

## המבנה המרחבי של מולקולות

### 1. תורת VSEPR

תורת הדחיה בין זוגות אלקטרוניים. VSEPR -Valence-shell electron-pair repulsion theory

לפי תורה זו יקבע המבנה המרחבי של המולקולה באופן הבא :

1. צייר נוסחת לואיס למולקולה.

2. קבע מהו מספר הכיוונים במרחב סביב האטום המרכזי. כל קשר כימי (יחיד, כפול או משולש)

תופס כיוון אחד. זוג אלקטרוניים בודד תופס גם הוא כיוון אחד.

3. קבעו את המבנה לפי מספר הכיוונים במרחב :

2 כיוונים  $\Leftarrow$  מבנה קוי (זווית  $180^\circ$ ).

3 כיוונים  $\Leftarrow$  מבנה מישורי (זווית  $120^\circ$ ) או זוויתי.

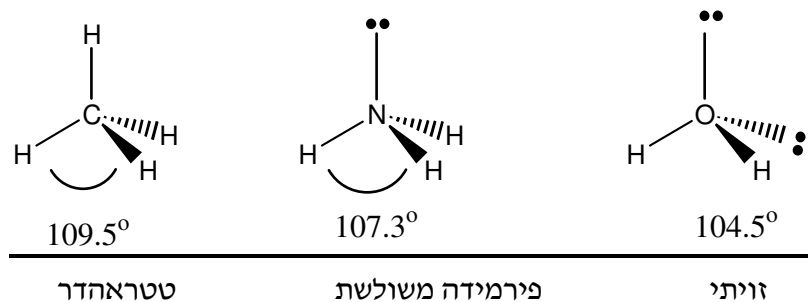
4 כיוונים  $\Leftarrow$  מבנה טטרהדרלי (זווית  $109^\circ$ ), פירמידלי, או זוויתי.

5 כיוונים  $\Leftarrow$  מבנה דופירמידה משולשת, טטרהדרי מעוות, צורת T, או קווי.

4. קבעו מבנה מרחבי סופי של המולקולה לפי הכיוונים שבהם יש קשרים (ולא זוגות בודדים).

### קביעת הזווית בין האטומים :

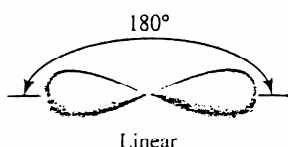
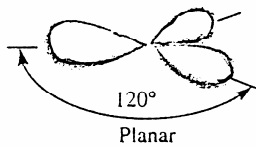
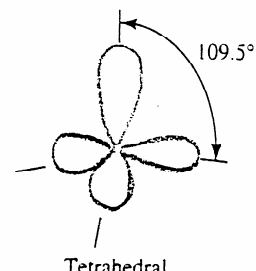
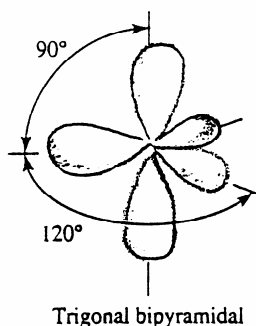
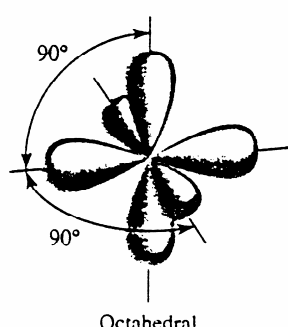
סדר הדחייה בין זוגות אלקטרוניים: קושר-קושר > לא קושר > לא קושר-לא קושר, ולכן נוצר מצב שבו זוג אלקטרוניים לא קושרים "תופסים" יותר נפח מאלקטרוניים הנמצאים בקשר. למשל במקרה של מולקולות בעלות אטום מרכזי בהיברידיזציה  $sp^3$ .

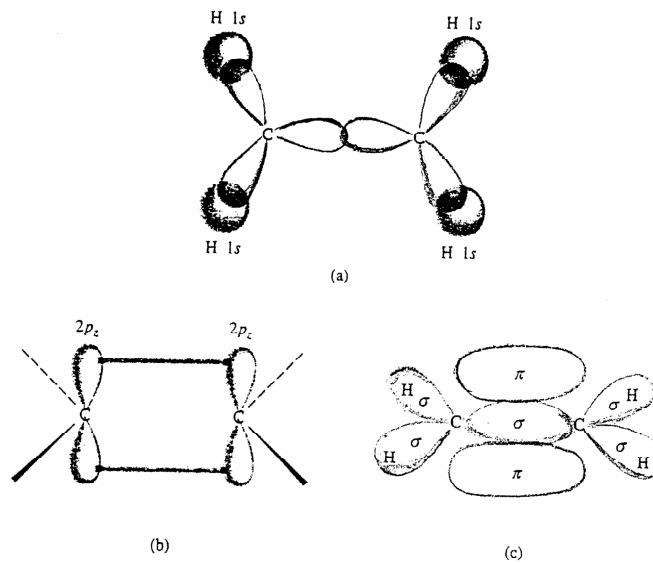


## 2. היברידיזציה (הכלאה)

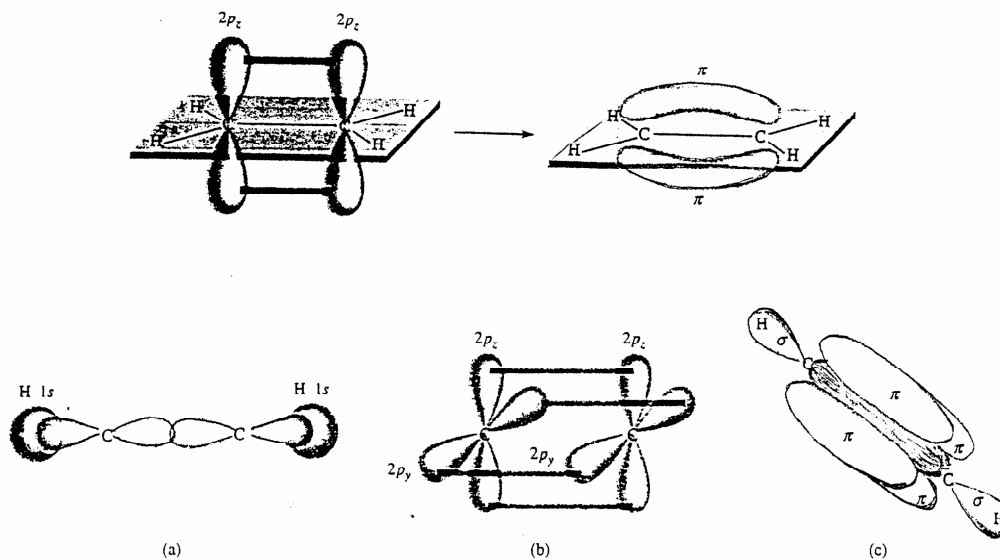
האורביטאלים האטומיים המתאימים (מבחינה מרחבית) של האטומים משתתפים בקשר יתערבבו ויווצרו אורביטאלים מולקולריים שהם הכלאה (היברידיזציה) של האורביטאלים האטומיים. לפי צורתם במרחב של האורביטאלים ההברידיים יקבע גם המבנה המרחבי של המולקולה.

Important hybrid orbitals and their shapes

Pure atomic orbitals of the central atom	Hybridization of the central atom	Number of hybrid orbitals	Shape of hybrid orbitals	Examples
$s, p$	$sp$	2	 <p>Linear</p>	$\text{BeCl}_2$
$s, p, p$	$sp^2$	3	 <p>Planar</p>	$\text{BF}_3$
$s, p, p, p$	$sp^3$	4	 <p>Tetrahedral</p>	$\text{CH}_4, \text{NH}_4^+$
$s, p, p, p, d$	$sp^3d$	5	 <p>Trigonal bipyramidal</p>	$\text{PCl}_5$
$s, p, p, p, d, d$	$sp^3d^2$	6	 <p>Octahedral</p>	$\text{SF}_6$



**Figure 10.16** Bonding in ethylene,  $C_2H_4$ . (a) Top view of the sigma bonds between carbon atoms and between carbon and hydrogen atoms. All the atoms lie in the same plane, making  $C_2H_4$  a planar molecule. (b) Side view showing how overlap of the two  $2p_z$  orbitals on the two carbon atoms takes place, leading to the formation of a pi bond. (c) The sigma bonds and the pi bond in ethylene. Note that the pi bond lies above and below the plane of the molecule.



**Figure 10.19** Bonding in acetylene,  $C_2H_2$ . (a) Top view showing the sigma bonds between carbon atoms and between carbon and hydrogen atoms. All the atoms lie along a straight line; therefore acetylene is a linear molecule. (b) Side view showing the overlap of the two  $2p_z$  orbitals and of the two  $2p_y$  orbitals of the two carbon atoms, which leads to the formation of two pi bonds. (c) Diagram showing both the sigma and the pi bonds.

### כללים ליצירה ואיכלוס של אורביטלים מולקולריים:

- ❖ מספר האורביטלים המולקולריים שנוצרים הוא כמספר האורביטלים האטומיים שיצרו אותם.
- ❖ האורביטלים המולקולריים נוצרים מחיבור וחסור של אורביטלים אטומיים. אורביטל פירושו פונקציית גל: חיבור פירושו התאבכות בונה, כלומר ירידה באנרגיה. חיסור פירושו התאבכות הורסת, כלומר עליה באנרגיה.
- ❖ לאחר יצירת האורביטלים המולקולריים ניתן לאכלסם. אין חשיבות למקור האלקטרון (מאיזה אטום), אלא רק למספר הכלל של האלקטרונים שיש לאכלס.
- ❖ כל אורביטל מולקולרי יכול להכיל רק **2 אלקטרונים** בעלי ספינים הפוכים (עקרון פאולי).
- ❖ סדר מילוי האורביטלים המולקולריים – מהאנרגיה הנמוכה לגבוהה.
- ❖ אם יש אורביטלים מנוונים (בעלי אותה אנרגיה), הם מאוכלסים עפ"י כלל הונד – ז"א כלל האוטובוס – האלקטרונים יכנסו לחוד, בספינים מקבילים, ורק אח"כ יזווגו.
- ❖ אורביטל מולקולרי שהינו סימטרי ביחס לציר הבין-גרעיני נקרא אורביטל  $\sigma$
- ❖ אורביטל מולקולרי שהינו אנטי סימטרי ביחס לציר הבין-גרעיני נקרא אורביטל  $\pi$ .
- ❖ אורביטל הנוצר ע"י התאבכות הורסת (חיסור) נקרא אורביטל אנטי קושר ומסומן בכוכבית -  $\sigma^*, \pi^*$ .
- ❖ אורביטל הנוצר ע"י התאבכות בונה (חיבור) נקרא אורביטל קושר ומסומן -  $\sigma, \pi$ .
- ❖ אורביטל שאינו עובר שום אינטרקציה עם אורביטל נוסף נקרא לא קושר - n.b.

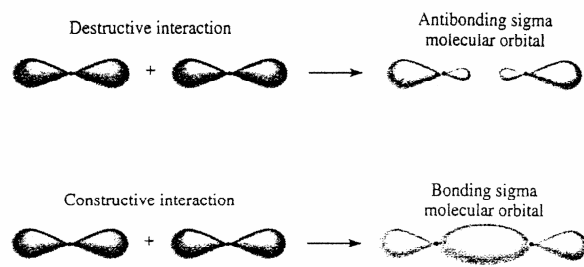
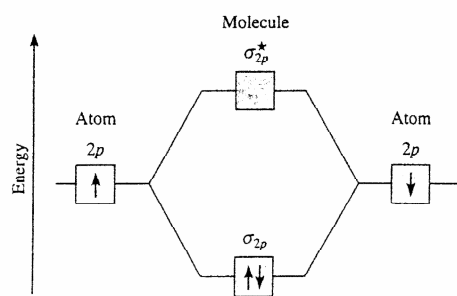
סדר הקשר, B.O (bond order):

מדד לחוזק הקשר נתון ע"י:

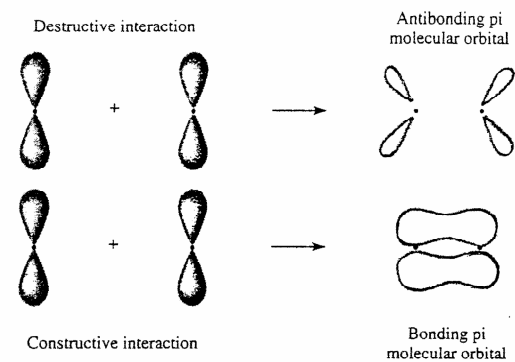
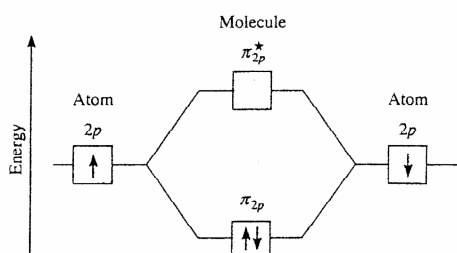
$$B.O = 0.5 \text{ (מספר אלקטרונים אנטי קושרים – מספר אלקטרונים קושרים)}$$

ככל ש-B.O גדול יותר, הקשר חזק יותר וקצר יותר.

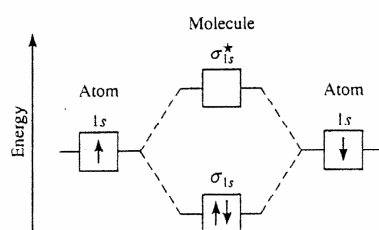
### בניית האורביטלים המולקולריים:



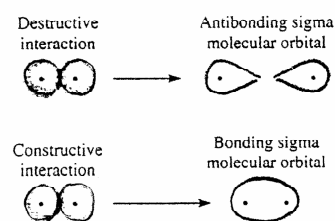
(a)



(b)



(a)



(b)

דיאגרמת קורלציה ע"פ שיטת MO:

