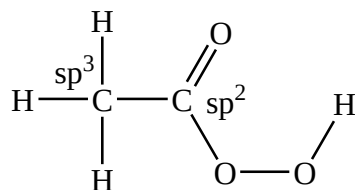


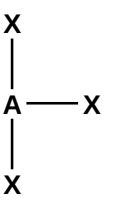
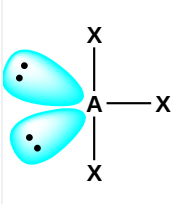
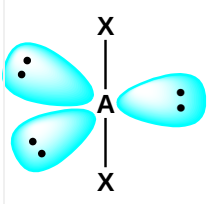
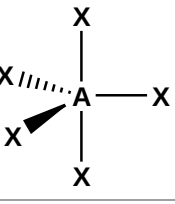
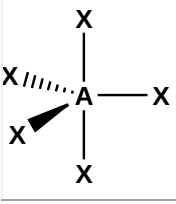
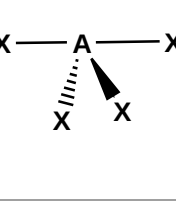
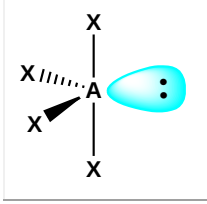
יסודות הכימיה 124114 (2010)
פתרון תרגיל בית מס' 9: היברידיזציה ו- M.O.

1. מבנה המולקולה:

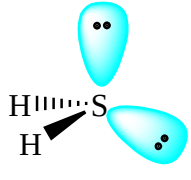
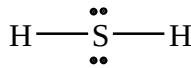


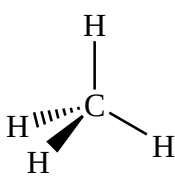
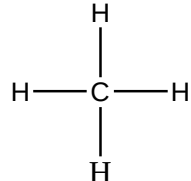
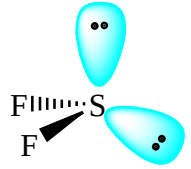
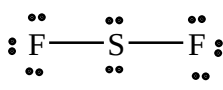
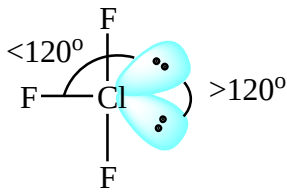
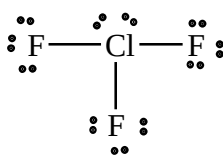
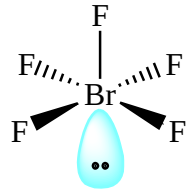
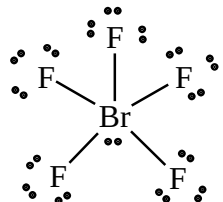
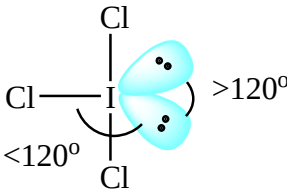
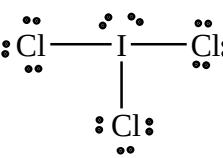
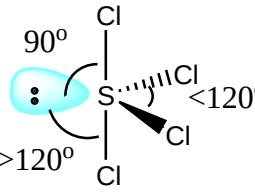
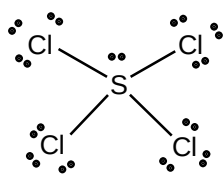
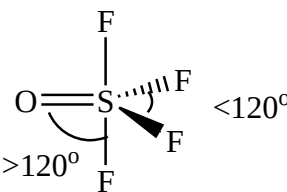
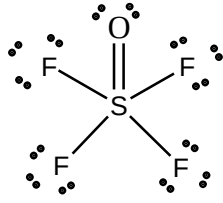
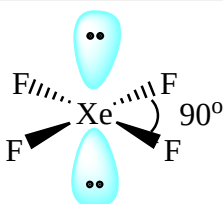
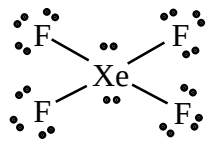
אורביטל ההברידי sp^3 של הפחמן הראשון חופף ליצירת קשר σ עם האורביטל ההברידי sp^2 של הפחמן השני לכן, sp^3-sp^2 .

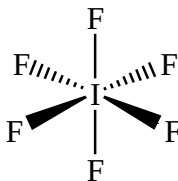
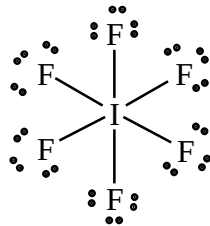
2. ד"י אוקטהדרלית – ע"מ ליצור אוקטהדר יש לערבב שישה אורביטלים אטומים לקבלת שישה אורביטלים הברידיים מסוג sp^3d^2 . בהיברידיזציה של sp^3d^2 עורבבו חמישה אורביטלים אטומים ($s, p_x, p_y, p_z, d_{z^2}$) לקבלת חמישה אורביטלי sp^3d^2 הברידיים. כל שאר המבנים ניתן לקבל בהיברידיזציה sp^3d :

		צורת T			לינארי
		ביפירמידה טריגונואלית			נדנדה

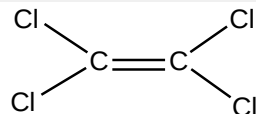
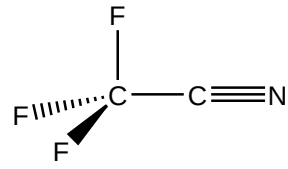
3.

הכלאת אטום מרכזי	גיאומטריה	VSEPR	מבנה לואיס	
sp	קווי	$N \equiv N$	$:N \equiv N:$	N_2
sp^3	זוויתי			H_2S

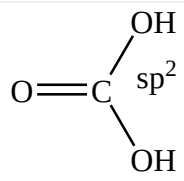
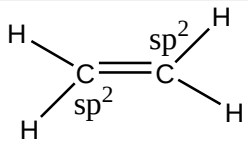
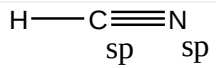
sp^3	טטראדר			CH_4
sp^3	זוויתי			SF_2
sp^3d	צורת T			ClF_3
sp^3d^2	פירמידה מרובעת			BrF_5
sp^3d	צורת T			ICl_3
sp^3d	צורת נדנדה			SCl_4
sp^3d	בי פירמידה משולשת			SOF_4
sp^3d^2	ריבוע מישורי			XeF_4

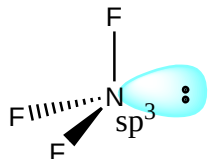
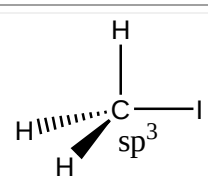
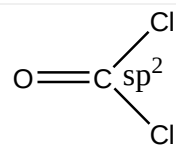
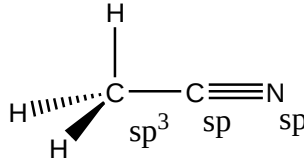
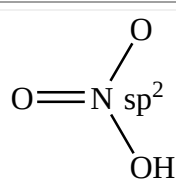
sp^3d^2	אוקטאדר			IF_6^+
-----------	---------	---	---	----------

4.

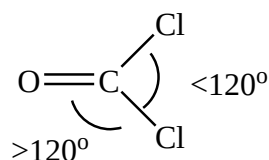
המולקולה:	ציור	ליניארית	מישורית
CCl_2CCl_2		לא	כן
$NCCN$	$N \equiv C - C \equiv N$	כן	כן
F_3CCN		לא	לא
SCN^-	$[S - C \equiv N]^-$	כן	כן

5.

המולקולה:	ציור והברידיזציה	מבנה מרחבי	מומנט דיפול
H_2CO_3		מסביב לפחמן – משולש מישורי המימנים לא נמצאים במישור המשולש	$\mu \neq 0$
CH_2CH_2		מישורית	$\mu = 0$
HCN		קווית	$\mu \neq 0$

המולקולה:	ציור והברידיזציה	מבנה מרחבי	מומנט דיפול
NF_3		פירמידה משולשת	$\mu \neq 0$
CH_3I		טטראדר מעוות	$\mu \neq 0$
COCl_2		משולש מישורי מעוות	$\mu \neq 0$
CH_3CN		טטראדר מעוות	$\mu \neq 0$
HNO_3		מסביב לחנקן – משולש מישורי המימן לא נמצא במישור המשולש	$\mu \neq 0$

6. ה' - קטנה במעט מ- 120° .

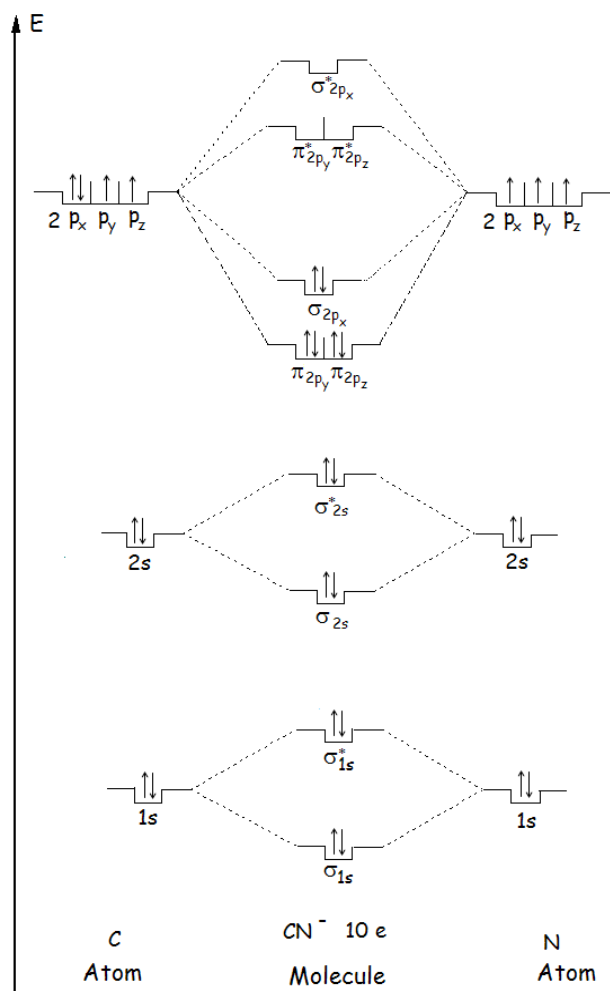


מבנה המולקולה:

הקשר בין הפחמן לחמצן הוא קשר כפול המורכב מ- 4 אלקטרונים שגורמים לדחייה גדולה יותר ביחס לשני אלקטרוני הקשר בקשר פחמן- כלור ולכן הזווית Cl-C-Cl קטנה יותר מ- 120° .

7. ה'- HCCH המבנים:

המולקולה:	ציור והברידיזציה
H_2CCH_2	
F_2CCl_2	
CF_4	
H_2CO	
HCCH	



8. להלן תרשים רמות האנרגיה עבור CN^- בשיטת האורביטלים המולקולריים.

לפחמן 4 אלקטרוני ערכיות ולחנקן - 5 ובנוסף קיים אלקטרון נוסף מהמטען של היון $\leftarrow$ יש לאכלס את הרמות ב- 10 אלקטרונים.

$$\text{CN}^-: (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\pi_{2p})^4 (\sigma_{2p})^2$$

$$\text{סדר הקשר: } B.O = \frac{8-2}{2} = 3$$

בין הפחמן לחנקן יש קשר משולש: $\text{C} \equiv \text{N}^-$
כל האלקטרוניים מזווגים מכאן שהיון הינו דיאמגנטי

9.

	OF ⁺ (16e ⁻)	OF (17e ⁻)	OF ⁻ (18e ⁻)
σ_{2p}^*			
π_{2p}^*	↑ ↑	↓↑ ↑	↑↓ ↑↓
π_{2p}	↑↓ ↑↓	↑↓ ↑↓	↑↓ ↑↓
σ_{2p}	↑↓	↑↓	↑↓
σ_{2s}^*	↑↓	↑↓	↑↓
σ_{2s}	↑↓	↑↓	↑↓
σ_{1s}^*	↑↓	↑↓	↑↓
σ_{1s}	↑↓	↑↓	↑↓
BO =	$\frac{6-2}{2} = 2$	$\frac{6-3}{2} = 1.5$	$\frac{6-4}{2} = 1$

לפי סדר הקשר ניתן לראות כי ב- OF⁺ - הקשר החזק ביותר ולכן אנרגיית הקשר הגבוהה ביותר ואילו ב- OF⁻ סדר הקשר הנמוך ביותר ולכן אנרגיית הקשר הנמוכה ביותר.
 OF⁺ ו-OF הן פאראמגנטיות.

10. א.

	C ₂ ⁺ (11e ⁻)	C ₂ (12e ⁻)
σ_{2p}^*		
π_{2p}^*		
σ_{2p}		
π_{2p}	↑ ↑↓	↓↑ ↑↓
σ_{2s}^*	↑↓	↑↓
σ_{2s}	↑↓	↑↓
σ_{1s}^*	↑↓	↑↓
σ_{1s}	↑↓	↑↓
BO =	$\frac{3-0}{2} = 1.5$	$\frac{4-0}{2} = 2$

ל- C₂ סדר קשר גבוה יותר ולכן - קשר חזק יותר.

ב.

	$F_2^{-2} (20e^-)$	$F_2 (18e^-)$
σ_{2p}^*	$\uparrow\downarrow$	
π_{2p}^*	$\uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow$
π_{2p}	$\uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow$
σ_{2p}	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
σ_{2s}^*	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
σ_{2s}	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
σ_{1s}^*	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
σ_{1s}	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
$BO =$	$\frac{6-6}{2} = 0$	$\frac{6-4}{2} = 1$

ל- F_2 סדר קשר גבוה יותר ולכן הקשר חזק יותר שימו לב – ל- F_2^{-2} סדר קשר 0 – לכן מולקולה כזאת לא קיימת.

$$Li_2 (6e^-) : (\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s})^2 \Rightarrow B.O = \frac{1}{2}(4 - 2) = 1$$

$$N_2 (16e^-) : (\sigma_{1s})^2 (\sigma_{1s}^*)^2 (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\pi_{2p})^4 (\sigma_{2p})^2 \Rightarrow B.O = \frac{1}{2}(10 - 4) = 3$$

$$S_2(32e^-): (\sigma_{3s})^2(\sigma_{3s}^*)^2(\sigma_{3p})^2(\pi_{3p})^4(\pi_{3p}^*)^2 \Rightarrow B.O = \frac{1}{2}(8 - 4) = 2$$

עבור S_2 חישוב סדר הקשר נעשה ע"ס האלקטרונים הוולנטים בלבד, כל האלקטרונים שאינם אלקטרונים וולנטים (צבועים בכחול) מבטלים האחד את השני.

11. נבחן את תרשים האורביטלים המולקולריים של שלושת המולקולות:

	$N_2 (14e^-)$		$O_2 (16e^-)$	$F_2 (18e^-)$
σ_{2p}^*		σ_{2p}^*		
π_{2p}^*		π_{2p}^*	$\uparrow \quad \uparrow$	$\uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow$
σ_{2p}	$\uparrow\downarrow$	π_{2p}	$\uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow$
π_{2p}	$\uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow$	σ_{2p}	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
σ_{2s}^*	$\uparrow\downarrow$	σ_{2s}^*	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
σ_{2s}	$\uparrow\downarrow$	σ_{2s}	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
σ_{1s}^*	$\uparrow\downarrow$	σ_{1s}^*	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
σ_{1s}	$\uparrow\downarrow$	σ_{1s}	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$

	$N_2 (14e^-)$		$O_2 (16e^-)$	$F_2 (18e^-)$
$BO =$	$\frac{6-0}{2} = 3$	$BO =$	$\frac{6-2}{2} = 2$	$\frac{6-4}{2} = 1$

הקשר החזק ביותר הוא של N_2 (סדר קשר – 3) והחלש ביותר של F_2 (סדר קשר 1).

12.

10	$N_2^+ (13e^-)$	$N_2 (14e^-)$	$N_2^- (15e^-)$
σ_{2p}^*			
π_{2p}^*			$\uparrow$
σ_{2p}	$\uparrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
π_{2p}	$\uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow$
σ_{2s}^*	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
σ_{2s}	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
σ_{1s}^*	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
σ_{1s}	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
$BO =$	$\frac{5-0}{2} = 2.5$	$\frac{6-0}{2} = 3$	$\frac{6-1}{2} = 2.5$

$BO(N_2^-) = 2.5 < BO(N_2) = 3$	נכון	אורך הקשר ב- N_2^- גדול מאשר ב- N_2	א.
אנרגיית היוניזציה השנייה תמיד גדולה יותר מאנרגיית היוניזציה הראשונה.	נכון	אנרגיית היוניזציה של N_2^+ גדולה מזו של N_2	ב.
לשניהם אלקטרון אחד בלתי מזווג	נכון	ל- N_2^- ול- N_2^+ מספר שווה של אלקטרונים לא מזווגים	ג.
$BO(N_2^+) = 2.5 < BO(N_2) = 3$	לא נכון	ל- N_2 אנרגיית קשר קטנה יותר מאשר ל- N_2^+	ד.
	נכון.	ל- N_2 סדר הקשר שווה ל-3	ה.

13.

	$\text{CO}^- (15e^-)$	$\text{CO} (14e^-)$	$\text{NO}^- (16e^-)$		$\text{N}_2^{+2} (12e^-)$
σ_{2p}^*				σ_{2p}^*	
π_{2p}^*	↑		↑ ↑	π_{2p}^*	
π_{2p}	↑↓ ↑↓	↑↓ ↑↓	↑↓ ↑↓	σ_{2p}	
σ_{2p}	↑↓	↑↓	↑↓	π_{2p}	↑↓ ↑↓
σ_{2s}^*	↑↓	↑↓	↑↓	σ_{2s}^*	↑↓
σ_{2s}	↑↓	↑↓	↑↓	σ_{2s}	↑↓
σ_{1s}^*	↑↓	↑↓	↑↓	σ_{1s}^*	↑↓
σ_{1s}	↑↓	↑↓	↑↓	σ_{1s}	↑↓

לכן: CO^- - פאראמגנטי, N_2^{+2} - דיאמגנטי, NO^- - פאראמגנטי, CO - דיאמגנטי.