

ספקטרום אטומי מודל בוהר

המבנה האלקטרוני של האטום

המבנה של האלקטרון באורביטל מסוים, מאופיין ע"י סדרה של 4 פרמטרים: מספרים הנובעים מפתרון פונקציית הגל:
1- מספר קוונטי ראשי, מתאר את הרמה האנרגטית שבה נמצא האלקטרון. מאפיין את הגודל האפקטיבי של האורביטל סביב הגרעין. יכול לקבל ערכים שלמים חיוביים.
2- מספר קוונטי זוויתי, יכול לקבל ערכים שלמים חיוביים.
3- מספר קוונטי מגנטי, יכול לקבל ערכים שלמים חיוביים.
4- מספר קוונטי ספין, יכול לקבל ערכים שלמים חיוביים.

האפקט הפוטו אלקטרי

E = E0 + 1/2 MV^2
E = E0 + Ek
האנרגיה הקינטית של הפוטואלקטרונים = 1/2 mv^2
פונקציית המעטה: אנרגיית הסף הדרושה לשחרור אלקטרון (נקראת גם פא) או אנרגיית יוניזציה

מודל האטום של בוהר - עבור אטום מימן ואטומים דמויי מימן

האנרגיה שנקבלת בתהליך: E = K + q1q2 / r
n = 1, 2, 3, ...
מציבים מעוררים: n = 2, 3, 4, ...
רדיוס הרמה ה-n: rn = n^2 * a0
קבוע קלווין: K = 8.98 * 10^9 Nm^2/c^2
מסת האלקטרון: m = 9.1 * 10^-31 Kg
מטען האלקטרון: e = 1.6 * 10^-19 c
אנרגיית הרמה ה-n: En = -RH * Z^2 / n^2
RH = 2.18 * 10^-18 Jaule = 2.18 * 10^-11 erg = 109678 cm^-1 = 3.29 * 10^15 sec^-1 = 13.6 eV

גלים וקרנייה

E = hv = hc / lambda
h = 6.626 * 10^-27 erg-sec = 6.626 * 10^-34 J-sec
C = 3 * 10^10 cm/sec = 3 * 10^8 m/sec
v = c / lambda (sec^-1)
lambda = c / v (m)
v = lambda / T (1/m)

הפרש אנרגיה בין שתי רמות-משוואת רידברג

i = initial; f = final
AE = hf = E_f - E_i = RH * z^2 * (1/n_i^2 - 1/n_f^2)

תדירות המעבר

v = AE / h = RH * z^2 * (1/n_i^2 - 1/n_f^2)

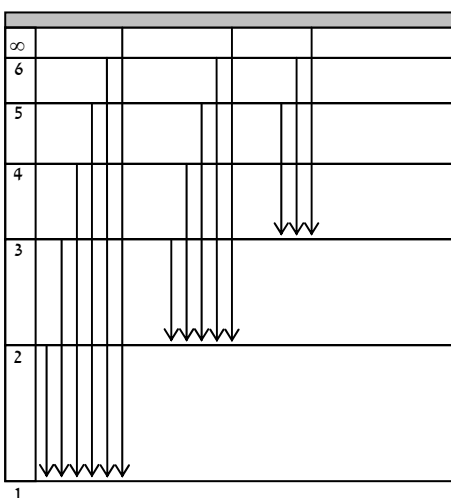
אנרגיית יוניזציה

E_i = RH * z^2 * (1/n_i^2 - 1/inf^2) = RH * z^2 / n_i^2 (אינסוף = 0)

אורך גל דה-ברולי

lambda = h / p = h / (m * v)
me - מסת האלקטרון
v - מהירות
E = E_i + E_k
קינטיק
אינרטי

רמות האנרגיה באטום מימן וסדרות הפליטה השונות:



הסדרה: Lyman Balmer Paschen

Table with columns for Lyman, Balmer, Paschen series, listing initial and final quantum numbers (ni, nf) and corresponding spectral lines (H-alpha, H-beta, etc.).

חלקיק בתיבה חד מימדית

v = 0
x = 0
x = L
v = inf
מציבים מעוררים: En = n^2 * h^2 / 8mL^2
AE = E_f - E_i = h^2 / 8mL^2 * (n_f^2 - n_i^2)

1) M -> M^+ + e^- AE = E_i > 0
2) M^+ + e^- -> M^- AE = E_k < 0
3) M^+ + X^- -> [M^+ // X^-] AE = (kq1q2) / r
M^+ + X^- -> [M^+ // X^-] AE = E_i + E_k + (kq1q2) / r

הקשר הכימי

144 * eV / r = (kq1q2) / r = (4 * pi * epsilon_0) * (q1q2) / r^2

מומנט דיפול

mu = q * d
delta - הפרק בין האטומים
X - Y

אחוז האופיי הנייני: קשר יוני מעבר האלקטרון מלא, ומומנט דיפול: כאשר הקשר הוא בין קשר יוני טהור לבין קשר קוולנטי טהור, מגדירים את אחוז האופיי הנייני: מומנט דיפול המדומ (esu-cm)
% האופיי הנייני = d(cm) * 4.8 * 10^-10 / (esu-cm)
קשר קוואזינייני: קשר הנוצר כאשר אטום אחד תורם 2 אלקטרונים לשותף

גזים

שקרון אבוגדרו: בתנאי לחץ וטמפרטורה שווים, נפחים שווים של גזים מכילים אותו מספר מולקולות.
משוואת המצב של הגזים האידיאליים: PV = nRT
משוואת המצב של הגזים האידיאליים: P = rho * R * T
צורת נוספת למשוואת הגזים: Ptot = P1 + P2 + P3 + ...

גזים לא אידיאליים - משוואת ואן דר ולס:

(P + a/V^2)(V - nb) = nRT
א - קבוע הפרופורציה המביע את הסטייה מאידיאליות (עוצמת כוחות המשיכה בין המולקולות).
b - נפח אפקטיבי של מול חומר (קשור למומנט דיפול).
n - הנפח התפוס ע"י המולקולות עצמן, נקרא הנפח האסור.
התורה הקינטית של הגזים:
חוק בוייל: בטמפרטורה נמוכה ובלחץ קבועים, מהירויות הדיפוזיה של גזים שונים משתנות ביחס הפוך לטורח הריבועי של הצפיפות או המשקלים המולקולריים:
V1/V2 = sqrt(d2/d1) = sqrt(M2/M1)
לשני גזים באותם תנאי לחץ וטמפרטורה אנרגיה קינטית שווה:
1/2 * m1 * v1^2 = 1/2 * m2 * v2^2 (P, T const)
האנרגיה הקינטית של מול אחד של גזים:
1/2 * MV^2 = 3/2 * RT
האנרגיה הקינטית של מולקולה אחד של גז:
1/2 * mv^2 = 3/2 * E_k
קבוע בולצמן: K_B = R / N_A
מהירות הממוצעת: V = sqrt(3RT/M) = sqrt(3K_B T / m)

קשרים בין אטומים

Table showing bond angles for various molecules: 109.5 degrees for tetrahedral, 180 degrees for linear, etc.

m = a^3 * rho * N_A
6.02 * 10^23
מסת יחידה
אורך צלע תא יחידה
צפיפות

נעשה ע"י יניב טננבאום וז'אנה פרליץ

מוצקים - תגובות פאזות**משוואת קלאוזיוס-קלפירון**

בניול מתקיים שוויון-משקל (שי"מ) בין המולקולות הנמצאות בתוך הנוזל לבין מולקולות בעלות אנרגיה קינטית מספיק גבוהה, אשר ברחוק מהנוזל.

קבוצת הרתיחה הגורמלת - הטמפרטורה בה מתקיים שי"מ בין הנוזל לאדיו, בלחץ של 1 אטמוספירה.

באופן כללי - נקודת הרתיחה היא הטמפרטורה בה לחץ האדים מעל הנוזל שווה ללחץ החיצוני.

ככל שהטמפרטורה עולה, עולה שבר המולקולות בעלות אנרגיה קינטית מספיק גבוהה כדי לברוח מהנוזל, ולכן עולה גם לחץ האדים.

התלות בין לחץ האדים לבין הטמפרטורה נתונה ע"י המשוואה הבאה:

$$\ln p = - \frac{\Delta H_v}{RT} + C$$

ΔH_v - חום האידוי - האנרגיה הדרושה כדי לנדרף מול אחד של נוזל.
R - קבוע הגזים - $R = 8.314 \text{ J/mole}^\circ\text{K} = 1.98 \text{ cal/mole}^\circ\text{K}$
C - קבוע האופייני לכל נוזל.
P - לחץ
ניתן לבטל את הקבוע ע"י החסרת שתי משוואות עבור שתי נקודות לחץ וטמפרטורה.

$$\ln \frac{p_1}{p_2} = \frac{\Delta H_v}{R} \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)$$

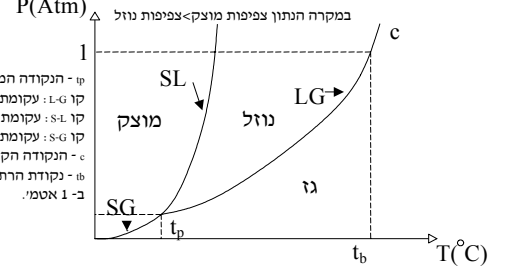
באותה צורה ניתן להתייחס למעברי פאזה אחרים: מוצק - נוזל, מוצק - גז. השינוי יהיה בערכו של ΔH , כשבכל פעם יתייחס למעבר אחר. לדוגמא:

חישוב ΔV : $\Delta V = \frac{V(\text{mol})}{V(\text{cm}^3)} \cdot \frac{m(\text{g})}{M(\text{g/mol})}$

ΔH_m - עבור התכה - מעבר פאזה נוזל - מוצק.
 ΔH_s - עבור המראה (סובלימציה) מעבר פאזה מוצק - גז.

דיאגרמת פאזות:

דיאגרמה המתארת את היחסים ההדדיים ואת תנאי שי"מ בין הצורות השונות (הפאזות של חומר כלשהו), כתלות בלחץ ובטמפרטורה.



במקרה הנתון צפיפות מוצק < צפיפות נוזל
ק - הנקודה המשולשת - 3 פאזות נמצאות בשי"מ.
ק1 - L-G: עקומת לחץ האדים של נוזל (שי"מ נוזל עם אדיון).
ק2 - S-L: עקומת נקודת ההיתוך (שי"מ מוצק עם נוזל).
ק3 - S-G: עקומת לחץ האדים של מוצק (שי"מ מוצק עם אדיון).
c - הנקודה הקריטית - מעליה החומר קיים רק במצב גז.
b - נקודת הרתיחה הגורמלת - טמפרטורת המעבר בין נוזל לגז ב-1 אטמ'.
a - נקודת היתוך.

החוק הראשון של התרמודינמיקה:

$$\Delta E = q + w$$

E - אנרגיה פנימית: אנרגיה של תנועות וירבציה של אטומים, אנרגיה קינטית של מולקולות ואנרגיה פוטנציאלית האנרגיה בקשרים כימיים.

q - חום: החום הנקלט או הנפלג ע"י המערכת ($q > 0$) - החום נקלט ע"י המערכת מהסביבה).

w - עבודה: עבודה מוגדרת ככח שמופעל לאורך דרך ($w > 0$) - העבודה מתבצעת על המערכת ע"י הסביבה).

$$w = -P\Delta V$$

$$H = \Delta E + PV$$

$$\Delta H = \Delta E + \Delta(PV)$$

$$\Delta H = \Delta E + \Delta H_v$$

c - קיבול חום: כמות החום הדרושה כדי להעלות את הטמפרטורה של 1 מול חומר ב-1°C.

$$C_p = \frac{dq_p}{dT} = \frac{\Delta H}{\Delta T}$$

$$C_v = \frac{dq_v}{dT} = \frac{\Delta E}{\Delta T}$$

חום סגולי: כמות החום הדרושה כדי להעלות את הטמפרטורה של 1 גרם חומר ב-1°C.

מצב סטנדרטי (עבור חומר טהור): 1. לחץ של 1 אטמ'.

2. מצב הצבירה בו נמצא החומר ב-1 אטמ' בטמפרטורה הנידונה במקרה הספציפי (לכל חומר).

עבור **עורבות גזים** המצב הסטנדרטי הוא כאשר החלקיק של כל אחד ממרכיבי התערובת הוא 1 אטמ'.

הכונות של מצב סטנדרטי מסומנים ב-: ΔH° , ΔG° , ΔS° .

אנטלפיה היוצרות (חום היוצרות): האנטלפיה הנקלטת ומשתחררת כתוצאה מהווצרות מול אחד של חומר מהיסודות במצבם הסטנדרטי.

חום היוצרות של יסוד מוגדר כאפס.

חוקי הטו: אנטלפיה היוצרות בקובע אינה תלויה בדרך או במספר השלבים:

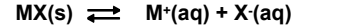
$$\Delta H_{\text{total}} = \Delta H_f$$

התגובה אקסותרמית - תגובה שבה נפלגת אנרגיה לסביבה, $\Delta H < 0$.

התגובה אנדותרמית - תגובה שבה נקלטת אנרגיה מהסביבה, $\Delta H > 0$.

מלחים קשי-חמצן

אלו מלחים בעלי מסיסות מוגבלת במים, היוצרים מערכת שיוויון משקל מהצורה הבאה:



מכפלת המסיסות מוגדרת כך: $K_{sp} = [M^+][X^-]$, והיא למעשה ערך גבולי: השיוויון מתקיים בתמיסה רוויה, שבה לא ניתן להמיס יותר את המלח MX,

ואילו בתמיסה בלתי רוויה מתקיים: $[M^+][X^-] < K_{sp}$.

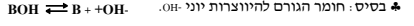
לעולם לא ייתכן מצב שבו $[M^+][X^-] > K_{sp}$.

המסיסות מוגדרת ככמות החומר שאפשר להמיס בתמיסה נתונה.

חומצות וביסיות:



חומצה: חומר הגורם להיווצרות יוני H+.



ביסית: חומר הגורם להיווצרות יוני OH-.



תגובת סתירה: תגובה בין חומצה וביסית, לקבלת מלח ומים.

אלקטרולית: חומר שמתפרק בתמיסה ליונים.

חומציות וביסיות: מושג ה-pH.

$$\text{pH} = -\log[\text{H}^+]$$

$$\text{pOH} = -\log[\text{OH}^-]$$

$$\text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}^+ + \text{OH}^-$$

$$K_w = -\log K_w = 14$$

$$K_w = [\text{H}^+][\text{OH}^-] = 10^{-14}$$

$$\text{pH} + \text{pOH} = \text{pKw} = 14$$

$$\text{pH} > 7 \rightarrow \text{ביסית, } \text{pH} < 7 \rightarrow \text{חומצי}$$

מוצקים - תגובות פאזות
מוצקים מובדלים מנוזלים וגזים בהם נפח וצורה מוגדרים. למוצק יש קשיחות ויחידת מבנה.

מבנה גבישי - הערכות גאומטריות מוגדרת האופיינית לחומר. הערכות זו חוזרת על עצמה במחזוריות קבועה בשלשון מימדים, תוך יצירת חומר בעל סדר ארוך טווח.

מוצקים אמורפים - מוצקים שאין להם סדר קבוע (זכוכית, אספלט).

תא היחידה - היחידה הקטנה ביותר החוזרת על עצמה בגביש ובעלת סימטריה אופיינית בשלושה צירים a, b, c. יחידות אלה חוזרות על עצמן ויוצרות את **השינוי הגבישי** תנאיטס ל-3 דוגמאות של תאי יחידה:

SC - קוביה פשוטה

8 אטומים יוצרים את תא היחידה, אבל כאשר הוא חוזר על עצמו במבנה הסריג כל אטום מתחלק בין 8 תאי יחידה, כך שתרומת כל אטום לתא היחידה הוא 1/8. לקוביה 8 נקודות כאלה, כך שבסה"כ מספר האטומים בתא היחידה יהיה: $1 + 8 \cdot 1/8 = 8$

BCC - קובי ממורכז גוף

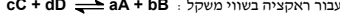
מספר האטומים בתא היחידה יהיה 2. 1 כמו במקרה של קובי פשוט, ועוד אחד מהאטום המרכזי השייך רק לתא הזה. $2 = 1 + 8 \cdot 1/8$

FCC - קובי ממורכז פאה

מספר האטומים בתא היחידה יהיה 4. כל אטום במרכז פאה מחולק בין שני תאים: $4 = 1/2 \cdot 6 + 4 \cdot 1/8$

טבלת מיון המוצקים:

יוני	אטומי	מולקולרי	מתכתי	מחזיקי
יונים אלקטרוניים	אטומים	מולקולות	יונים חיוביים ביים של אלקטרוניים	
משיכה אלקטרוסטטית X ⁻	קוולנטים - אלקטרוניים משותפים	ואן-דר-וואלס דיפול-דיפול	משיכה אלקטרוסטטית e ⁻ M ⁻	
קשים, נקי, היתוך גבוהה, מוליכים בתמיסה	קשים מאוד, נקי, היתוך גבוהה, מוליכים בתמיסה	רכים, נקי, היתוך נמוכה, מבודדים	קשים/רכים מוליכים בעלי ברק מתכתי	
KNO ₃ , NaCl	יהלום, קוורץ; SiO ₂	H ₂ , H ₂ O, CO ₂	Na, Cu, Fe	

שווי משקל כימי

עבור ריאקציה בשווי משקל:

קבוע שווי משקל לפי ריכוזים:

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

[X] - ריכוז המרכיב x ביחידות molar, M=mol/liter

עבור הריאקציה ההפוכה:

$$K_c^{-1} = \frac{[A]^a [B]^b}{[C]^c [D]^d}$$

קבוע שווי לפי לחצים: (עבור אותה ריאקציה):

$$K_p = \frac{(P_C)^c (P_D)^d}{(P_A)^a (P_B)^b}$$

מכבר בין קבועי שווי המשקל: $K_p = K_c(RT)^{\Delta n}$, $K_p = K_c(RT)^{\Delta n}$

Δn - הפרש בין מקדם המוליים של תוצרים למקדם המוליים של מגיבים.

עקרון לה - שטלית: מערכת בשווי משקל שמופעלת עליה הפרעה חיצונית תפעל בכיוון הקטנת ההפרעה ושאיפה לחזור למצב של שווי משקל.

השפעת גורמים חיצוניים על שווי המשקל:

א. **השפעת הלחץ החיצוני:** בטמפרטורה קבועה, הגדלת הלחץ מחזקת את נפח המערכת והמערכת תזוז לכיוון הגדלת הנפח כדי להקטין את השינוי. במערכות גזיות השינוי בנפח מתבטא ב- Δn .

ב. **השפעת הטמפרטורה:** עם העלאת הטמפרטורה, הריאקציה תזוז בכיוון האנדותרמי (הכיוון הכולל חימום) של מערכת. שינוי בטמפרטורה גורם לשינוי בערכו של K.

ג. **השפעת גורמים כימיים:** אם המערכת בשווי משקל, ואחד ממרכיבי המערכת מנוגב בצורה בלתי הפיכה, לדוגמא יוצא מן המערכת, המערכת תגיב בכיוון שיוצרת אותו מרכיב. שינוי בהרכב לא משפיע על ערכו של K.

	eV	erg	J	kcal/mole
1 J =	$6.24 \cdot 10^{18}$	10^7	1	$1.44 \cdot 10^{20}$
1 erg =	$6.24 \cdot 10^{11}$	1	10^7	$1.44 \cdot 10^{13}$
1 eV =	1	$1.6 \cdot 10^{12}$	$1.6 \cdot 10^{19}$	23.06
1 kcal/mole =	$4.34 \cdot 10^{12}$	$6.95 \cdot 10^{14}$	$6.95 \cdot 10^{21}$	1

⚠ חומצות וביסיות חלשים: כשמדובר בחומצה חלשה או בביסית חלשה, תגובת הפירוק אינה מלאה ונוצר מצב של שיווי-משקל. קבועי שיווי המשקל נקראים K_a (עבור חומצה) או K_b (עבור ביסית).



⚠ עבור חומצה וביסית חלשים צמודים מתקיים: $K_a \cdot K_b = K_w = 10^{-14}$

$$pKa + pKb = pKw = 14$$

הקבוע	סימן	M.K.S.	C.G.S.
מרחיית האוור	C	$\text{sec}^2/\text{m}^3 \cdot 10^8$	$3 \cdot 10^{10} \text{ sec}^2/\text{cm}^3$
מסקו	c	$1.6 \cdot 10^{-19}$	$4.8 \cdot 10^{-10} \text{ u.s.c}$
מסת אלקטרון	m	$9.1 \cdot 10^{-31} \text{ Kg}$	$9.1 \cdot 10^{-28} \text{ g}$
מסת פרוטון/נייטרון	m_p, m_n	$1.67 \cdot 10^{-27} \text{ Kg}$	$1.67 \cdot 10^{-24} \text{ g}$
קבוע פלאנק	h	$6.63 \cdot 10^{-34} \text{ J sec}$	$6.63 \cdot 10^{-27} \text{ erg sec}$
קבוע רידברג	R	$2 \cdot 10^{-10} \text{ J}$	$2 \cdot 10^{-11} \text{ erg}$
מסת אבונדרו	N	$6.02 \cdot 10^{23} \text{ mole}^{-1}$	