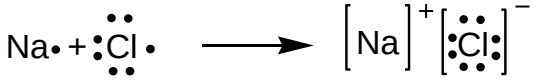
יסודות הכימיה 124114

תרגיל מס' 7 – הקשר הכימי

קשר יוני

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



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

יינון של M: $\Delta E = Ei > 0$ $\quad 1)\ M \rightarrow M^+ + e^-$

אפיניות אלקטרונית של: $\Delta E = Ea < 0$ $\quad 2)\ X + e^- \rightarrow X^-$

משיכה אלקטרוסטטית בין מטענים מנוגדים: $\Delta E = \frac{kq_1q_2}{r}$ $\quad 3)\ M^+ + X^- \rightarrow [M^+][X^-]$

ביחידות eV:

$$E = \frac{kq_1q_2}{r} = \frac{14.4[eV \cdot \mathring{A}] \times q_c \times q_a}{r_c[\mathring{A}] + r_a[\mathring{A}]}$$

כאשר:

q_c - מספר המטענים החיוביים של הקטיון.

q_a - מספר המטענים השליליים של האניון.

$r_c[\mathring{A}]$ - רדיוס יוני של הקטיון ב- Å.

$r_a[\mathring{A}]$ - רדיוס יוני של האניון ב- Å.

סה"כ: $\Delta E = Ei + Ea + \frac{kq_1q_2}{r}$ $\quad M + X \rightarrow [M^+][X^-]$

יש להקפיד שהתוצר $[M^+][X^-]$ יהיה מאוזן מבחינה חשמלית: Na^+Cl^-.

קשר קוולנטי:

קשר בו שני אטומים חולקים בשני אלקטרונים משותפים או יותר ע"מ להשלים את קליפת הערכיות של שניהם.

לדוגמה: F_2. את זוג אלקטרוני הקשר מסמנים ב- בקו: F—F.

אלקטרושליליות:

מבטאת את היכולת של האטום למשוך כלפיו את אלקטרוני הקשר המשתתפים. ערך האלקטרושליליות אינו גודל מדיד אלה נגזר מחישובים מתמטיים. סקלת הערכים נעה מ- 4 (עבור פלואור) ועד ל- 0. ככל שערך האלקטרושליליות גבוה יותר כך האטום מושך אליו יותר את אלקטרוני הקשר.

האלקטרושליליות עולה עם ההתקדמות ימינה בטבלה המחזורית, ויורדת לאורך הטורים. כאשר ההפרש באלקטרושליליות בין האטומים גדול מ- 1.8 יווצר קשר יוני.

מומנט דיפול:

(μ [Debye]) מדד למידת קוטביות (פולריות) הקשר. מומנט דיפול נוצר כאשר אחד האטומים בקשר יותר אלקטרושלילי. מומנט דיפול הוא ערך מדיד.

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

כאשר:

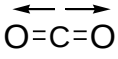
μ - מומנט דיפול $1D = 10^{-18} esu \cdot cm = 10^{-10} esu \cdot \mathring{A} = 3.34 \cdot 10^{-30} C \cdot m$

δ - עודף מטען של אטום אחד ביחס לשני. $1C = 3 \cdot 10^{9} esu$.

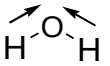
מטען אלקטרון: $q_e = 1.602 \cdot 10^{-19} C = 4.8032 \cdot 10^{-10} esu$

d - המרחק בין האטומים $1\text{Å} = 10^{-8} cm \; 1\mathring{A} = 10^{-8} cm = 10^{-10} m$

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



μ=0



μ≠0

קשר קוולנטי קוטבי:

קשר קוולנטי בין אטומים בעלי ערכי אלקטרושליליות שונים, כך שאלקטרוני הקשר מוסטים לעבר האטום היותר אלקטרושלילי.

מולקולה קוטבית (פולרית) היא מולקולה בה השקול הכולל של מומנט דיפול שונה מאפס.

אחוז האופי היוני:

בקשר יוני מתרחש מעבר אלקטרון מלא, כאשר הקשר הוא בין קשר יוני טהור לבין קשר קוולנטי טהור, ניתן להגדיר את אחוז האופי היוני:

$$\%\ \text{יוני קשר} = \frac{\delta}{q_e} \times 100 = \frac{\mu_m}{q_e \times d} \times 100$$

כאשר:

μ_m - מומנט דיפול מדוד.

$q_e = 1.602 \cdot 10^{-19} C$ - מטען אלקטרון.

d - המרחק בין האטומים $1\text{Å} = 10^{-8} cm \; 1\mathring{A} = 10^{-8} cm = 10^{-10} m$

ביחידות esu:

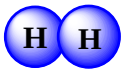
$$\%\ \text{יוני קשר} = \frac{\mu_m[esu \cdot cm]}{4.8 \cdot 10^{-10}[esu] \times d[cm]} \times 100$$

או ביחידות של Debye:

$$\%\ \text{יוני קשר} = \frac{\mu_m[D]}{4.8\left[D/\mathring{A}\right] \times d[\mathring{A}]} \times 100$$

<u>קשר קוולנטי יחיד כפול ומשולש:</u>

<u>קשר σ</u> – קשר בו צפיפות האלקטרונים הגבוהה ביותר היא בין הגרעינים. יכול להיווצר ע"י חפיפה בין האורביטלים האטומים הבאים:

שני אורביטלי s	
אורביטל s ואורביטל p	
שני אורביטלי p	

וגם בין אורביטלים היברידים.

קשר π – קשר בו צפיפות האלקטרונים הגבוהה ביותר היא מעל ומתחת למישור העובר בין הגרעינים. מתקבל בין אורביטלי p.

קשר כפול- מורכב מ-4 אלקטרונים ומסומן בשני קווים מקבילים, לדוגמה במולקולה O_2:

$$O=O$$

קשר משולש- מורכב מ-6 אלקטרונים ומסומן בשלושה קווים מקבילים, לדוגמה במולקולה N_2:

$$N\equiv N$$

קשר בודד = σ

קשר כפול = $\pi + \sigma$

קשר משולש = $\pi + \pi + \sigma$