ממוצעת: V_RMS = sqrt(3RT / Mw_mole) = sqrt(3K_B T / m_molecule)

דיפוזיה: שטף מולקולות מלחץ גבוה ללחץ נמוך (או מריכוז גבוה לנמוך).
אפוזיה: מעבר גז דרך חריר קטן. חוק גרהם: בטמפרטורה ולחץ קבועים מהירויות אפוזיה משתנות ביחס הפוך לשורש הצפיפות/המשקלים.

V_1/V_2 = sqrt(Mw_2/Mw_1) = sqrt(d_2/d_1)

לכן ל-2 גזים באותם תנאי לחץ וטמפרטורה, E_k שווה.

הומצות ובסיסים

הומצה: חומר שתורם פרוטונים H+.
הומצה חזקה: תגובת הפירוק שלה תלך עד הסוף HA -> H+ + A-
הומצה חלשה: תגובת הפירוק שלה היא B- + H2O <=> BH + OH-
תגובת ש"מ: HA <=> H+ + A-
צורת כתיבה נוספת (עם מים): HA + H2O <=> A- + H3O+

קבוע הקישור של הבסיס: K_b = [BH][OH-] / [B-]
כל שגדול יותר, כך הבסיס חזק יותר.
יוניציצה של מים: מים הם חומר אמפוטרי מתנהגים גם כחומצה וגם כבסיס
H2O <=> H+ + OH- K_w = [H+][OH-]

קבוע פירוק החומצה: K_a = [H+][A-] / [HA]
כל שגדול יותר, החומצה חזקה יותר.
תגובת סתירה: pKa = -log(Ka)

תגובה בין חומצה לבסיס - מלח ומים.
תגובה בין חומצה לחומצה: Ka * Kb = Kw
pKa + pKb = 14

K_w(25C) = 10^-14
[H+] = [OH-] = 10^-7 M
pH = -log[H+]
pOH = -log[OH-]
pH + pOH = 14

הומצה פוליפרופטית: מכילה יותר מפרוטון אחד. מתפרקת בשלבים, לכל שלב קבוע פירוק. Ka1 > Ka2 > Ka3

תרמוכימיה

חוק שימור אנרגיה: Delta E = Q + W
חום: Q > 0 החום נקלט ע"י המערכת
W > 0 עבודה. W < 0 מבוצעת ע"י הסביבה. E- אנרגיה פנימית (פוטנציאלית).

עבודת נפח (התפשטות נפחית): W = -PDelta V
Delta V = V2 - V1

פונק' מצב - תכונה שתלויה רק במצב המערכת ולא בדרך ההגעה למצב. אנרגיה פנימית היא פונק' מצב.

H-אנטלפיה: האנרגיה הכוללת של המערכת H = E + PV

בלחץ קבוע: Delta H = Delta E + Delta(PV)
Delta(PV) = Delta(nRT)
Delta H = Qp

בלחץ קבוע העבודה היא 0: Delta E = Qv
תגובה אנדותרמית: המערכת קולטת חום.
תגובה אקסותרמית: המערכת פולטת חום.

C = קיבול חום: כמות החום הדרושה להעלאת טמפ' של 1 מול ב-1C.

בלחץ קבוע: Cp = dQp/dT = Delta H/dT
בלחץ קבוע: Cv = dQv/dT = Delta E/dT

להכפיל Cp/PV ב-n מספר המולים. Q = integral Cp/PV dT

חום סגולי: כמות החום הנדרשת להעלאת טמפ' של 1 גר' חומר ב-1C.
מצב סטנדרטי: P = 1 atm. מצב הצבירה תלוי בטמפרטורת התגובה.

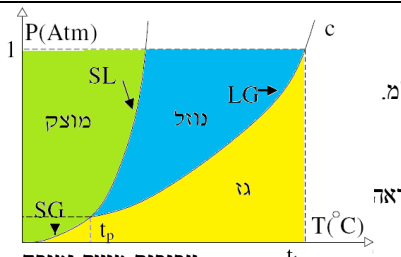
עבור תערובת גזים: מוגדר כשהלחץ החלקי של כל רכיב הוא 1 atm. סימון <=
אנטלפיה היווצרות (חום היווצרות): האנטלפיה הנקלטת או משתחררת מהיווצרות מול אחד של חומר מהיסודות במצבם הסטנדרטי <= חום היווצרות של יסוד

חום תגובה: Delta H_tot = Delta H_f(products) - Delta H_f(reactors)

חוק הס: ניתן לפרק תגובה למספר שלבים עבורם Delta H ידוע. ניתן לכפול בקבוע ואם הופכים את כיוון התגובה, נהפך סימן Delta H. ואז סכומם הוא Delta H של הכל.

Hm - חום ההיתוך. עבור מים: Hm = Delta H(0C(s) -> 0C(l))

נוזלים מציקים ודיאגרמת פאזות



דיאגרמת פאזות

tp הנקודה המשולשת - 3 הפאזות בש"מ.
קו LG עקומת לחץ האדים של הנוזל
קו SL עקומת נקודת ההיתוך
קו SG עקומת לחץ אדים של מוצק-המראה
tb נקודת הרתיחה הנורמאלית - טמפ' המעבר בין נוזל לגז בלחץ 1 atm.

C הנקודה הקריטית - בטמפ' גבוהה יותר - קיים רק כגז.
נקודת סובלימציה: נקודה על SG מתחת לנקודה המשולשת.
נקודת רתיחה: טמפ' בה לחץ האדים מעל הנוזל שווה ללחץ החיצוני (נוזל -> גז)
נקודת היתוך נורמאלית: על עקומה SL ב-1 atm. לחץ האדים והטמפ':

ln p1/p2 = Delta Hv/R (1/T2 - 1/T1)
ln p = -Delta Hv/RT + c

Delta Hv - חום האיידוי/נידוף - האנרגיה הדרושה כדי לנדף מול אחד של גז.
מוצקים:

Diagrams and formulas for SC, BCC, and FCC crystal structures, including unit cell dimensions (a, b, c), number of atoms, and volume calculations (V_ball = 4/3 * pi * r^3).