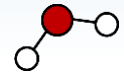


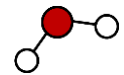
אורביטלים מולקולריים של מולקולות אורגניות מצומדות



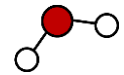
קשרים קוולנטיים יחידים, כפולים
ומשולשים – קשרי σ ו- π



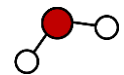
אורביטלים מולקולריים של מולקולות
אורגניות מצומדות



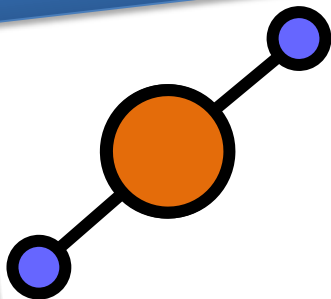
כרומופור



הקשר בין המבנה האלקטרוני של
המולקולה לצבע החומר



מה אנחנו צריכים כבר לדעת?



אורביטלים מולקולריים 
חיבור וחיסור אורביטלים
אטומיים, כללי אכלוס

אורביטל σ ואורביטל π 

אורביטלי HOMO ו-LUMO 

כיצד אנו רואים צבעים 
בליעה של אורכי גל בתחום הנראה וקליטה
של אורכי הגל שלא נבלעו ע"י העיניים

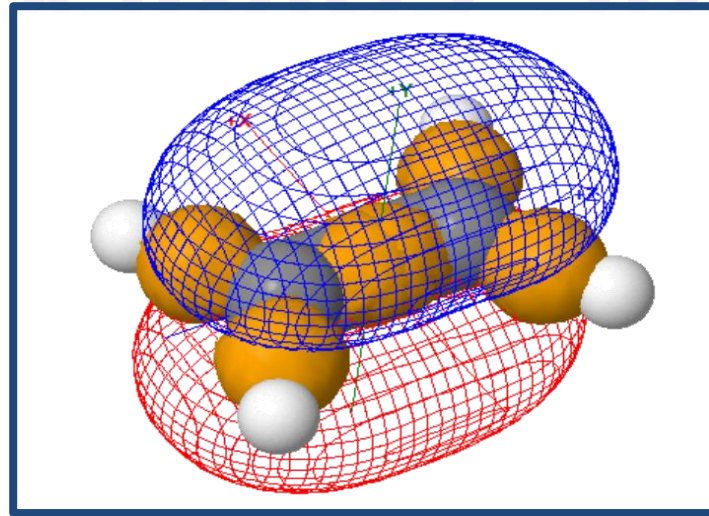
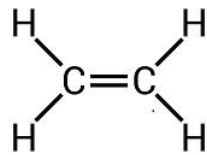
במולקולות אורגניות יש קשרים קוולנטיים יחידים, כפולים או משולשים בין אטומי הפחמן.

קשר קוולנטי יחיד בין אטומי פחמן נוצר כאשר אלקטרונים מאכלסים אורביטל אטומי σ . אורביטל σ נוצר מחפיפה "ראש לראש" של אורביטלים אטומיים $2p_x$, המכוונים על הציר המחבר את הגרעינים של שני אטומי הפחמן. קשר כזה נקרא **קשר σ** .

בקשר קוולנטי כפול אחד הקשרים הוא **קשר σ** והקשר השני נוצר מחפיפה "צד לצד" של שני אורביטלים אטומיים $2p_y$ (או $2p_z$) המכוונים בניצב לציר המחבר את הגרעינים של שני אטומי הפחמן. קשר כזה נקרא **קשר π** .

בקשר קוולנטי משולש אחד הקשרים הוא **קשר σ** ושני הקשרים האחרים הם **קשרי π** .

נצפה בסימולציה



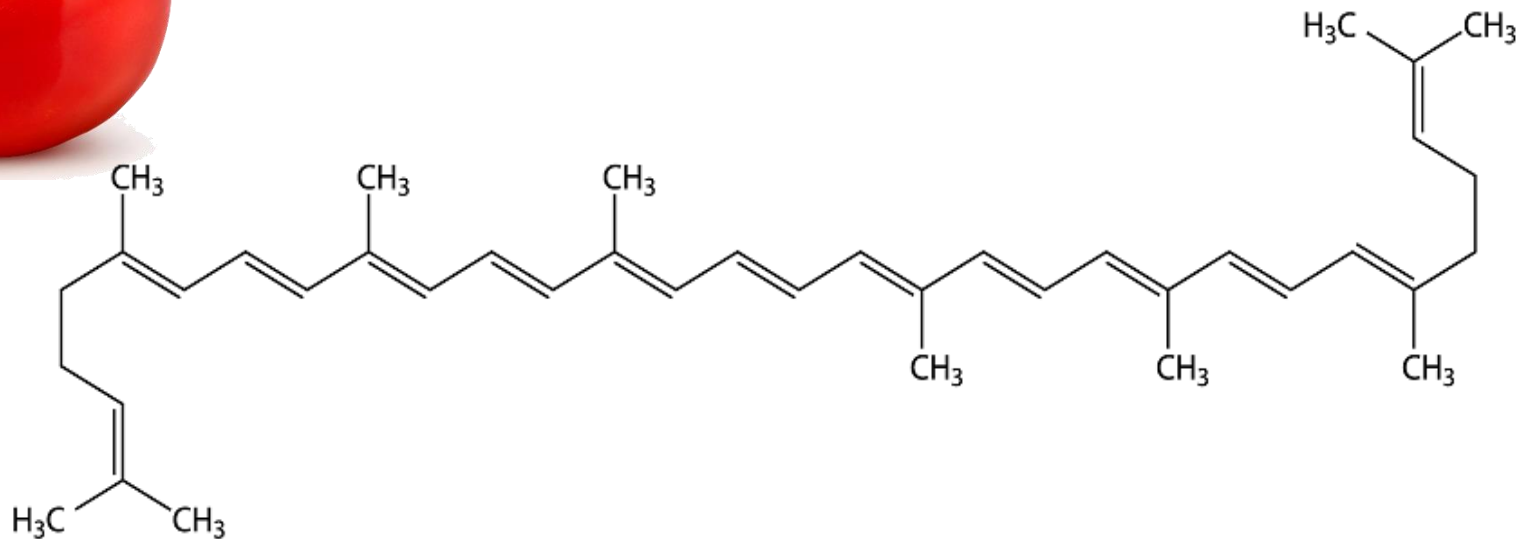
קשרי σ וקשר π במולקולת אתילן, C_2H_4

<https://www.chemtube3d.com/orbitalsethene>

לחצו על **Show sp² framework** – לקבלת אורביטלי σ הקושרים שנוצרו בין שני הפחמנים ובין כל אחד מהמימנים לפחמן.

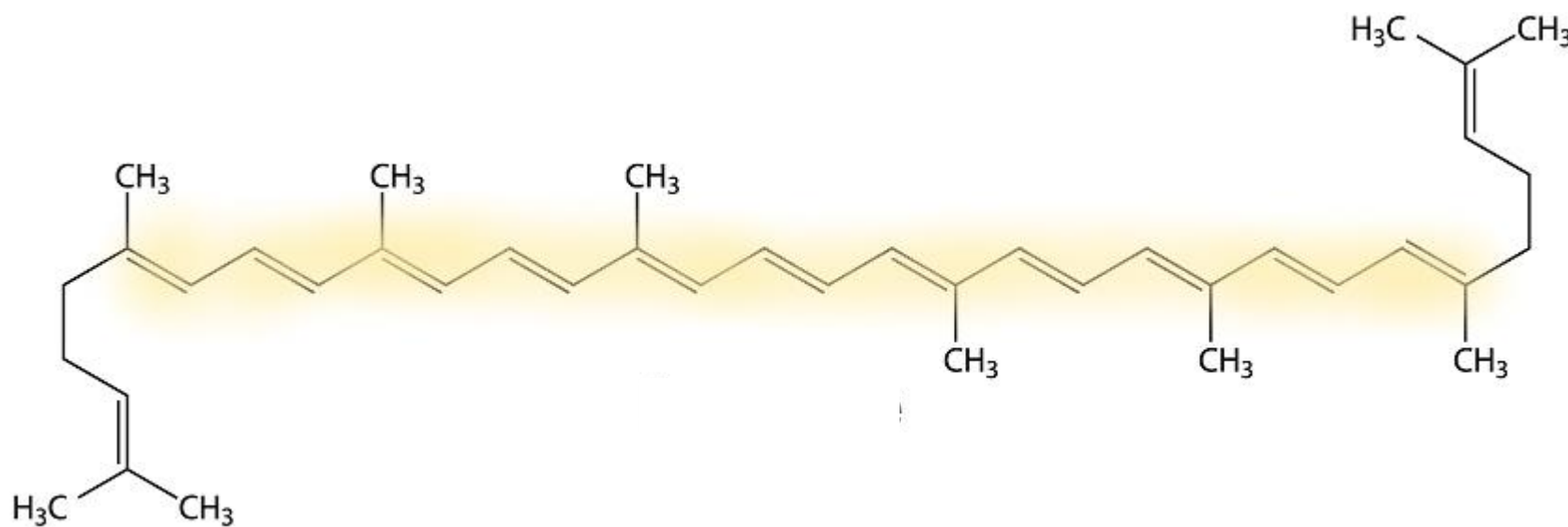
לחצו על **Show resulting pi orbital** – לקבלת אורביטל ה- π הקושר המתקבל משני אורביטלי ה- p הניצבים לציר המקשר בין שני אטומי הפחמן.

מולקולות אורגניות מצומדות הן מולקולות שבהן קשרי פחמן-פחמן כפולים ויחידים לסירוגין.

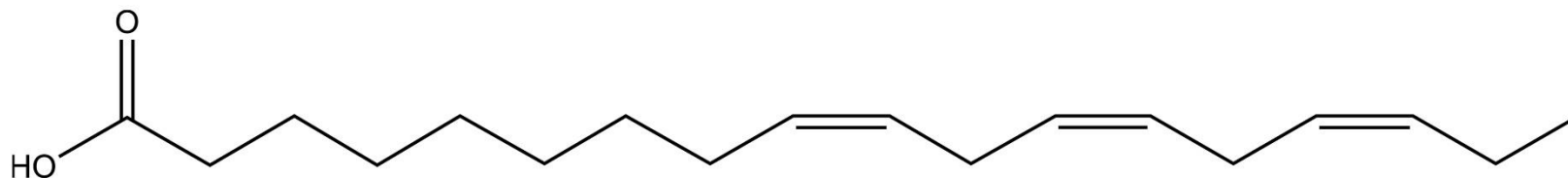


דוגמה: ליקופן הוא חומר הצבע האדום בעגבניות. במולקולת ליקופן 11 קשרים כפולים מצומדים.

החלק המצומד במולקולה נקרא כְּרוֹמוֹפּוֹר.
הכרומופור בליקופן מסומן במדגש צהוב.

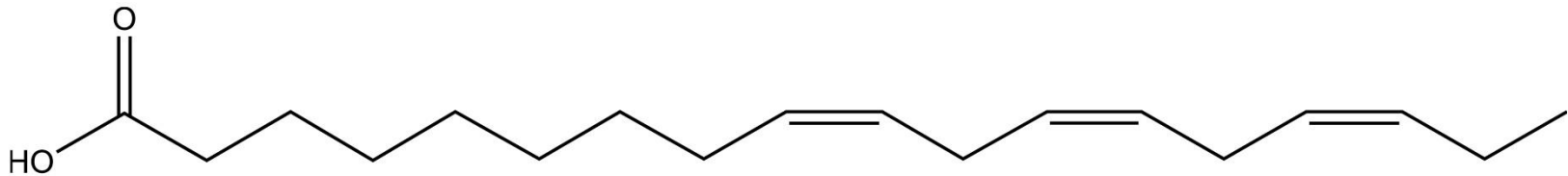


האם מולקולת חומצה אֶלֶפָּא לינולֵנִית, שהיא חומצת שומן בלתי רוויה, היא מולקולה מצומדת?

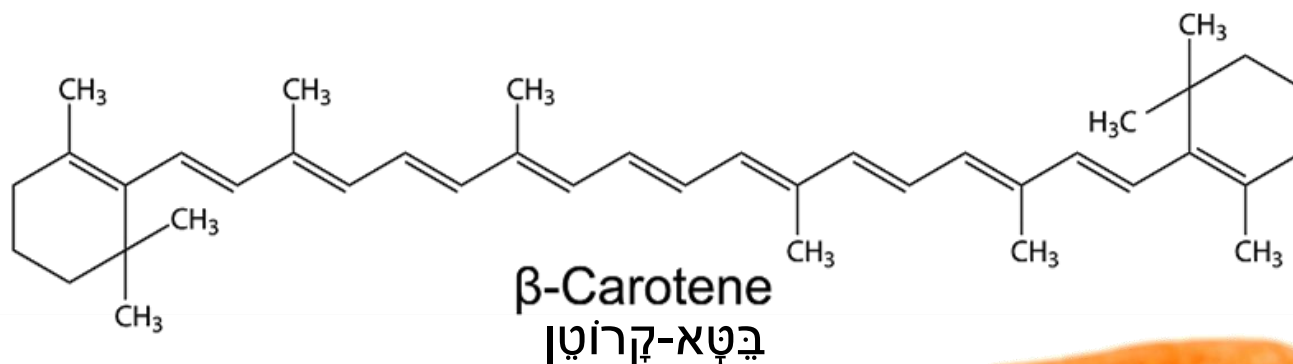


לא.

בין שני קשרים כפולים סמוכים מפרידים שני קשרים קוולנטים יחידים
ולא רק אחד.



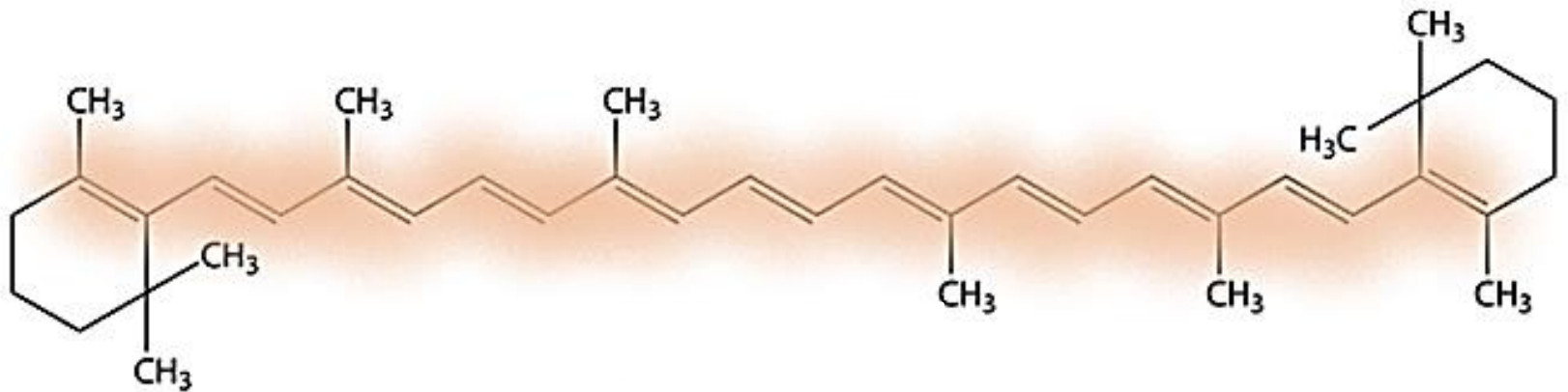
הצבען הכתום שבגזר הוא בטא-קרזטן.
כמה קשרים כפולים מצומדים במולקולה של החומר? סמנו את הכרומופור במולקולה.



תרגיל 2 - פתרון

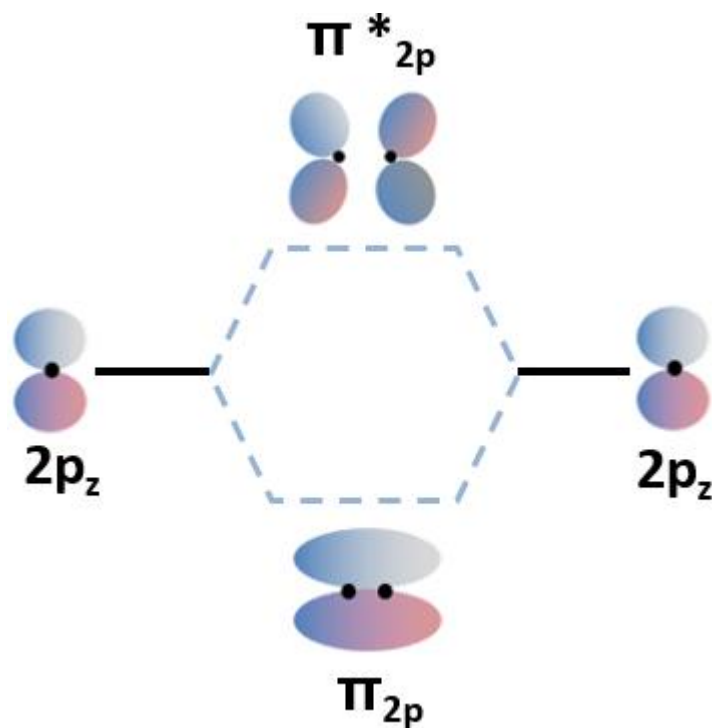
במולקולת בטא-קרוטן 11 קשרים כפולים מצומדים.

הכרומופור מסומן במדגש:



אורביטלים מולקולריים של מולקולות אורגניות מצומדות

במולקולה אורגנית שבה קשרים כפולים מצומדים, לכל אטום פחמן בכרומופור שלושה אלקטרוני ערכיות בקשרי σ עם אטומים שכנים, ואלקטרון ערכיות אחד בקשרי π .

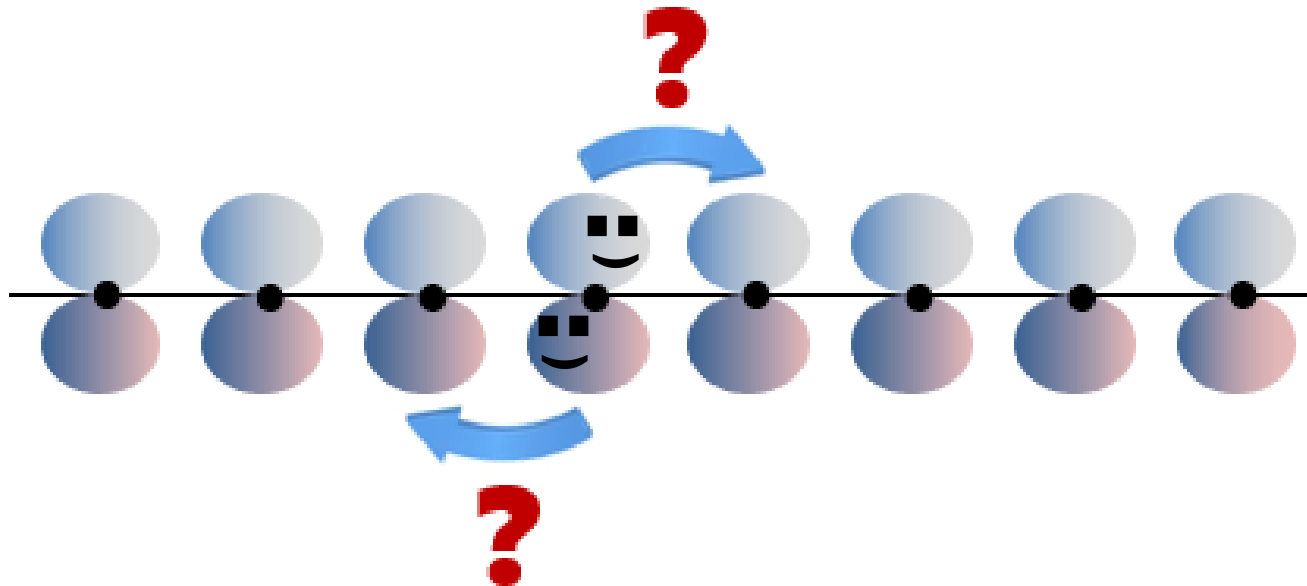


ראינו כי מכל שני אורביטלי π אטומיים הניצבים לציר המחבר את גרעיני שני האטומים, אפשר לקבל שני אורביטלים מולקולריים: אורביטל קושר, π , הנמוך יותר באנרגיה, ואורביטל אנטי קושר, π^* , הגבוה יותר באנרגיה.

אורביטלים מולקולריים של מולקולות אורגניות מצומדות

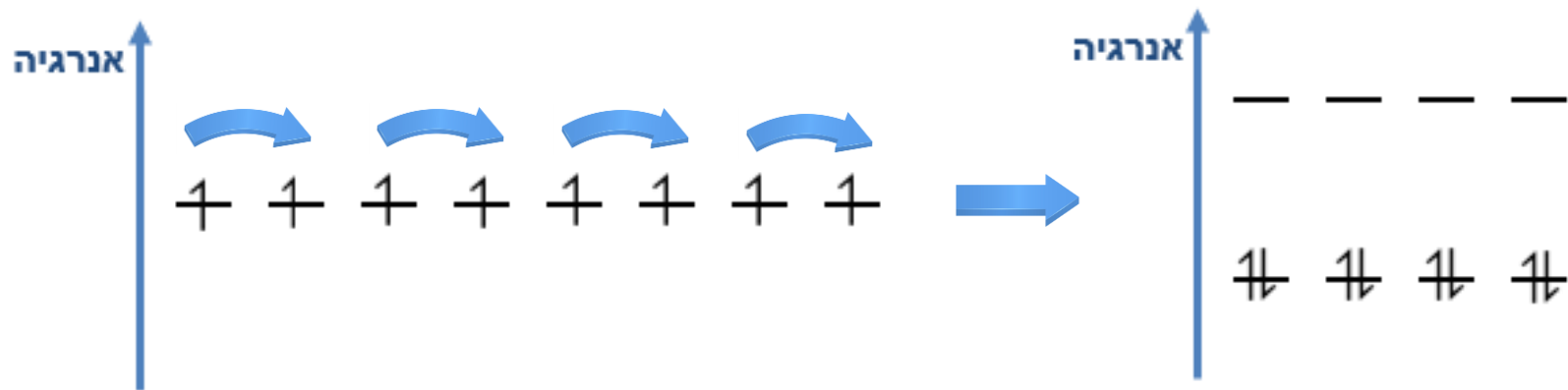
נסתכל, לדוגמה, על מולקולה מצומדת שבה שמונה אטומי פחמן (כלוצר ארבעה קשרים כפולים מצומדים).

במולקולה אורגנית מצומדת אורביטל π של אטום פחמן אחד יכול ליצור אורביטלים מולקולריים עם אורביטל π של האטום שנמצא משמאלו או של האטום שנמצא מימינו.



אורביטלים מולקולריים של מולקולות אורגניות מצומדות

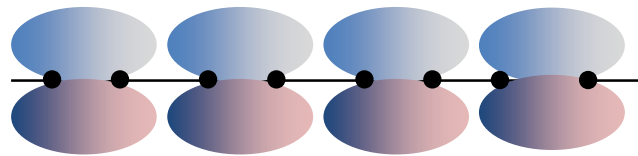
באופן שרירותי נחליט שכל אורביטל אטומי ϕ יתחבר ויתחסר עם אורביטל אטומי ψ של אטום הפחמן שמימינו. משמונה אורביטלי ϕ אטומיים נקבל שמונה אורביטלים מולקולריים: ארבעה אורביטלים קושרים, ψ , עם אנרגיה נמוכה יותר, וארבעה אורביטלים אנטי קושרים, ψ^* , עם אנרגיה גבוהה יותר.



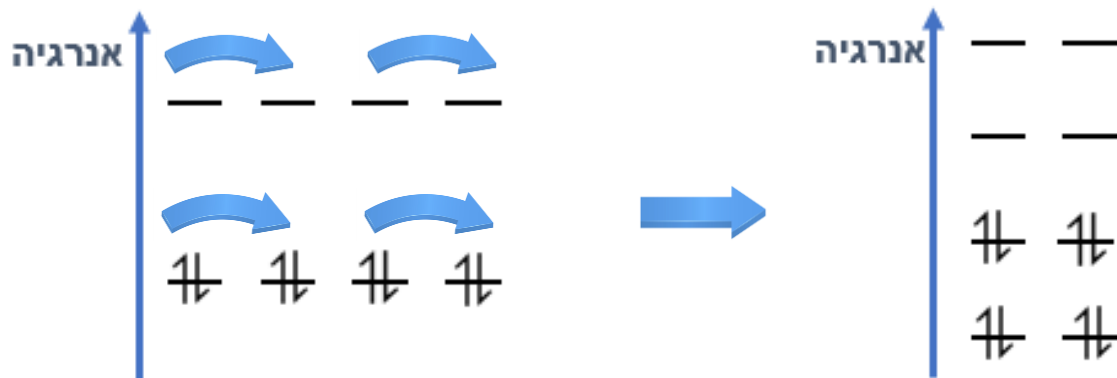
כל אורביטל אטומי כזה משתער על שני אטומים במולקולה.

אורביטלים מולקולריים של מולקולות אורגניות מצומדות

כך, לדוגמה, נראים ארבעת האורביטלים הקושרים π :

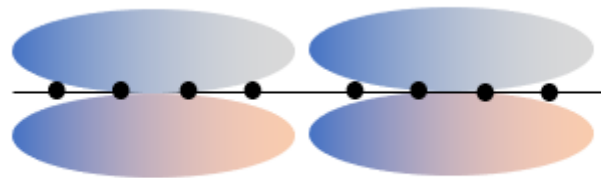


אפשר להמשיך בתהליך ולערבב שני אורביטלי π או שני אורביטלי π^* . מערבוב של כל שני אורביטלים נקבל שני אורביטלים נמוכים יותר באנרגיה ושני אורביטלים גבוהים יותר באנרגיה.

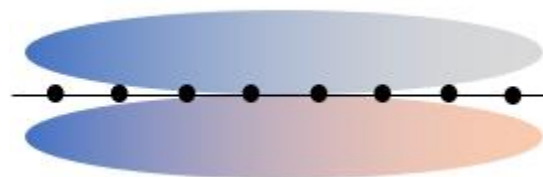


אורביטלים מולקולריים של מולקולות אורגניות מצומדות

עכשו כל אורביטל משתרע על ארבעה אטומי פחמן.
כך, לדוגמה, נראים שני אורביטלים קושרים π :



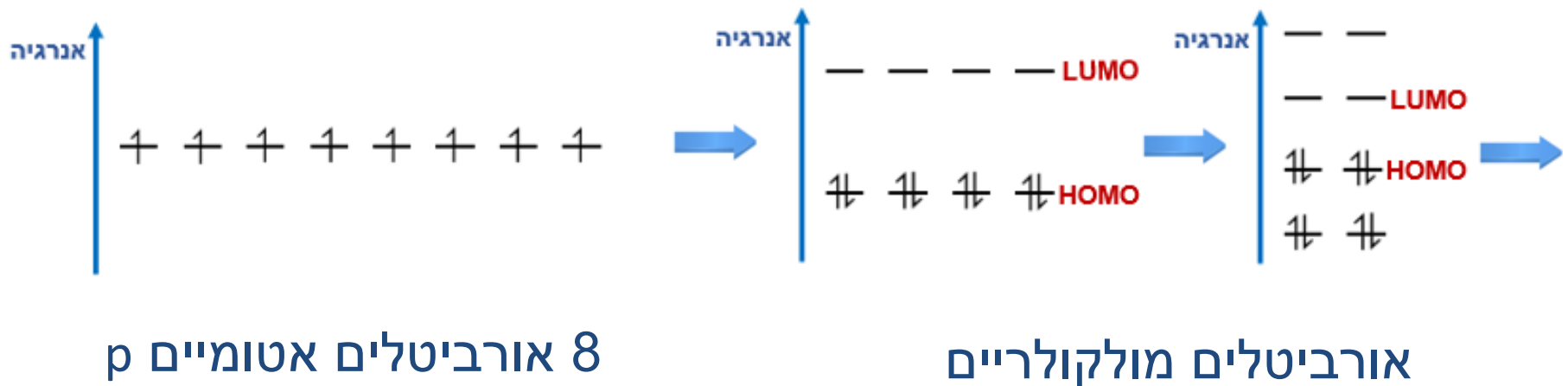
אפשר להמשיך בתהליך ולערבב שוב כל שני אורביטלים
מולקולריים ולקבל שני אורביטלים נמוכים יותר באנרגיה ושני
אורביטלים גבוהים יותר באנרגיה.
כל אורביטל מולקולרי משתרע כעת על שמונה אטומי פחמן –
כלומר על כל הכרומופור. לדוגמה - אורביטל קושר:



אורביטלים מולקולריים של מולקולות אורגניות מצומדות

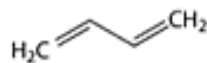
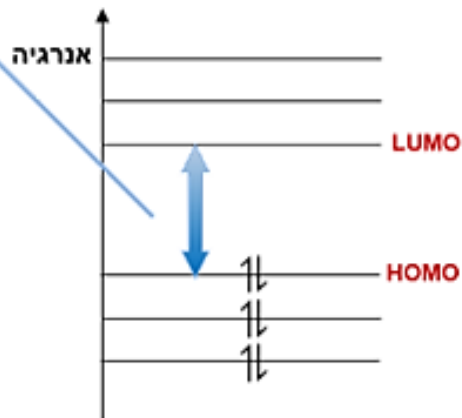
ככל שהכרומופור ארוך יותר, נוכל לחזור על התהליך פעמים רבות יותר.

כל ערבוב נוסף גורם לכך שרמות האנרגיה תהינה צפופות יותר, וכן שהפרש האנרגיה בין אורביטל ה-HOMO לאורביטל ה-LUMO יצטמצם.

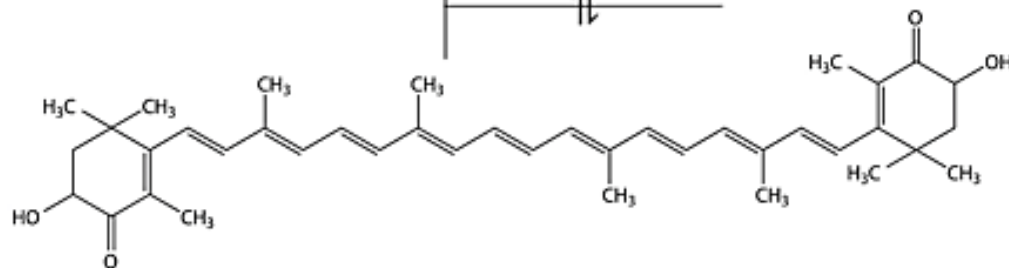
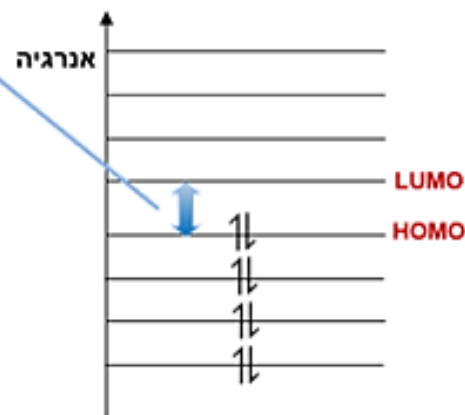


מולקולות אורגניות מצומדות כצבענים

הפרש אנרגיה יותר גדול
בין HOMO ל- LUMO.
עירור אלקטרוני מתרחש
כאשר נבלעת קרינה
בתחום העל-סגול (אורכי
גל קצרים יותר).



הפרש אנרגיה יותר קטן
בין HOMO ל- LUMO.
עירור אלקטרוני מתרחש
כאשר נבלעת קרינה
בתחום הנראה.



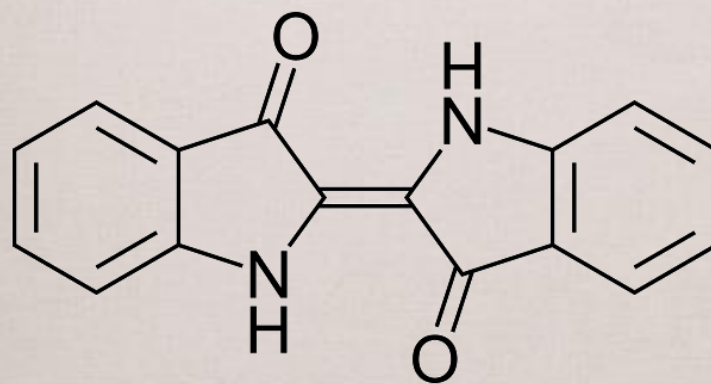
הפרש האנרגיה בין אורביטל ה- HOMO לאורביטל ה- LUMO הולך ומצטמצם ככל שמספר הקשרים הכפולים המצומדים עולה.

מכיוון שקיים יחס הפוך בין אורך גל לאנרגיה, ככל שהאנרגיה הנדרשת לעירור אלקטרון מה- HOMO ל- LUMO קטנה, אורך הגל הנחוץ לעירור גדל.

כשהכרומופור מספיק ארוך מספיקה בליעה בתחום הנראה כדי לערר אלקטרון מה- HOMO ל- LUMO. מכיוון שהחומר בולע בתחום הנראה הוא יהיה **צבעוני**. צבעו יהיה הצבע המשלים לצבע שנבלע.

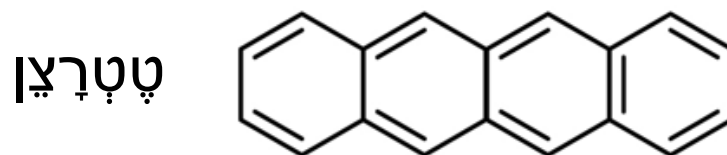
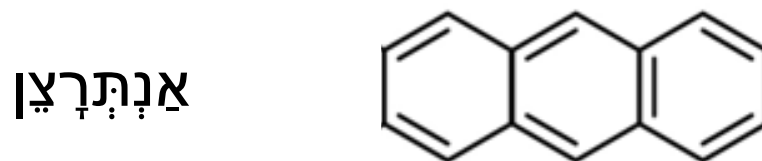
מולקולות אורגניות מצומדות כצבענים

הכרומופור במולקולה 
יכול להכיל גם קשרים
כפולים שאינם קשרי
 $C=C$. לדוגמה: $C=O$,
 $N=N$ ועוד.



מולקולת אינדיגו – הצבען הכחול של הג'ינס

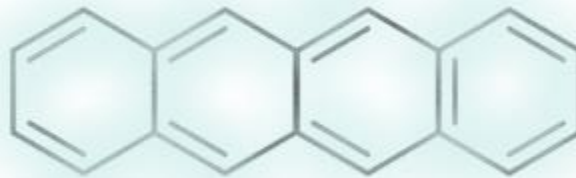
- נתונות נוסחאות מבנה של מולקולות של שלושה חומרים אורגניים. אחד החומרים הוא כתום והשניים האחרים – לבנים.
- א. זהו את החומר הכתום והסבירו את בחירתכם.
- ב. סמנו את הכרומופור של החומר הכתום.



א. החומר הכתום הוא הֶטֶרֶצֶן.

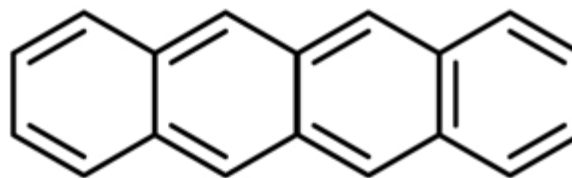
שלושת החומרים הם חומרים אורגניים מצומדים. לטטרצן הכרומופור הארוך ביותר ולכן הפרש האנרגיה בין אורביטל ה-HOMO לאורביטל ה-LUMO במולקולות חומר זה הוא הקטן ביותר. לאורכי גל בתחום הנראה מספיק אנרגיה כדי לגרום לעירור אלקטרוני מה-HOMO ל-LUMO והם נבלעים על ידי החומר. החומר הוא כתום, כלומר הוא בולע אורכי גל בתחום האור הכחול (הצבע המשלים של הכתום). במולקולת של שני החומרים האחרים הכרומופור קצר יותר והפרש האנרגיה בין אורביטל ה-HOMO לאורביטל ה-LUMO במולקולות אלה גדול יותר. נדרשת אנרגיה גדולה יותר כדי לגרום לעירור אלקטרוני, אנרגיה בתחום הקרינה העל-סגולה.

ב. הכרומופור משתרע על פני כל המולקולה (מסומן בעזרת מדגש):

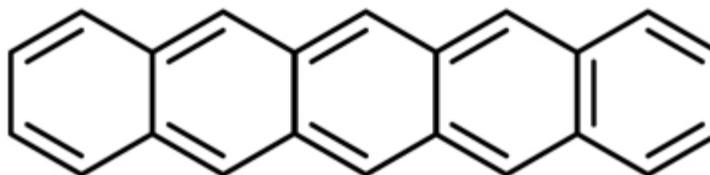


לטרצן צבע כתום. גם הפנטצן הוא חומר צבעוני.
האם הפנטצן הוא בעל צבע צהוב או סגול? הסבירו.

טרצן

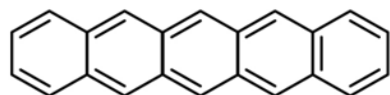


פנטצן

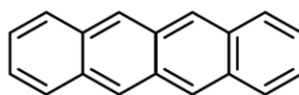


נערוך טבלת השוואה:

פֶּנְטָצֵן



טֶטְרָצֵן



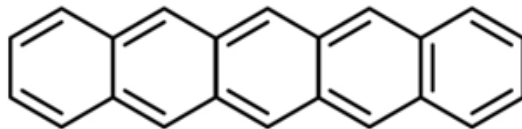
אורך יותר	קצר יותר	אורך הכרומופור
קטן יותר	גדול יותר	הפרש האנרגיה בין ה-HOMO ל-LUMO
קטנה יותר	גדולה יותר	האנרגיה הנדרשת לעירור אלקטרוני
גדול יותר	קטן יותר	אורך הגל הנדרש לעירור אלקטרוני
גדול יותר מכחול	בתחום הכחול (המשלים לכתום)	אורך הגל שנבלע

לפנטצן צבע סגול.

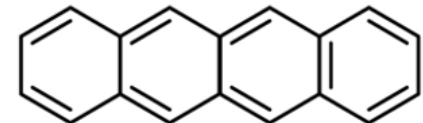
הכרומופור של הפנטצן ארוך יותר, ולכן הפרש האנרגיה בין ה-HOMO ל-LUMO קטן יותר. אורך הגל שנבלע וגורם לעירור אלקטרוני מה-HOMO ל-LUMO ארוך יותר.

הטטרצן בולע אורכי גל בתחום הכחול, ולכן הפנטצן בולע אורכי גל ארוכים יותר – בתחום הצהוב. שאר אורכי הגל מפוזרים, מגיעים לעינינו ונראים בצבע המשלים – סגול.

פֶּנְטָצֵן

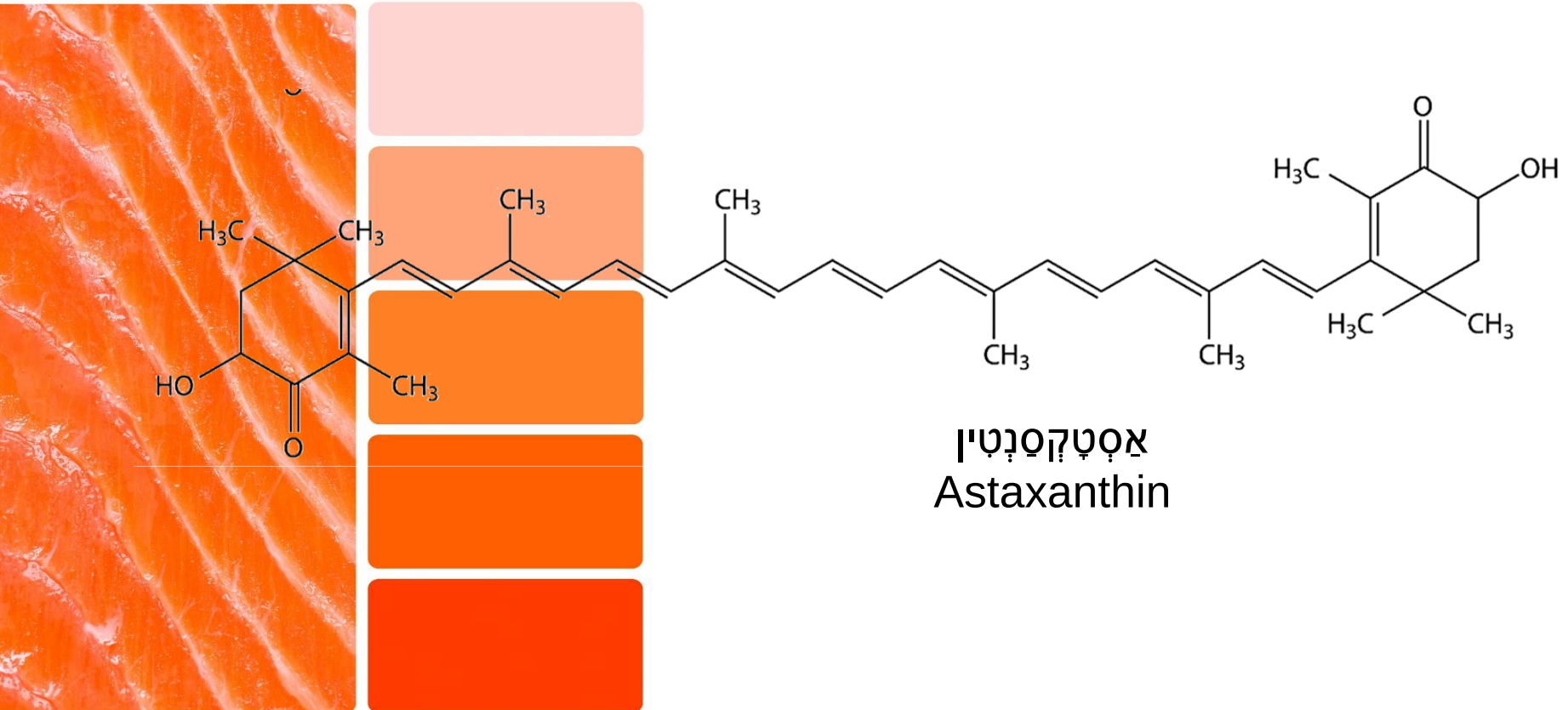


טֶטְרָצֵן



מדוע הסלמון אדום?

הצבען אַסְטֶקְסִנְטִין נמצא בבעלי חיים קטנים החיים בים שנאכלים על ידי דגי הסלמון. הצבען נותן לדג את צבעו האופייני. מגדלי הסלמון בבריכות יכולים להתאים את המזון שניתן לדגים בהתאם לצבע הרצוי שאותו בוחרים ממניפת צבעים.



כיצד המלבין מסיר כתמים?

המלבין הוא חומר מחמצן. כאשר מוסיפים אותו לכתם צבעוני, שנגרם מחומר אורגני מצומד, אטומי חמצן פעילים גורמים לשבירת חלק מהקשרים הכפולים של הכרומופור והכרומופור מתקצר. המולקולות כבר לא בולעות בתחום הנראה (אלא בתחום העל-סגול) והכתם מפסיק להיראות לעין.



נצפה בסרטון



מדוע הביצים ביפן כל כך כתומות?

https://www.youtube.com/watch?v=qjbJKVm5VYo&ab_channel=WayofRamen

קשר קוולנטי יחיד הוא קשר σ .
בקשר קוולנטי כפול קשר σ וקשר π .

מולקולות מצומדות הן מולקולות שבהן קשרים קוולנטיים כפולים ובודדים לסירוגין. החלק המצומד במולקולה נקרא כרומופור.

ההפרש האנרגיה בין אורביטל ה- HOMO לאורביטל ה- LUMO הולך ומצטמצם ככל שמספר הקשרים הכפולים המצומדים במולקולה עולה.

כאשר הפרש האנרגיה בין ה- HOMO ל- LUMO קטן, מספיקה בליעה בתחום הנראה כדי לעורר אלקטרון מה- HOMO ל- LUMO. מכיוון שהחומר בולע בתחום הנראה הוא יהיה צבעוני. צבעו יהיה הצבע המשלים לצבע שנבלע.