CHEMICAL BONDING

B.SC , SEM-1,UNIT-1(A)

BY

Dr. H. K. Patel (M.Sc (Inorganic chemistry),Ph.D.)
mob: +919824051005

THE HNSB. LTD SCIENCE COLLEGE, HIMATNAGAR.

Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

- Valance bond theory and its limitations
- Directional characteristics of Co - Valente bond
- Various types of Hybridization and Shape of Simple Inorganic Molecules
- V.S.E.P.R. Theory of NH_3 and H_2O
- M.O. Theory – Energy level diagram for homo nucleus diatomic molecules like N_2 and O_2 and hetero nucleus diatomic molecules like CO and NO

Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

- અણુમાં રહેલા પરમાણુંઓને એક બીજા સાથે જકડી રાખતા બળ ને રાસાયણિક બંધ કહે છે.

અથવા

- અણુમાં રહેલા પરમાણુંઓ વચ્ચેના આકર્ષણ બળ ને રાસાયણિક બંધ કહે છે.
- અણુ એટલે પરમાણુઓ નો સમૂહ / બે કે બે કરતા વધારે પરમાણુઓ વચ્ચે રાસાયણિક બંધ ધ્વારા બનતા પરમાણુઓ ના સમૂહ ને અણુ કહે છે.
- સામાન્ય રીતે રાસાયણિક બંધ એ રીતે બને છે કે અણુ ના દરેક પરમાણું નું અષ્ટક પૂર્ણ થાય.
- પરમાણું ઈલેક્ટ્રોન મેળવીને , ઈલેક્ટ્રોન નું દાન કરીને કે ઈલેક્ટ્રોન ની ભાગીદારી પોતાનું અષ્ટક પૂર્ણ કરે છે.
- ઈલેક્ટ્રોન મેળવવાની વૃત્તિ ધરાવતા પરમાણુને ઇલેક્ટ્રો નેગેટીવ તત્વ કહે છે.

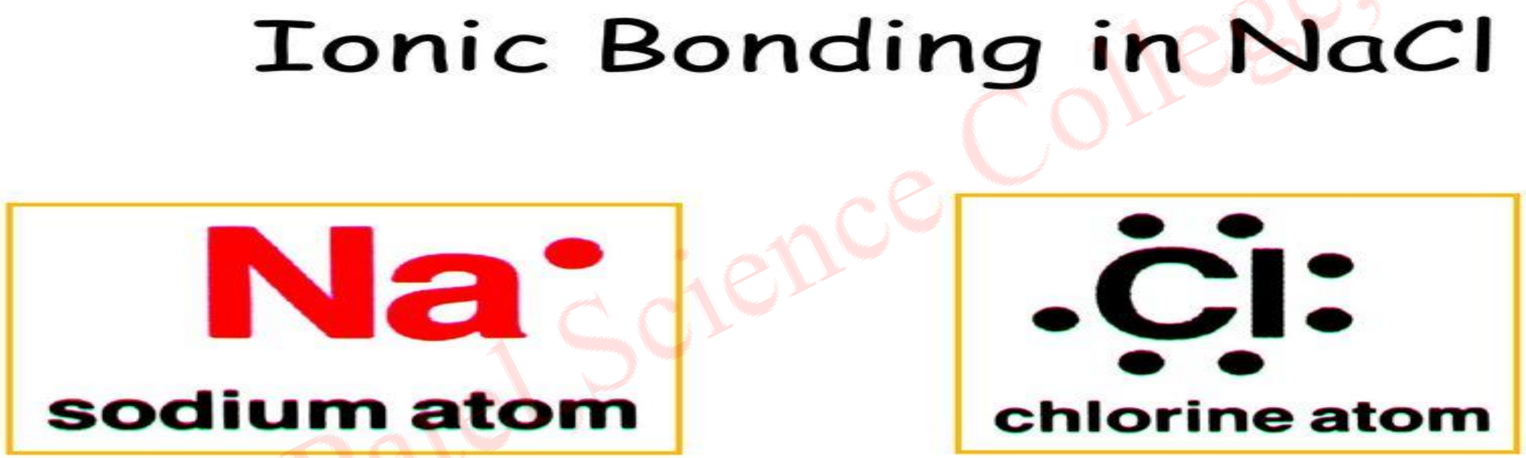
(દા.ત- $Cl + e \rightarrow Cl^-$)

- ઈલેક્ટ્રોન દાન કરવાની વૃત્તિ ધરાવતા પરમાણુને ઇલેક્ટ્રો પોઝેટીવ તત્વ કહે છે.

(દા.ત- $Na \rightarrow Na^+ + e$)

Dr.H.K.Patel,Science College Himatnagar

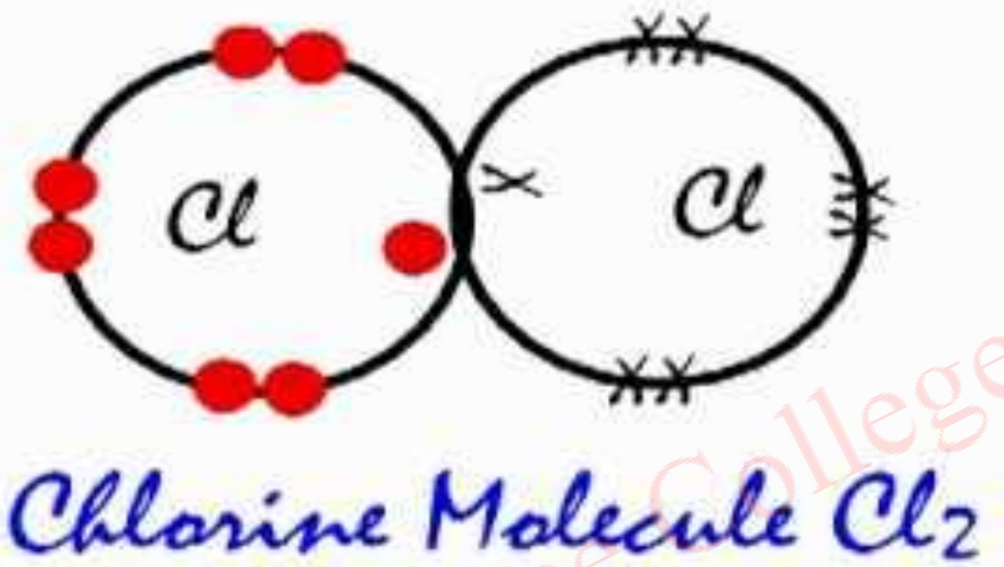
- ઇલેક્ટ્રો પોઝેટીવ તત્વ + ઇલેક્ટ્રો નેગેટીવ તત્વ = આયનિક બંધ (Ionic Bond)
- ઇલેક્ટ્રો નેગેટીવ તત્વ + ઇલેક્ટ્રો નેગેટીવ તત્વ = સહસંયોજક બંધ (co – valent bond)
- ઇલેક્ટ્રો પોઝેટીવ તત્વ + ઇલેક્ટ્રો પોઝેટીવ તત્વ = ધાત્વિક બંધ (metalic bond)
- સંકીર્ણ સંયોજન માં જોવા માળતો સવર્ગ સહસંયોજક બંધ



$_{11}Na : 1S^2\ 2S^2\ 2P^6\ 3S^1 3P^0$

$_{17}Cl : 1S^2\ 2S^2\ 2P^6\ 3S^2 3P^5$

Dr.H.K.Patel Science College,Himatnagar



www.flashscience.co.uk

$_{17}Cl : 1S^2\ 2S^2\ 2P^6\ 3S^2 3P^5$

$_{17}Cl : 1S^2\ 2S^2\ 2P^6\ 3S^2 3P^5$

Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

- સહસંયોજક બંધ માં સ્થિરવીજીય આકર્ષણનો અભાવ હોય છે જેથી ઈલેક્ટ્રોનનું સ્થાનાંતર શક્ય નથી.આવા સંયોજનો માં ઘટકો ને કોણ જકડી રાખે છે તે સમજાવવા નો સૌ પ્રથમ પ્રયત્ન G.N.Lewis એ કર્યો.

- Lewis ના મતે સહસંયોજક સંયોજનમાં આવેલા પરમાણુઓ એક,બે કે ત્રણ ઈલેક્ટ્રોનની ભાગીદારી દ્વારા અષ્ટક પૂર્ણ કરી સ્થાઈત્વ મેળવે છે. જેને અનુરૂપ એકલ બંધ, દ્વિ બંધ અને ત્રિ બંધ સમજાવી શકાય છે.

- Lewis ની થીયરી અણુનો આકાર, બંધઉર્જા તથા બંધ ક્રમાંક સમજવા અસમર્થ છે.

- સહસંયોજક બંધ સમજવા શ્રોડીનજર સમીકરણ નો ઉકેલ મેળવી સમજાવી શકાય છે પણ તે સરળ નથી.

- સહસંયોજક બંધ સમજવા ક્વોન્ટમ યંત્રશાસ્ત્ર નો ઉપયોગ કરી સમજાવાય છે (M.O Theory)

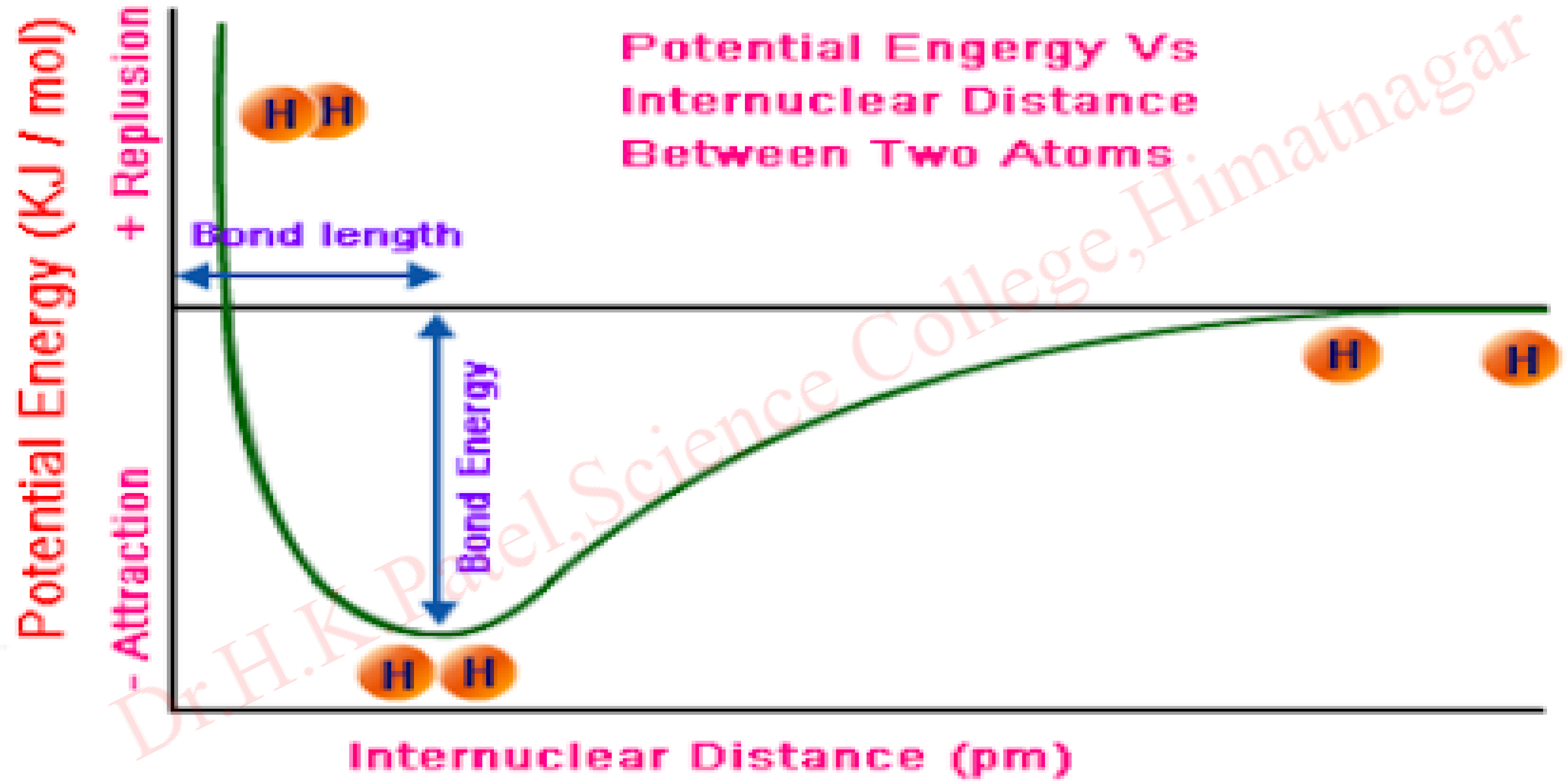
સયોજકતા બંધન વાદ અને તેની મર્યાદાઓ (Valance bond theory and its limitations)

- આ થીયરી હિટલર અને લંડન નામના વૈજ્ઞાનિકએ આપી
- ત્યાર બાદ સ્લેટર અને પાઉંલિંગ નામના વૈજ્ઞાનિકએ તેનું વિસ્તૃતિકરણ કર્યું તથા સહસંયોજક બંધમાં સંકરણ અને દીશાત્મક ગુણ સમજાવ્યા.
- અને છેલ્લે ગેલોપ્સી અને નાયહોમ નામના વૈજ્ઞાનિકએ સહસંયોજક કોષમા ઈલે-ઈલે વચ્ચેના અપાકર્ષણ ને સમજાવ્યું

Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

- અણુના પરમાણુઓ કેન્દ્રીય આકર્ષણ ધ્વારા એક બીજાની નજીક આવે છે અને તેમની વચ્ચે અતિવ્યાપ (Overlapping) થાય છે.
- ઈલે-ઈલે તથા કેન્દ્ર-કેન્દ્ર વચ્ચે અપાકર્ષણ થતું હોવાથી અતિવ્યાપ (Overlapping) આંશિક પ્રમાણમાં થાય છે અને પરમાણું કેન્દ્રો એક ચોકસ અંતરેથી વધુ નજીક આવી શક્તા નથી.
- અતિવ્યાપ (Overlapping) બાદ ઈલે.ની સ્પીન વિરુદ્ધ દિશામાં ગોઠવાય છે.
- અતિવ્યાપ (Overlapping) પરમાણુંઓ એવી કક્ષકો વચ્ચે થાય છે જેમની પાસે અયુગ્મિત ઈલે. હોય, યુગ્મિત ઈલે.ધરાવતી પરમાણુંઓ ની કક્ષકો વચ્ચે અતિવ્યાપ (Overlapping) થતું નથી.
- પરમાણીય કક્ષકો ના અતિવ્યાપ (Overlapping) થી આણવીય પ્રણાલી ની સ્થિતિ ઉર્જામાં ઘટાડો થાય છે એટલે કે અલગ-અલગ પરમાણુંઓ ની સરખામણી એ અણુ વધુ સ્થાઈ બને છે. દાત. H_2 અણુ

Dr.H.K.Patel Science College,Himatnagar


Potential Engergy Vs
Internuclear Distance
Between Two Atoms
Potential Energy (KJ / mol)
+ Replusion
- Attraction
Bond length
Bond Energy
H H
H H
H
H
Internuclear Distance (pm)
Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

- અતિવ્યાપ(Overlapping) જેટલુ વધારે હશે બંધ તેટલો વધારે મજબુત.
- અતિવ્યાપ(Overlapping) થાય ત્યારે ઈલે. બે કેન્દ્રો વચ્ચે કેન્દ્રિત થાય છે.

મર્યાદાઓ :-

- જે પરમાણું અયુગ્મિત ઈલે. ન ધરાવતા હોય તે સહ સંયોજક બંધ બનાવી શકે નહિ તે માન્યતા ખોટી છે.
- કોઈ પરમાણું ધારા અવસ્થામાં અયુગ્મિત ઈલે. ન ધરાવતા હોય પણ તે ઉત્તેજિત અવસ્થામાં આવી ઉંચી શક્તિ ધરાવતી કક્ષકમાં સંક્રાંતિ પામી પૂરતા પ્રમાણમાં અયુગ્મિત મેળવી સહ સંયોજક બંધ બનાવી શકે છે
- આ થીયરી પરમાણુઓ ના અન્ય ગુણો જેવાકે ચુંબકીય ગુણ , રંગ વગેરે ને સમજાવવા અસમર્થ છે.
- આ થીયરી પમાણે ઈલે. ની ઉણપ ધરાવતા તથા આંતર ધાત્વીક સંયોજનોમાં થતું બંધન સમજાવી શકાતું નથી.
- આ થીયરી પ્રમાણે સહ સંયોજક બંધમાં હાજર આયનીક ગુણધર્મ સમજાવી શકાતો નથી.

Dr.H.K.Patel,Science College Himatnagar

સહસંયોજક બંધનો દિશાત્મક ગુણધર્મ (Directional characteristics of Co - Valente bond

- સહસંયોજક બંધની પ્રબળતા એ પરમાણ્વીય કક્ષકો ના overlapping ની માત્રા , પરમાણ્વીય કક્ષકો ની સાપેક્ષ ઉર્જા તથા પરમાણ્વીય કક્ષકો ની સમિતિ પર આધારીત હોય છે.
- બંધ નિર્માણની પ્રક્રિયામાં પરમાણ્વીય કક્ષકોનું ઈલે. ઘનત્વ (electron density) ચોક્કસ દિશામાં સંકેન્દ્રિત થાય છે માટે કહી શકાય કે સહસંયોજક બંધ દિશાત્મક હોય છે.
- સહસંયોજક બંધના દિશાત્મક ગુણને કારણે અણુની ભૌમિતિક સંરચના , આકાર તથા બંધકોણ જાણી શકાય છે.

અતિવ્યાપ (Overlapping) ના પ્રકાર

1. s –s અતિવ્યાપ

- જયારે સયોજાતા બે પરમાણુના વિરુધ્ધ સ્પિનવાળા ઈલે. s –કક્ષકમાં હોય ત્યારે s –s અતિવ્યાપ દ્વારા સહસંયોજક બંધ નિર્માણ પામે છે.

Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

- s –s અતિવ્યાપ હમેશા અક્ષીય હોય છે તેથી તેના ધ્વારા મજબુત સિગ્મા (σ) બંધ બને છે.
- s – કક્ષક ગોળાકાર હોવાથી અતિવ્યાપ બધી દિશામાં એક સરખો થાય છે તથા તે બંધ અદિશીય હોય છે.
- દા.ત – H_2 અણુ

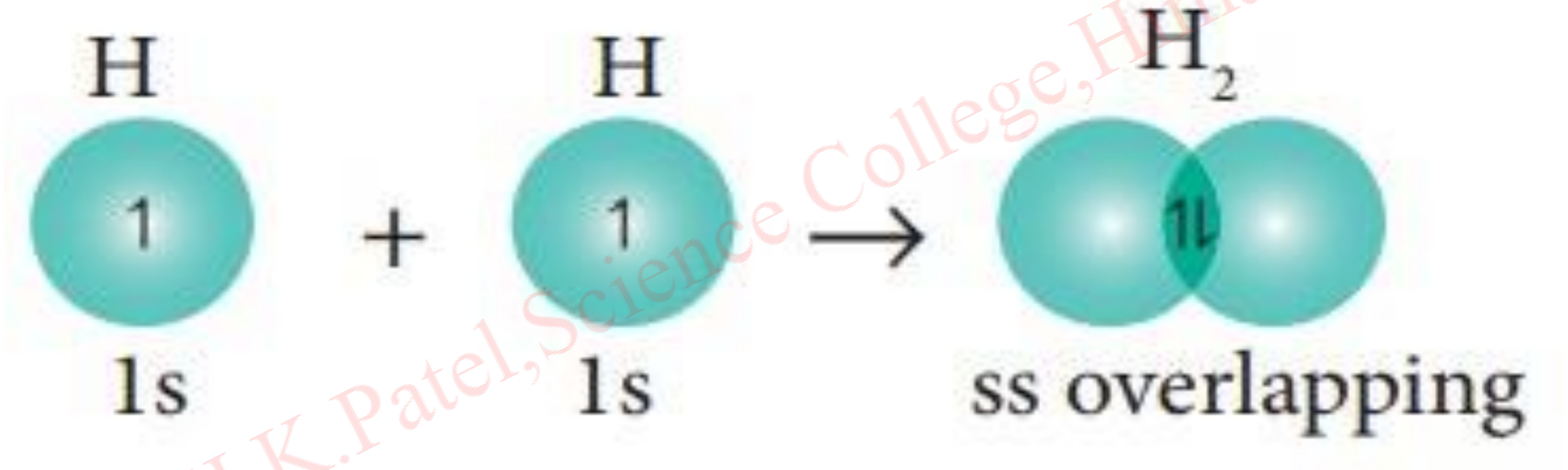


Fig 10. 18 Formation of hydrogen molecule

Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

૨. s – p અતિવ્યાપ

- જયારે સયોજાતા બે પરમાણુઓ પૈકી એક પરમાણુંનો અયુગ્મિત ઈલે. s –કક્ષકમાં હોય અને બીજા પરમાણુનો અયુગ્મિત ઈલે. p –કક્ષકમાં હોય ત્યારે s –p અતિવ્યાપ દ્વારા સહસંયોજક બંધ નિર્માણ પામે છે.(બન્ને પરમાણુંના ઈલે. વિરુધ્ધ સ્પિનવાળા હોય.) આ પ્રકારના અતિવ્યાપને s –p અતિવ્યાપ કહે છે.
- દા.ત – HF અણુ ($_1H : 1S^1$ અને $_9F : 1S^2\ 2S^2\ 2Px^2\ 2Py^2\ 2Pz^1$)

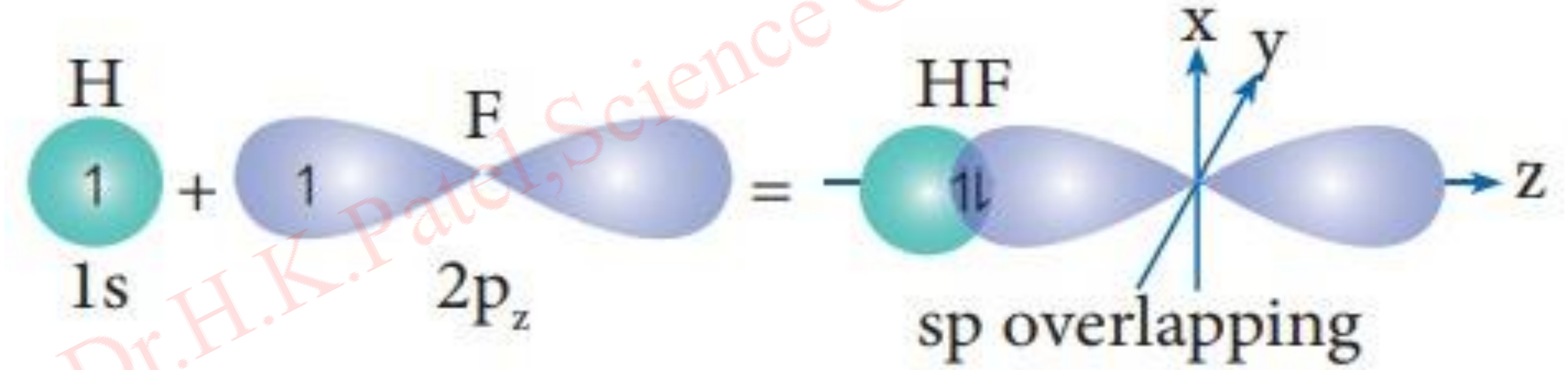


Fig 10.20 Formation of HF Molecule

Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

૩. P – P અતિવ્યાપ

- જયારે સયોજાતા બે પરમાણુના વિરુધ્ધ સ્પિનવાળા ઈલે. P –કક્ષકમાં હોય ત્યારે P –P અતિવ્યાપ દ્વારા સહસંયોજક બંધ નિર્માણ પામે છે.

- P –P અતિવ્યાપ બે પ્રકારના હોય છે.

(૧) સમ-અક્ષીય (Co – axial) તેના દ્વારા સિગ્મા (σ) બંધ બને

(૨) સમ – પાશવીય (Co – lateral) તેના દ્વારા π બંધ બને

- જયારે બે અર્ધ-પૂર્ણ p – કક્ષકો એક જ અક્ષ ઉપર અતિવ્યાપ અનુભવે છે ત્યારે તેને સમ-અક્ષીય (Co – axial) અતિવ્યાપ કહે છે જેના દ્વારા સિગ્મા (σ) બંધ બને દા.ત F_2 અણુ , $_9F : 1S^2\ 2S^2\ 2Px^2\ 2Py^2\ 2Pz^1$
- જયારે બે અર્ધ-પૂર્ણ p – કક્ષકો બંધ અક્ષને લંબ રહીને અતિવ્યાપ અનુભવે છે ત્યારે સમ – પાશવીય (Co – lateral) અતિવ્યાપ બને છે. દા.ત C_2H_4 ઈથીલીન

Dr.H.K.Patel Science College,Himatnagar

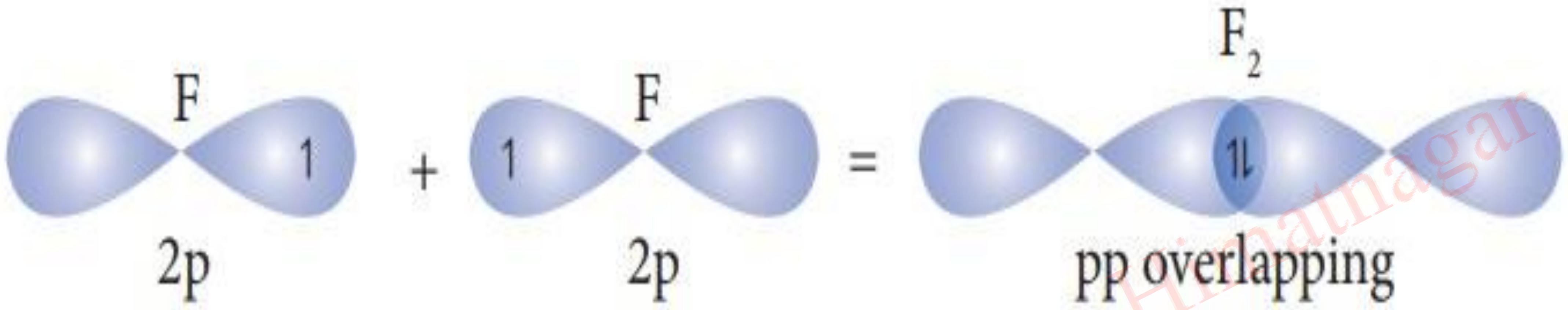
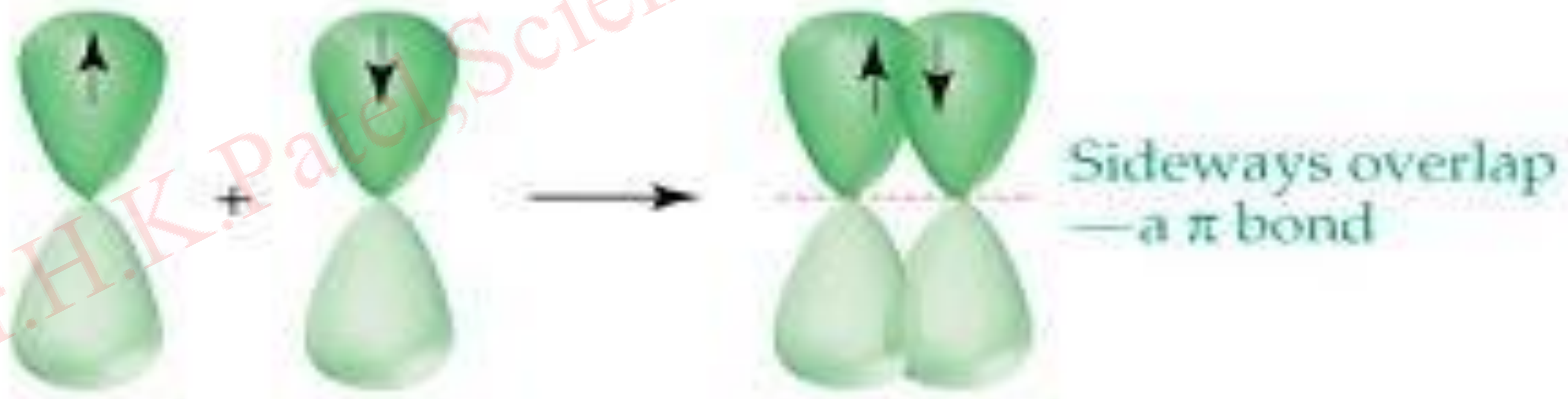


Fig 10. 19 Formation of F_2 Molecule



Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

સંકરણ,તેના પ્રકાર અને સરળ અકાર્બનિક અણુઓના આકાર

(Various types of Hybridization and Shape of Simple Inorganic Molecules)

- સંયોજકતા બંધન વાદ અનુસાર કોઈ પણ પરમાણુ દ્વારા મહત્તમ સહ સંયોજક બંધની સંખ્યા તે પરમાણુની સંયોજકતા કોષમાં રહેલ અયુગ્મિત ઈલે. ની સંખ્યા બરાબર હોય છે તેથી Be(z=4) શૂન્ય , B(z=5) એક તથા C(z=6) બે સહસંયોજક બંધ બનાવતા હોવા જોઈએ પણ તે સાચું નથી.તે અનુક્રમે બે , ત્રણ અને ચાર બંધ બનાવે છે.

- પરમાણુઓ બંધ બનાવતી વખતે જે ઉર્જા મુક્ત કરે છે તે ઉર્જા 2S કક્ષકના ઈલે. ને 2P કક્ષકમાં લઇ જાય છે અને આ તેની ઉત્તેજિત અવસ્થા હોય છે.પરિણામે Be(z=4) બે , B(z=5) ત્રણ તથા C(z=6) ચાર સહસંયોજક બંધ બનાવે છે.

	ધારા અવસ્થામાં ઈલે. રચના	ઉત્તેજિત અવસ્થામાં ઈલે. રચના
Be (z=4)	$1S^2\ 2S^2$	$1S^2\ 2S^1\ 2Px^1$
B (z=5)	$1S^2\ 2S^2\ 2Px^1$	$1S^2\ 2S^1\ 2Px^1\ 2Py^1$
C (z=6)	$1S^2\ 2S^2\ 2Px^1\ 2Py^1$	$1S^2\ 2S^1\ 2Px^1\ 2Py^1\ 2Pz^1$

Dr.H.K.Patel Science College Himatnagar

- S અને P કક્ષકોની ઉર્જા, આકાર તથા ઈલે.ઘનત્વ(density) ભિન્ન હોવાથી તેમના દ્વારા બનતા બંધ પણ અલગ હોવા જોઈએ પરંતુ વર્ણપટના અભ્યાસ પરથી સાબિત થયું છે કે આ બંધ સમાન આકાર,ઉર્જા અને લંબાઈ ના હોય છે બંધમાંની આ સમાનતા સમજાવવા પાઉલિંગે સંકરણ નો ખ્યાલ આપ્યો.

સંકરણ :-

- કોઈ પરમાણુની લગભગ સમાન ઉર્જા પણ ભિન્ન આકારવાળી કક્ષકો એકબીજામાં ભેળસેળ બની સમાન આકાર તથા સમાન ઉર્જાવાળી નવી કક્ષકો બનાવે છે આ ઘટનાને સંકરણ કહે છે અને તે કક્ષકોને સંકૃત કક્ષકો કહે છે.
- કોઈ પરમાણુની લગભગ સમાન ઉર્જાવાળી કક્ષકો જ સંકરણમાં ભાગ લે છે.
- પરમાણુની જેટલી કક્ષકો સંકરણમાં ભાગ લે છે તેટલીજ સંકૃત કક્ષકો મળે છે.
- કોઈ એકજ પરમાણું અલગ-અલગ સંકરણ કરી શકે છે. દા.ત:- કાર્બન પરમાણુ ઈથેન (C_2H_6) અણુમાં SP^3 , ઇથિન (C_2H_4) અણુમાં SP^2 અને ઈથાઈન (C_2H_2) અણુમાં SP સંકરણ અનુભવે છે.
- પરમાણુની સંકૃત કક્ષકોનો ગુણ દિશાત્મક હોવાથી તે પ્રબળ બંધ બનાવે છે.
- સંકારણમાં ઈલે. નહી પણ કક્ષકો ભાગ લે છે આથી સંકરણમાં ખાલી , અર્ધપૂર્ણ કે પૂર્ણ ભરાયેલ એમ બધા જ પ્રકારની કક્ષકો ભાગ લઇ શકે છે.

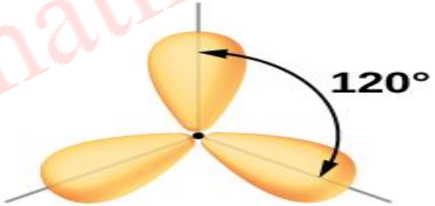
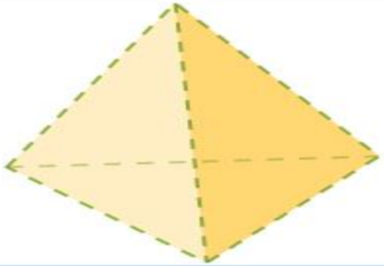
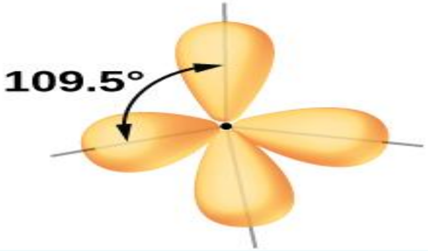
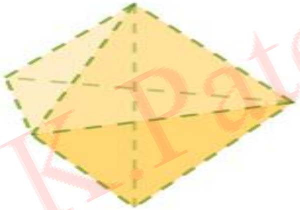
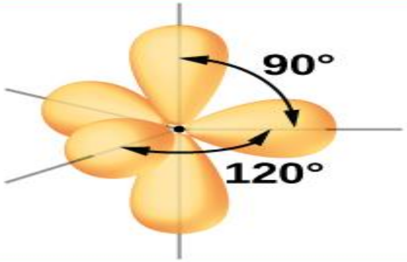
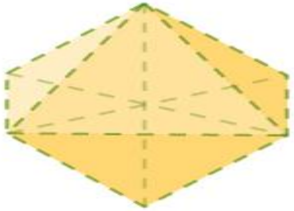
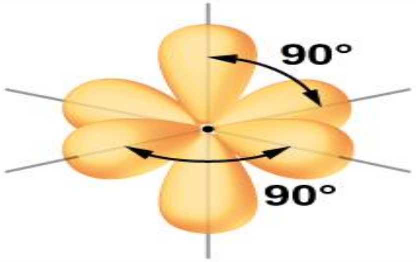
Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

- પરસ્પર અપાકર્ષણને કારણે સંકૃત કક્ષકો ત્રિ-પરિમાણમાં એક બીજાથી મહત્તમ અંતરે ગોઠવાય છે તથા તેમનામાં દિશીય ગુણ હોવાથી ચોક્કસ ભૌમિતિક આકાર તથા બંધકોણ ધરાવે છે.
- સંયોજ્કતા કોષમાં આવેલ અયુગ્મિત ઈલે. ને બોન્ડીંગ પેર(B.P) તથા યુગ્મિત ઈલે. ને લોન પેર(L.P) કહે છે.
- સંયોજ્કતા કોષમાં અપાકર્ષણ આ મુજબ અનુભવાય છે. B.P - B.P < B.P - L.P < L.P- L.P

સંકરણના પ્રકાર :-

HYBRIDISATION				
Type of hybridisation	No. of hybrid orbitals obtained	Bond angle	Structure	Examples
sp	2	180°	Linear	$BeCl_2$, CO_2, C_2H_2, $HgCl_2$ CN^-, N_3^-
sp^2	3	120°	Plane triangle	SO_3, BF_3, $AlCl_3$, $CO_3^=$
sp^3	4	109°28′	Tetrahedral	CH_4, CCl_4, C_2H_6, $SO_4^=$, ClO_4^-, $[Ni(CO)_4]$
sp^3d	5	90° & 120°	Trigonal bipyramidal	PF_5, PCl_5
sp^3d^2	6	90°	Octahedral	SF_6, $[Fe(CN)_6]^{4-}$
sp^3d^3	7	90° & 72°	Pentagonal bipyramidal	IF_7

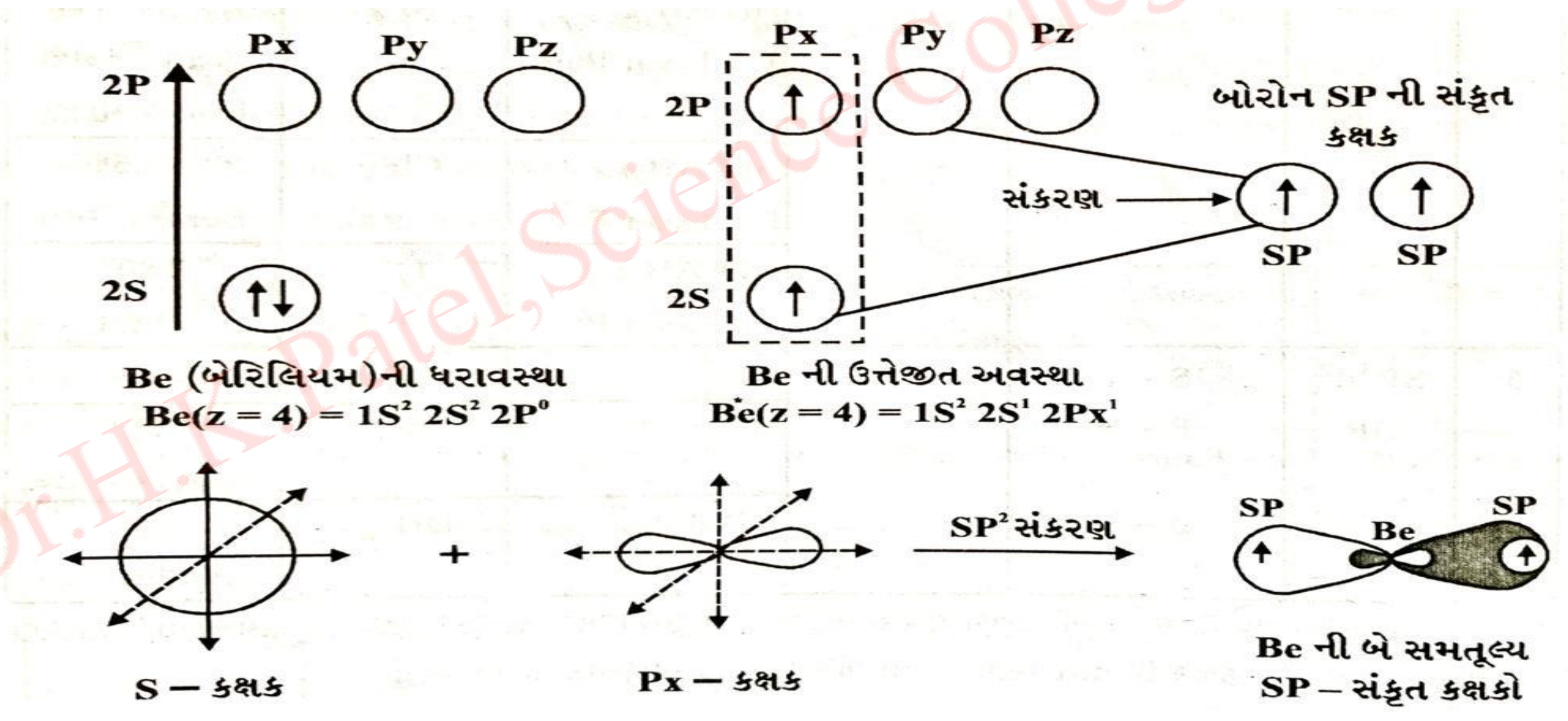
Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

Regions of Electron Density	Arrangement		Hybridization	
2		linear	*sp*	
3		trigonal planar	sp^2	
4		tetrahedral	sp^3	
5		trigonal bipyramidal	sp^3d	
6		octahedral	sp^3d^2	

Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

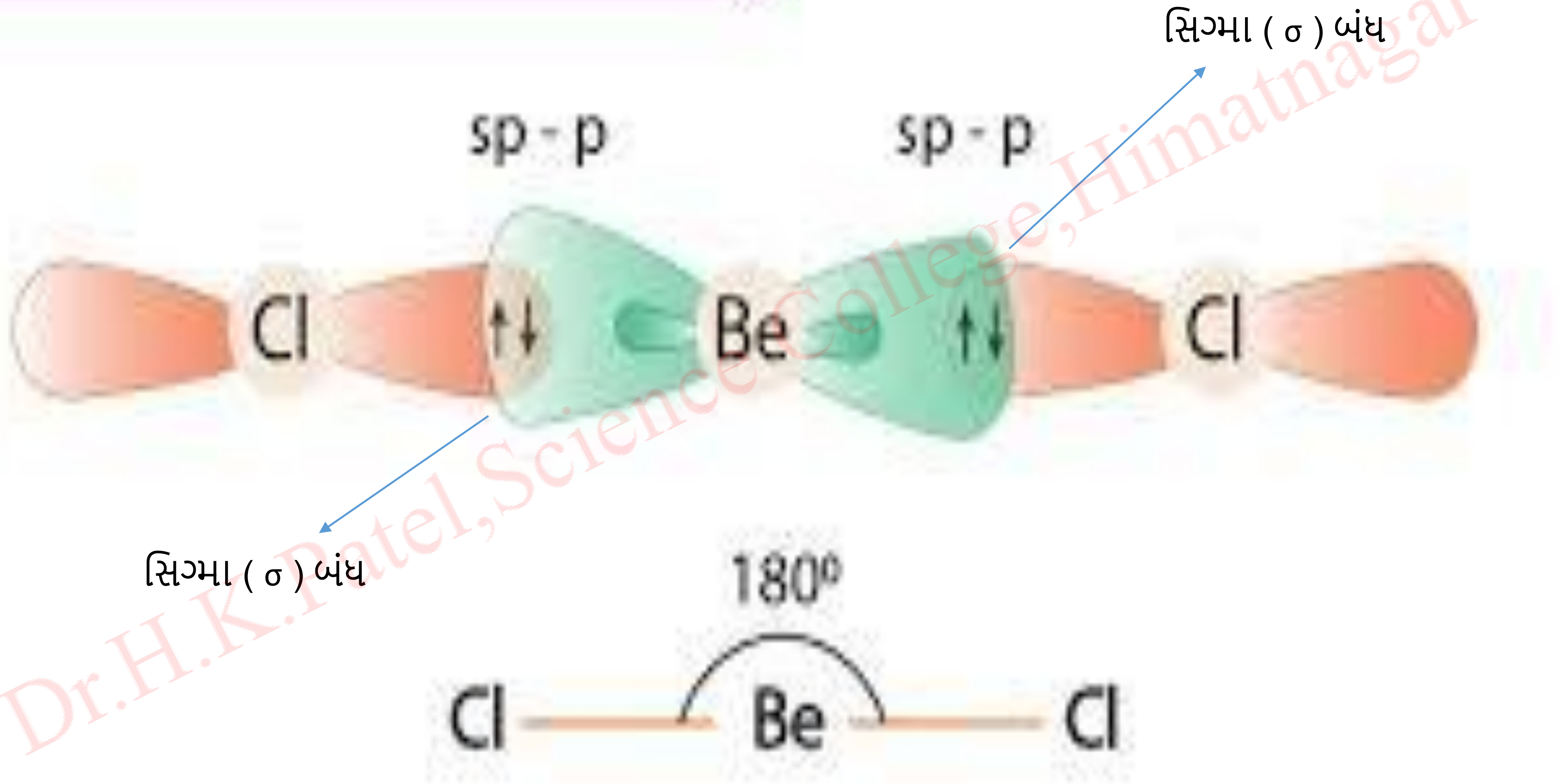
SP સંકરણ

- જયારે કોઈ પરમાણુની એક S અને એક P કક્ષક સંકરણ અનુભવે છે ત્યારે સમાન આકાર તથા ઉર્જા વળી બે સંતુલ્ય SP સંકૃત કક્ષકો પ્રાપ્ત થાય છે આ બે સંકૃત કક્ષકો વચ્ચે અપાકર્ષણ થતું હોવાથી તે રેખીય રીતે 180° ના ખૂણે અવકાશમાં ગોઠવાય છે. માટે કહી શકાય કે જે અણુઓમાં SP સંકરણ જોવા મળતું હોય તેનો આકાર રેખીય જ હોય.
- દા.ત $BeCl_2$ (Be (z=4) : $1S^2$ $\underline{2S^2\ 2Px^0\ 2Py^0\ 2Pz^0}$)



Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

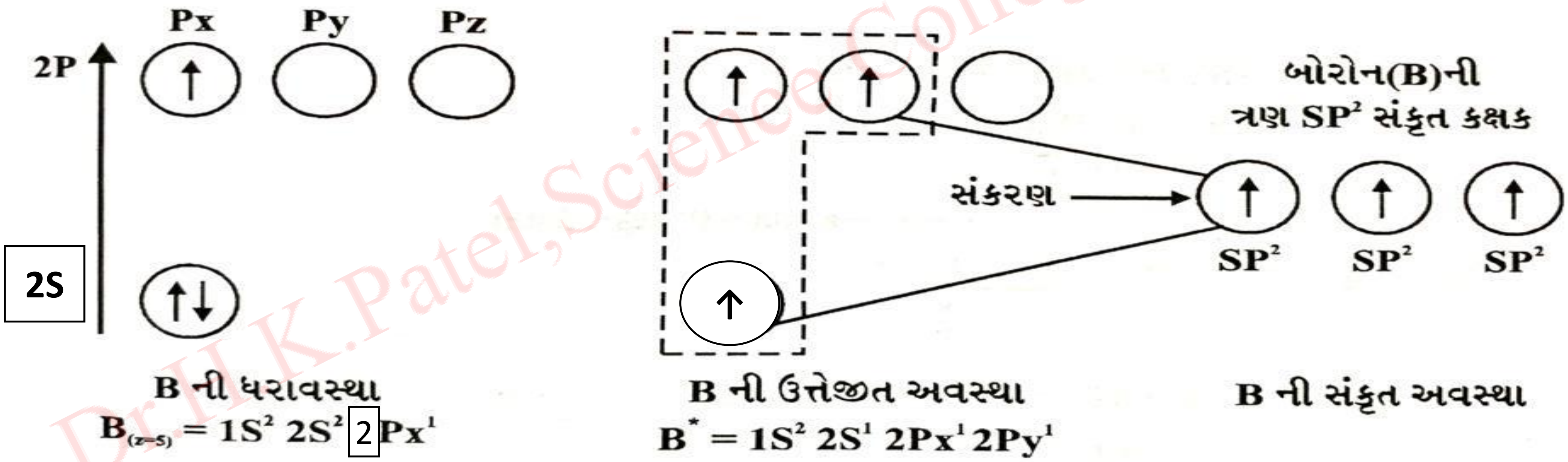
HYBRIDIZATION OF $BeCl_2$



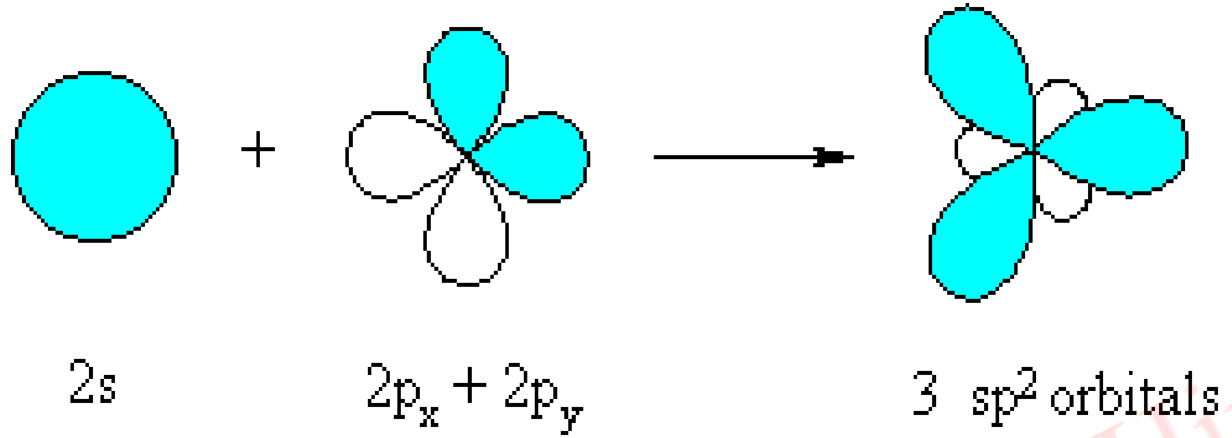
Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

SP^2 સંકરણ

- જયારે કોઈ પરમાણુની એક s અને બે P કક્ષક સંકરણ અનુભવે છે ત્યારે સમાન આકાર તથા ઉર્જા વળી ત્રણ સંતુલ્ય SP^2 સંકૃત કક્ષકો પ્રાપ્ત થાય છે આ ત્રણ સંકૃત કક્ષકો વચ્ચે અપાકર્ષણ થતું હોવાથી તે ત્રિકોણના ત્રણ ખૂણા પર ગોઠવાય છે અને તે 120° ના ખૂણે અવકાશમાં ગોઠવાય છે. માટે કહી શકાય કે જે અણુઓમાં SP^2 સંકરણ જોવા મળતું હોય તેનો આકાર સમતલીય ત્રિકોણ જ હોય.
- દા.ત BCl_3 (B (Z=5) $1S^2$ $2S^2\ 2Px^1\ 2Py^0 2Pz^0$)

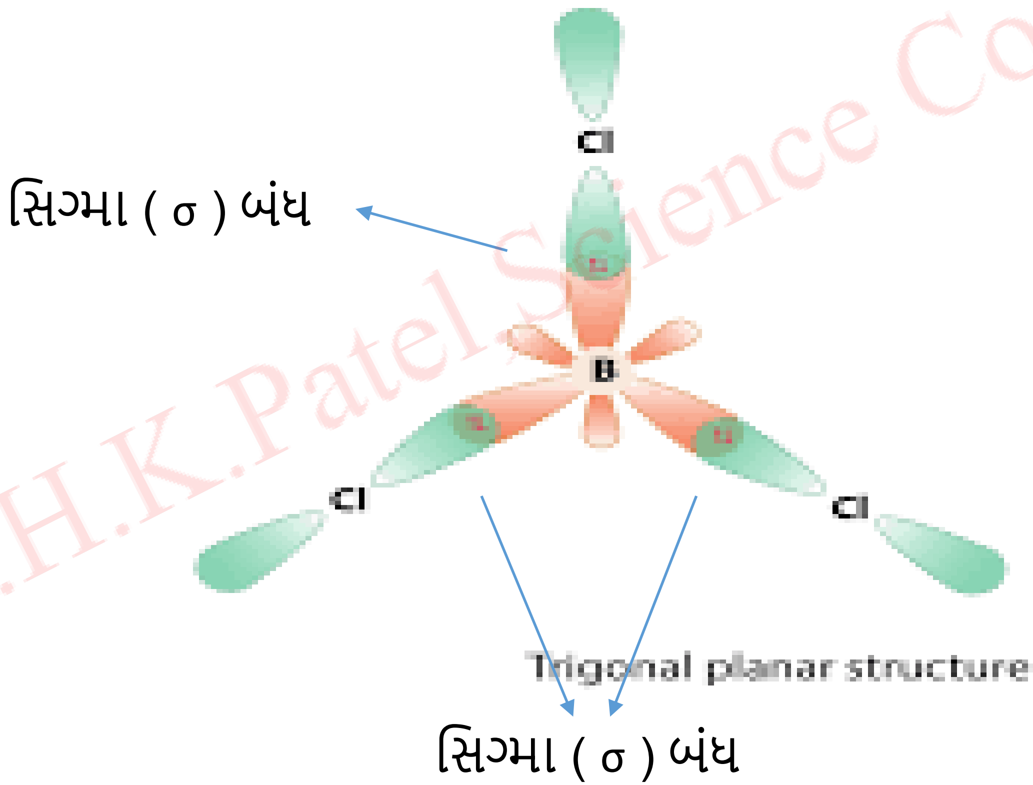


Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

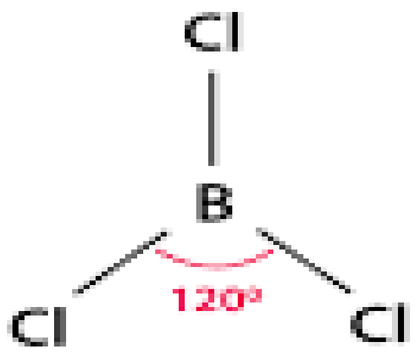


Hybridization of BCl_3

$_{17}Cl$: $1S^2\ 2S^2\ 2P^6\ 3S^2\ 3Px^2\ 3Py^2\ 3Pz^1$



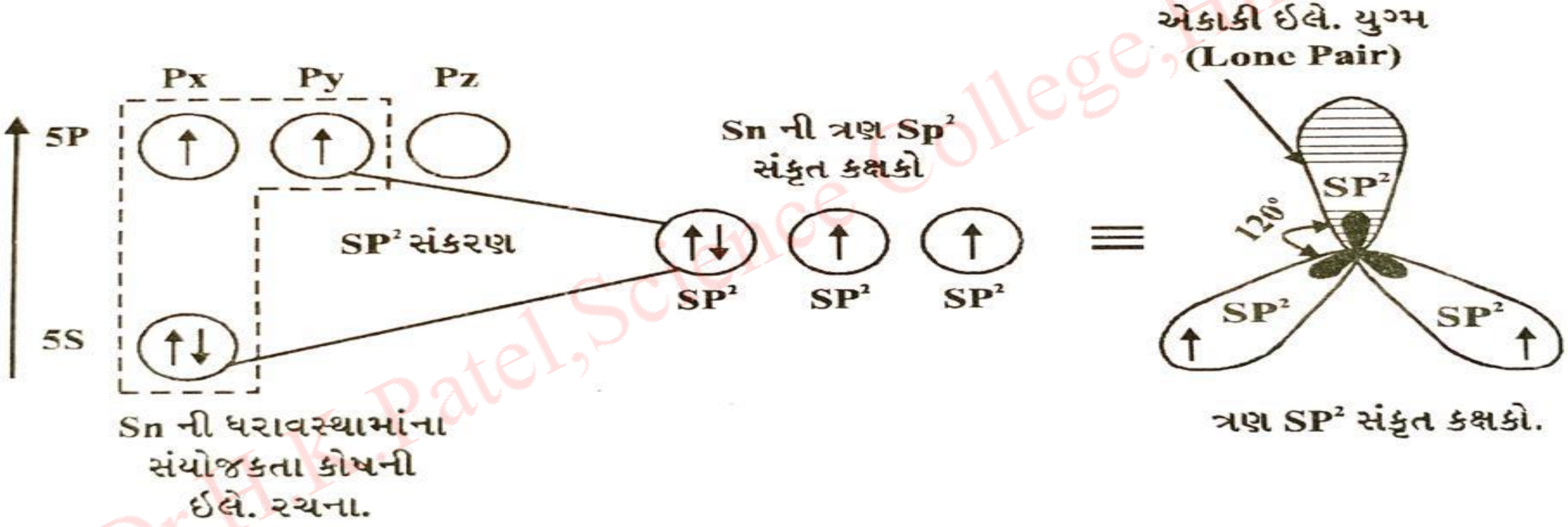
Trigonal planar structure of BCl_3



Dr.H.K.Patel Science College, Himatnagar

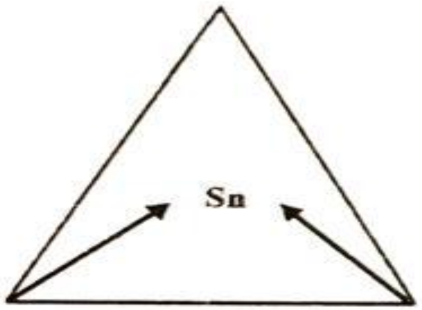
- દા.ત $SnCl_2$ Sn (Z=50) [Kr]$_{36}$ 4d^{10} 5S^2 5Px^1 5Py^1 5Pz^0

- $SnCl_2$ અણુમાં બે Sn – Cl સહસંયોજક σ-બંધ આવેલા હોય છે.
- $SnCl_2$ અણુમાં ભૂમિ અવસ્થામાં બે અયુગ્મિત ઈલે. ધરાવે છે માટે તેને ઉત્તેજિત અવસ્થામાં આવવાની જરૂર નથી.
- $SnCl_2$ અણુમાં બે B.P અને એક L.P હોવાથી બંધકોણ 120° ન રહેતા < 120° રહે છે.

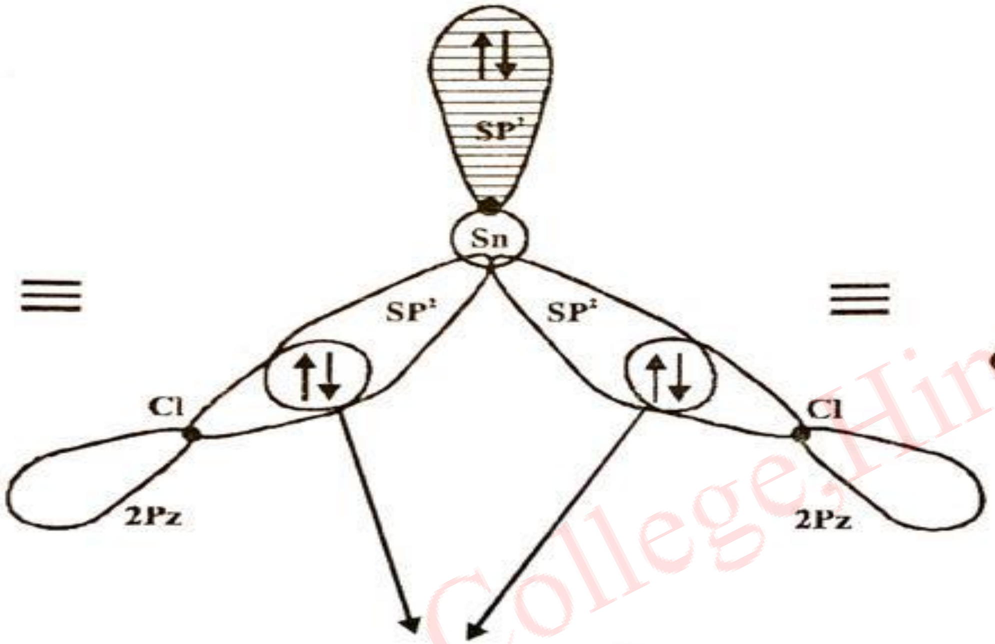


$Cl_{(z=17)}$: $[Ne]_{10}\ 3S^2\ 3Px^2\ 3Py^2\ 3Pz^1$

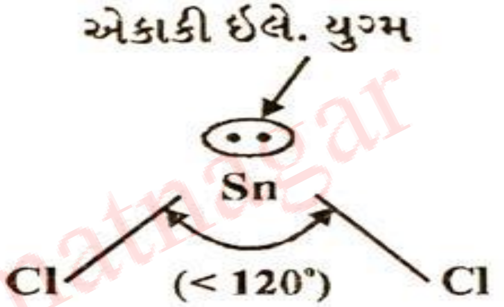
Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar



≡



≡



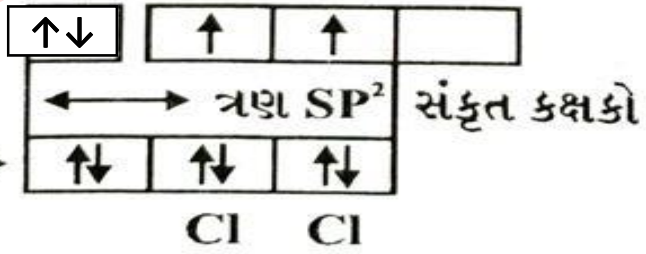
* $SnCl_2$ અણુ
* સંકરણ SP^2
* આકાર : કોણીય or V
* બંધકોણ : < 120°

$SP^2 - 2\ Pz$ અતિવ્યાપનને કારણે બનતા બે σ - બંધ

$Cl_{(z=17)}$: $[Ne]_{10}$ $3S^2$ $3Px^2$ $3Px^2$ $3Py^2$ $3Py^1$

$Sn_{(z=50)}$: $[kr]_{36}$ $4d^{10}$ $5S^2$ $5Px^1$ $5Py^1$ $5Pz^0$

$SnCl_2$ અણુ : →



Dr.H.K Patel,Science College,Himatnagar

પ્રશ્ન : $SnCl_2$ તથા BCl_3 માં સમાન સંકરણ હોવા છતાં આકાર અલગ છે સમજાવો

SP^3 સંકરણ

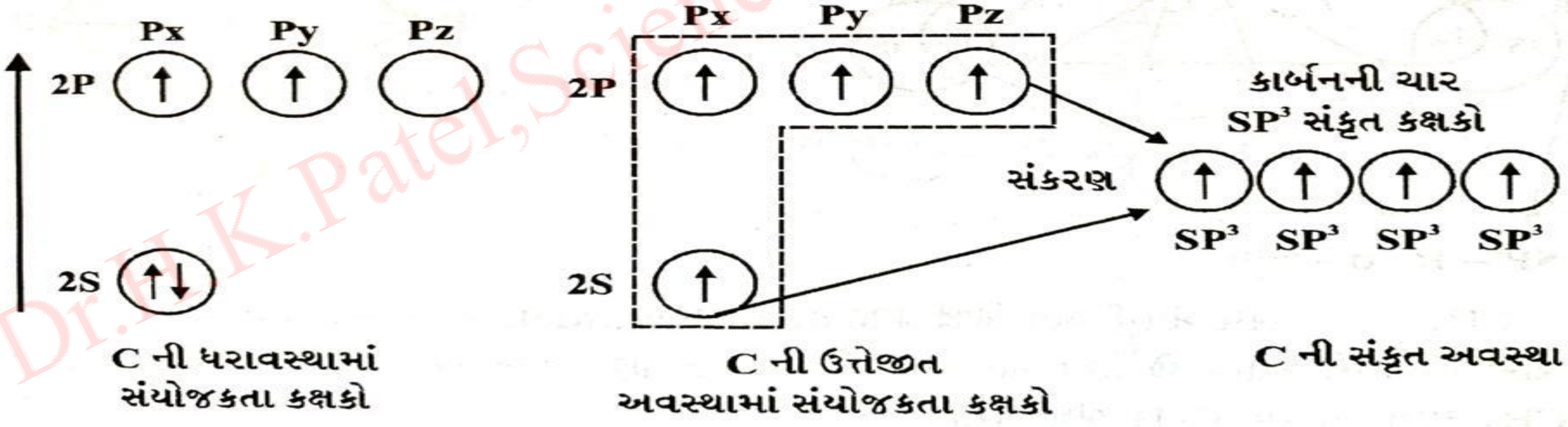
- જયારે કોઈ પરમાણુની એક S અને ત્રણ P કક્ષક સંકરણ અનુભવે છે ત્યારે સમાન આકાર તથા ઉર્જા વળી ચાર સંતુલ્ય SP^3 સંકૃત કક્ષકો પ્રાપ્ત થાય છે આ ચાર સંકૃત કક્ષકો વચ્ચે અપાકર્ષણ થતું હોવાથી તે સમચતુષફલક ના ચાર ખૂણા પર ગોઠવાય છે અને તે 109° 28' ના ખૂણે અવકાશમાં ગોઠવાય છે અને તેનો આકાર નિયમિત સમચતુષફલકીય બને છે.

CH_4 અણુમાં સંકરણ

$C_{(z=6)}$: $1S^2$ $2S^2$ $2Px^1$ $2Py^1$ $2Pz^0$ (ધરાવસ્થા)

$C^*_{(z=6)}$: $1S^2$ $2S^1$ $2Px^1$ $2Py^1$ $2Pz^1$ (ઉત્તેજીત અવસ્થા)

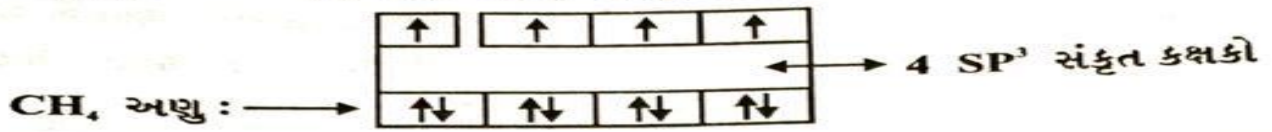
(નોંધ : સંકરણ દર્શાવવા સંયોજકતા કક્ષામાંની કક્ષકો જ દર્શાવેલ છે.)

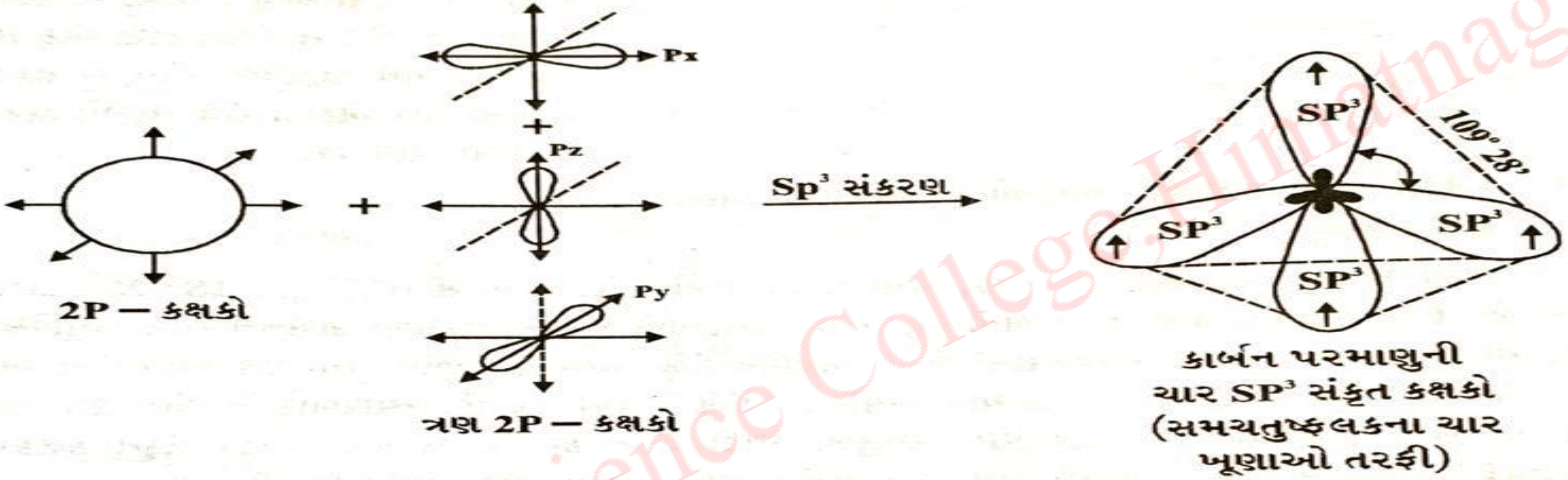


Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

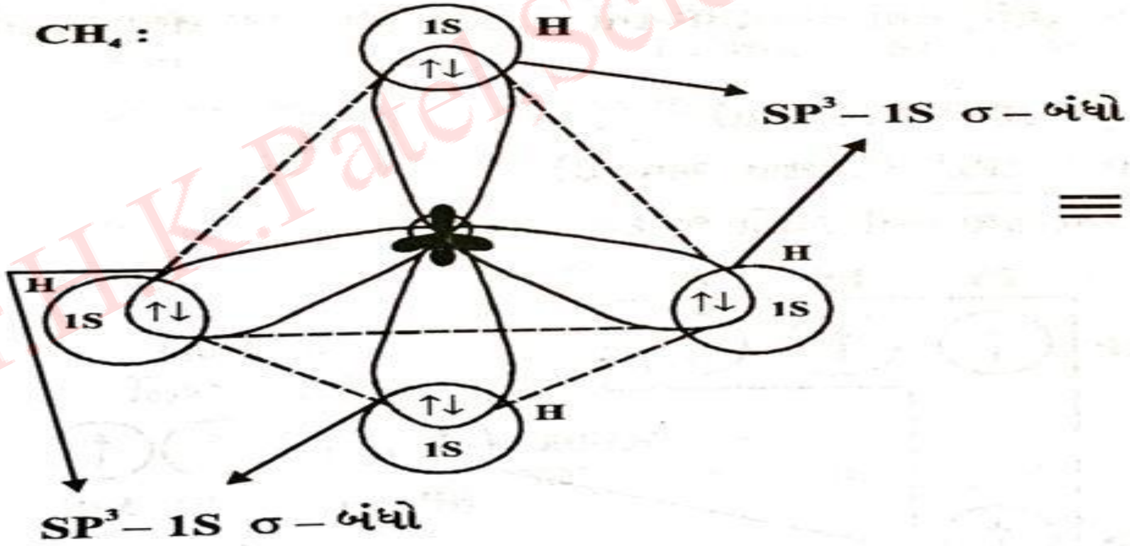
$H_{(z=1)}$: $1S^1$

$C^*_{(z=6)}$: $1S^2$ $2S^1$ $2Px^1$ $2Py^1$ $2Pz^1$

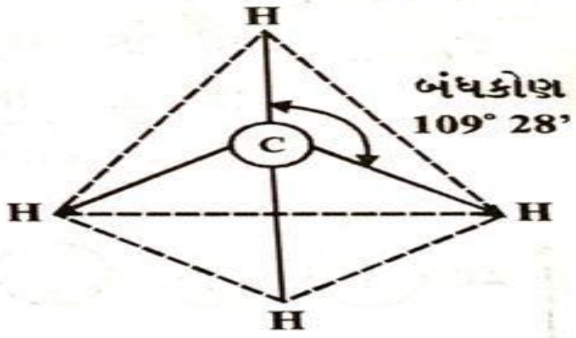




CH_4 :



≡



CH_4 અણુ

Dr.J.K.Patel Science College,Himatnagar

- BH_4^- તથા NH_4^+ આયનમાં SP3 સંકરણ

BH_4^- અને NH_4^+ આયનનો આકાર :

BH_4^- ઋણ આયન : આ આયન પણ CH_4 અણુની માફક SP^3 સંકરણ દર્શાવે છે. બોરોન પરમાણુ પર એક ઋણ વીજભાર આવવાથી તેના ઈલેક્ટ્રોન વિન્યાસમાં નીચે મુજબનો ફેરફાર થાય છે.

$B^*_{(z=5)}$: $1S^2\ 2S^1\ 2Px^1\ 2Py^1\ 2Pz^0$

B^- : $1S^2\ \underbrace{2S^1\ 2Px^1\ 2Py^1\ 2Pz^1}_{SP^3 \text{ સંકરણ}}$ $(\because\ B + e^- \rightarrow B^-)$

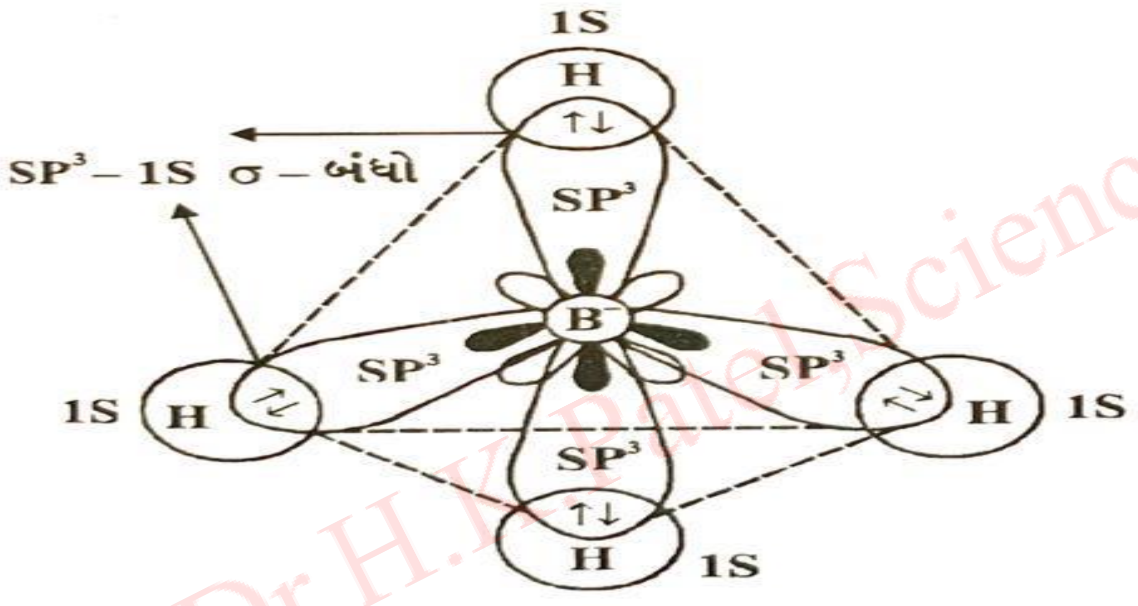
આથી SP^3 સંકરણ દ્વારા તેના ચાર B^-–H બંધોને સરળતાથી સમજાવી શકાય છે, તથા અણુનો આકાર **સમચતુષ્ફલક** જોવા મળે છે.

Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

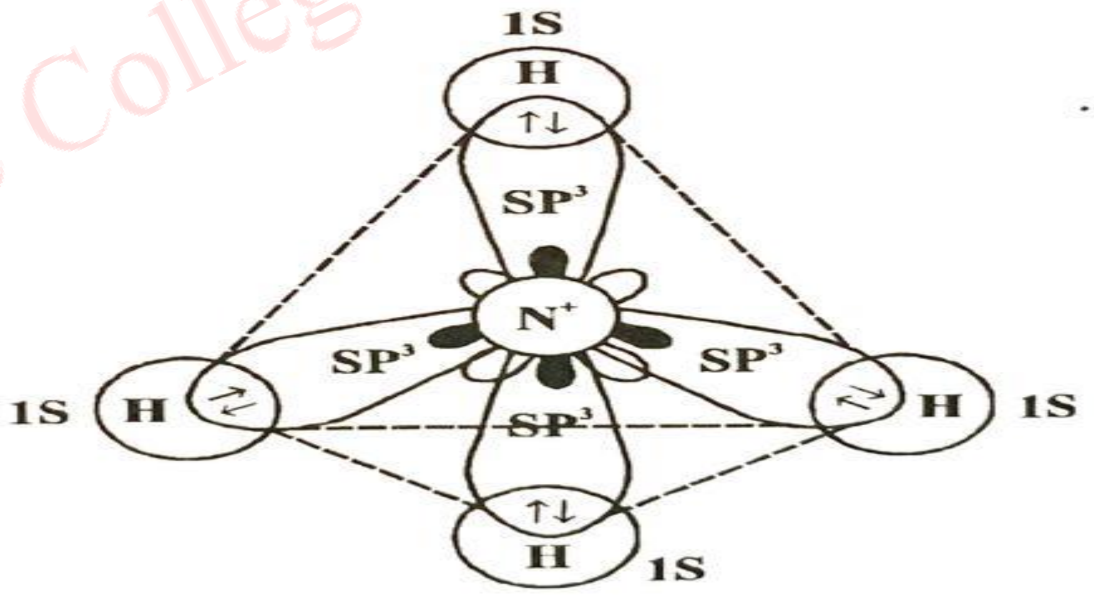
NH_4^+ ધન આયન : આ આયન પણ CH_4 ની માફક SP^3 સંકરણ દર્શાવશે. નાઈટ્રોજન પરમાણુ પર એક ધનવીજભાર આવવાથી તે કાર્બન જેવો ઈલે. વિન્યાસ ધારણ કરે છે, તથા SP^3 સંક્રમણ અનુભવી CH_4ની માફક સમચતુષ્ફલકીય આકાર ધરાવશે, તથા બંધકોણ $109^\circ 28'$ દર્શાવે છે.

$N_{(z=7)}$	:	$1S^2$	$2S^2$	$2Px^1$	$2Py^1$	$2Pz^1$
N^+	:	$1S^2$	$2S^1$	$2Px^1$	$2Py^1$	$2Pz^1$
$*N^+$	:	$1S^2$	$2S^1$	$2Px^1$	$2Py^1$	$2Pz^1$

SP^3



BH_4^- આયન

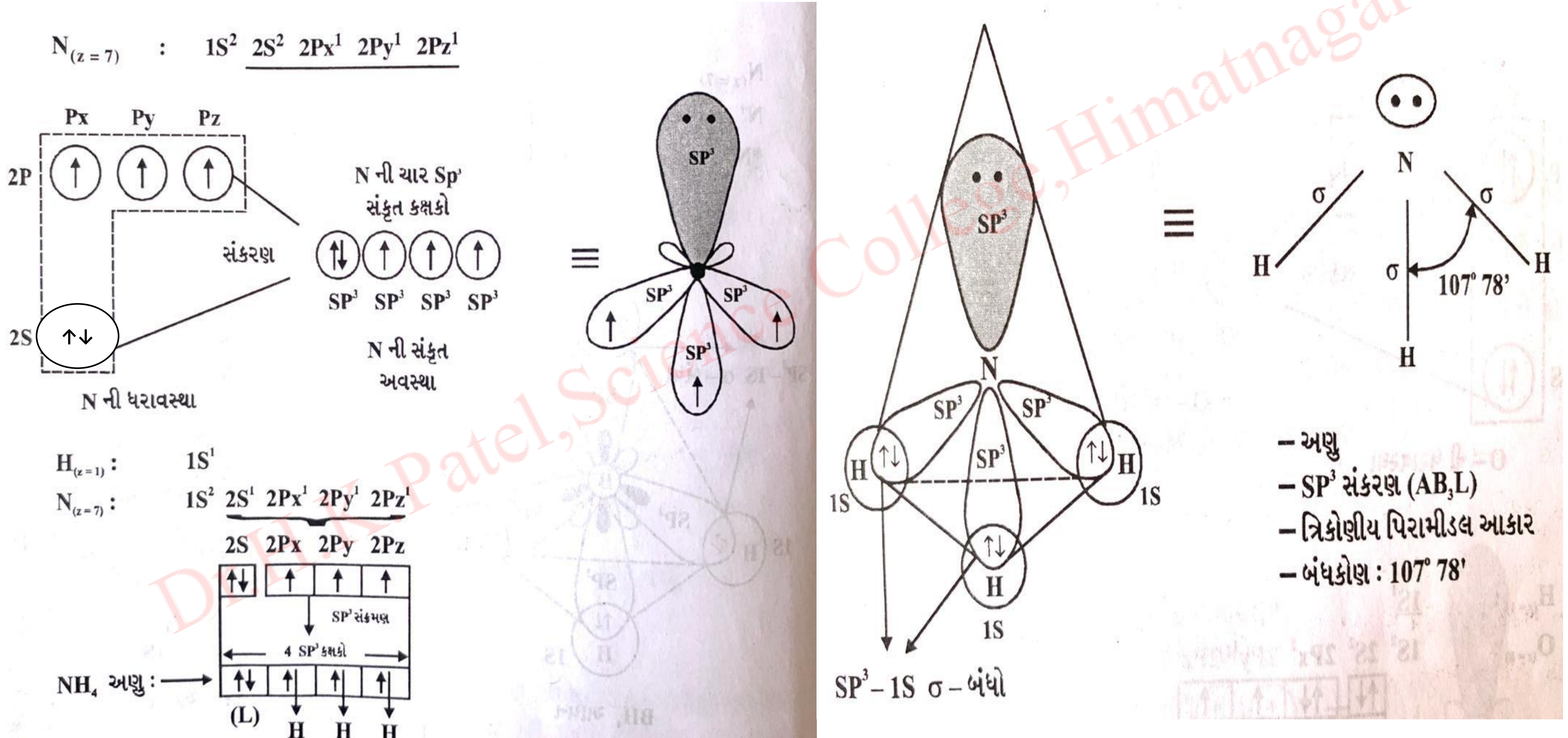


NH_4^- આયન

Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

▪ NH_3 અણુમાં SP^3 સંકરણ

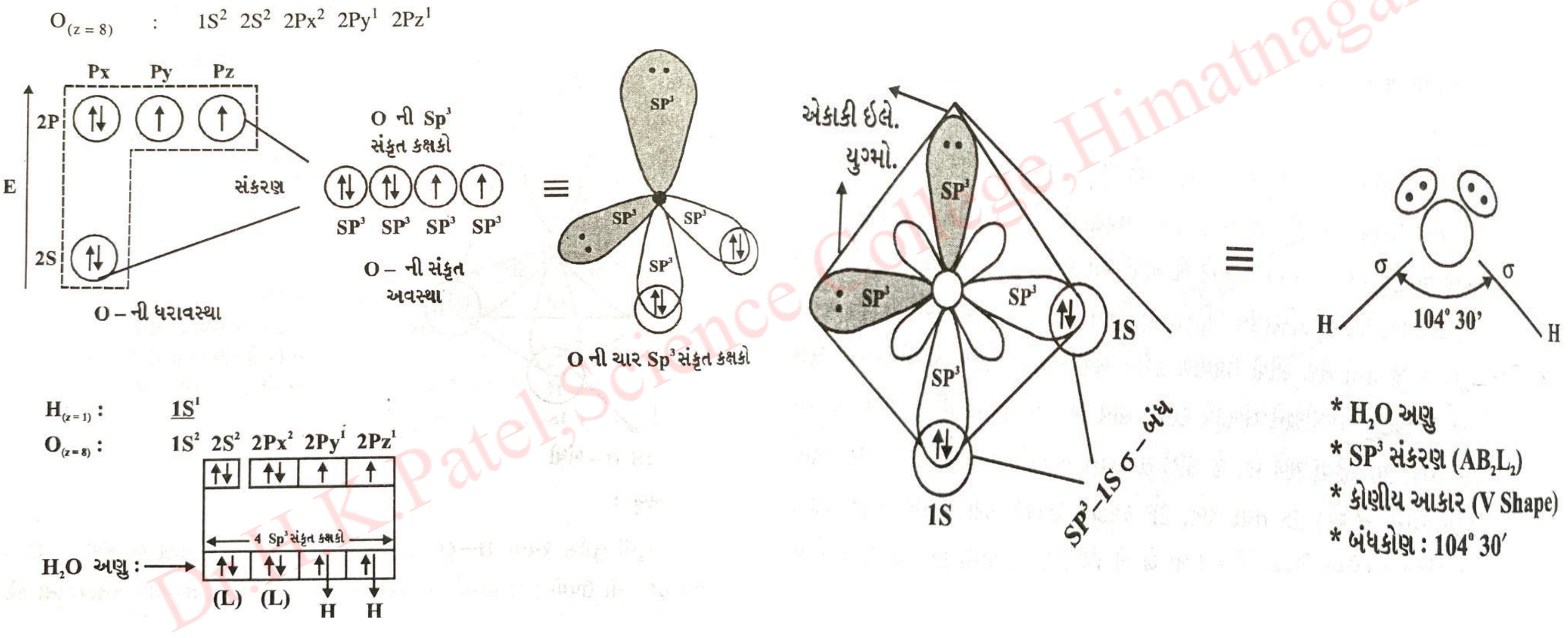
➢ **આ અણુમાં ત્રણ B.P અને એક L.P આવેલ છે તેથી** બંધકોણ 109° 28’ ન રહેતા 107°78’ રહે છે.



Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

▪ H_2O અણુમાં SP^3 સંકરણ

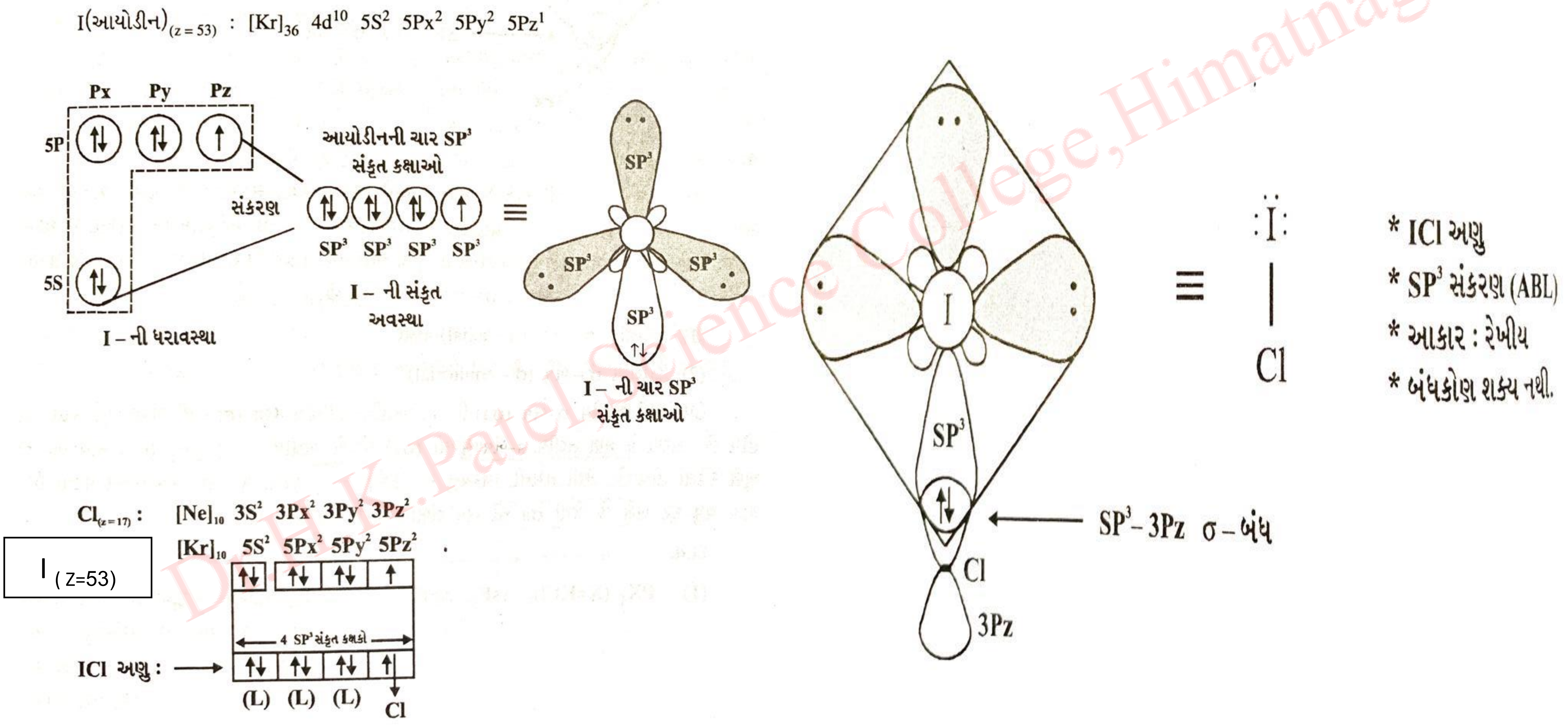
➢ **આ અણુમાં બે B.P અને બે L.P આવેલ છે તેથી** બંધકોણ 109° 28’ ન રહેતા 104°30’ રહે છે.



Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

▪ ICl અણુમાં SP^3 સંકરણ

➢ **ICl અણુનો આકાર SP^3 સંકરણ હોવા છતાં** સમચતુષ્ફલકીય ને બદલે **રેખીય છે.**
➢ **આ અણુમાં એક** B.P અને ત્રણ L.P હોવાથી અણુ **રેખીય છે.**



Dr.H.K.Patel Science College,Himatnagar

SP^3d સંકરણ

- જયારે કોઈ પરમાણુની એક s , ત્રણ P તથા એક d કક્ષક સંકરણ અનુભવે છે ત્યારે સમાન આકાર તથા ઉર્જા વળી પાંચ સંતુલ્ય SP^3d સંકૃત કક્ષકો પ્રાપ્ત થાય છે આ પાંચ સંકૃત કક્ષકો વચ્ચે અપાકર્ષણ થતું હોવાથી તે ત્રિકોણીય દ્વિપીરામીડલ આકારમાં ગોઠવાય છે અને તેમની વચ્ચેનો બંધકોણ 120° તથા 90 °મળે છે.

- અહી SP^3d સંકરણ અનુભવાતા અણુઓમાં બે પ્રકારના σ –બંધ જોવા મળે છે.

  (૧) અક્ષીય σ –બંધ (σ –axil)

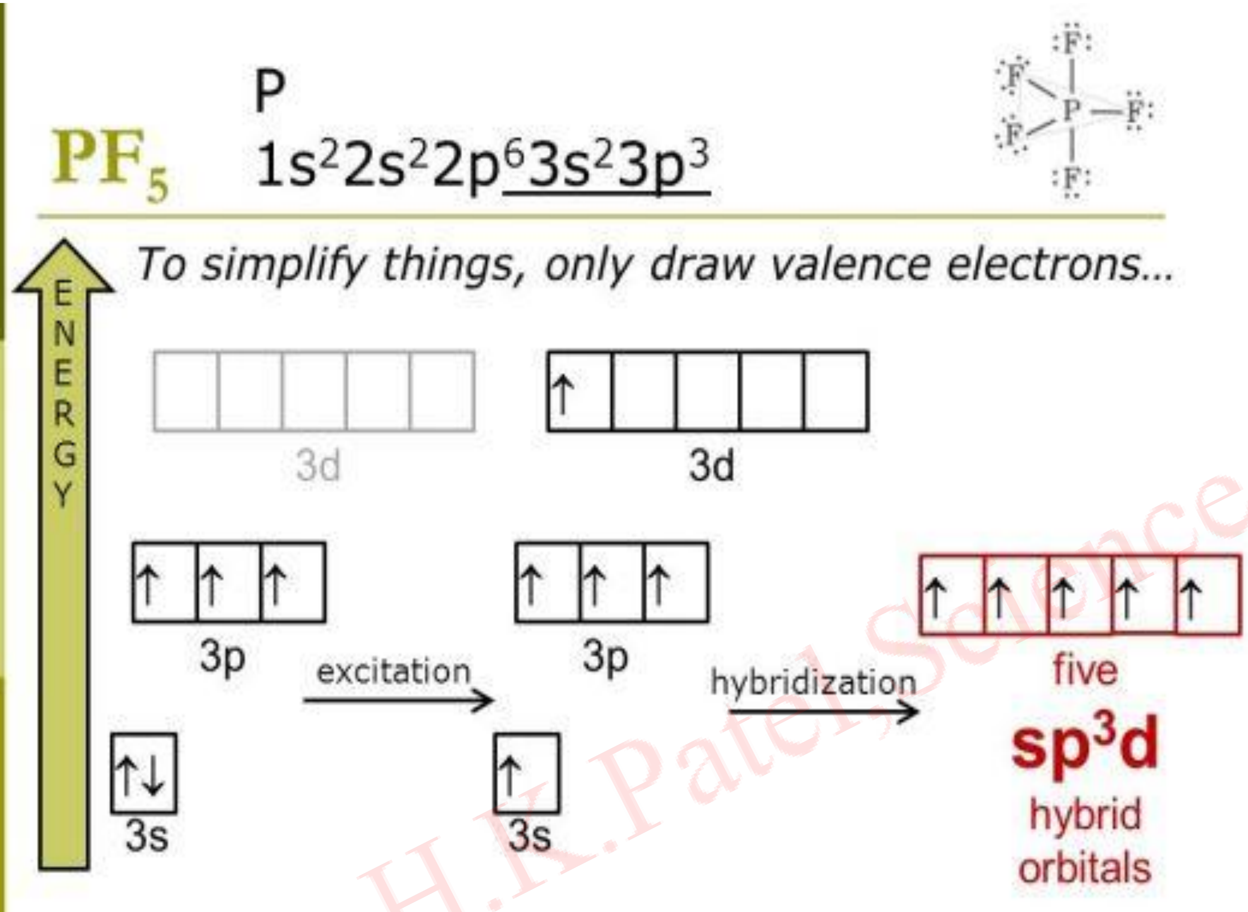
  (૨) તલીય σ –બંધ (σ –equitorial)

- બે અક્ષીય σ –બંધ ની લંબાઈ એ ત્રણ તલીય σ –બંધ લંબાઈ કરતા વધુ હોય છે.
- બે અક્ષીય σ –બંધ વચ્ચે નો બંધ કોણ 180° હોય છે.
- ત્રણ તલીય σ –બંધ વચ્ચે નો બંધ કોણ 120° હોય છે.
- અક્ષીય અને તલીય σ –બંધ વચ્ચે નો બંધ કોણ 90° હોય છે.

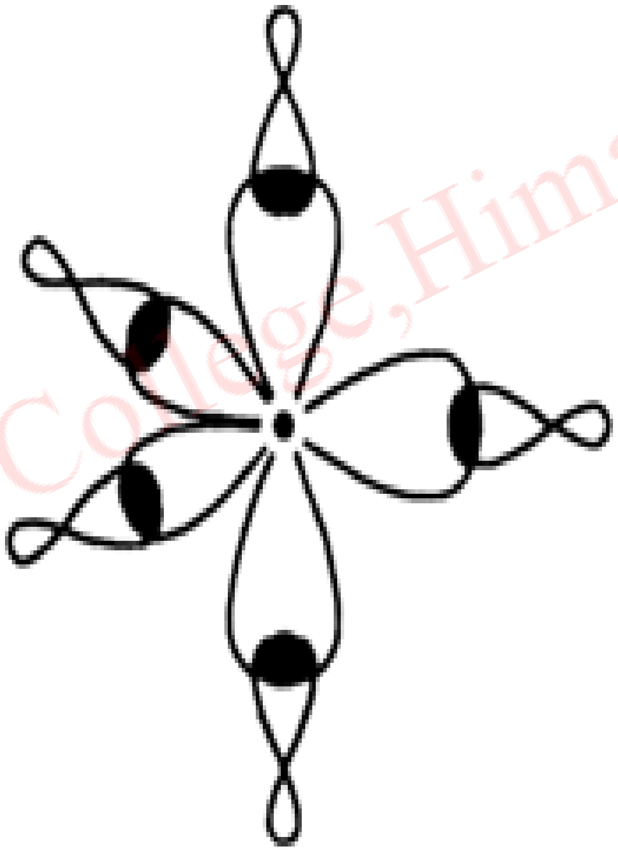
Dr.H.K.Patel Science College,Himatnagar

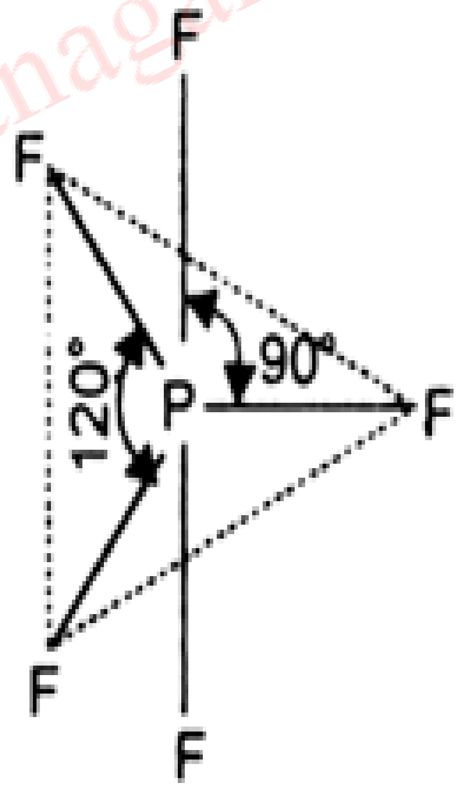
▪ PF_5 અણુમાં SP^3d સંકરણ

P(z=15) : $[Ne]_{10}$ $\underline{3S^2\ 3Px^1\ 3Py^1\ 3Pz^1}$



ભૂમિ અવસ્થા ઉત્તેજિત અવસ્થા



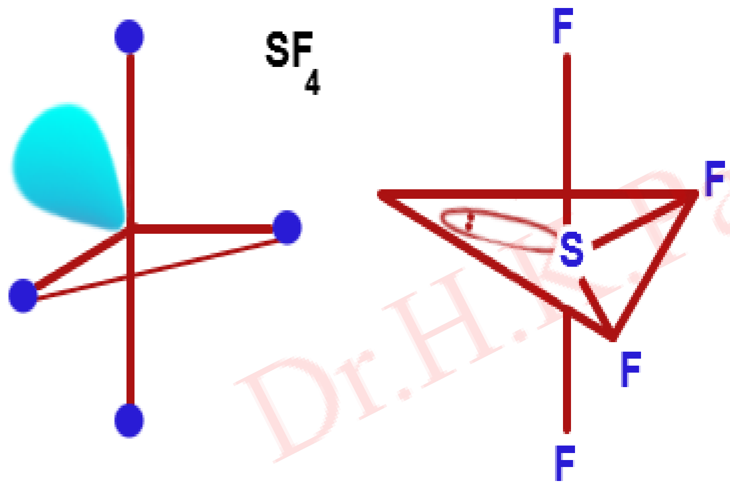


Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

▪ SF_4 અણુમાં sp^3d સંકરણ

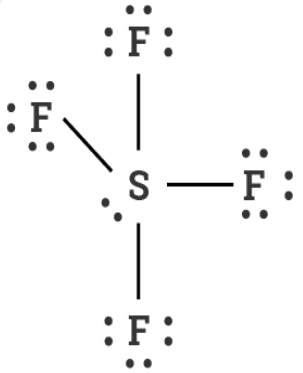
S (z=16) : $[Ne]_{10}$ $3S^2$ $3Px^2$ $3Py^1$ $3Pz^1$

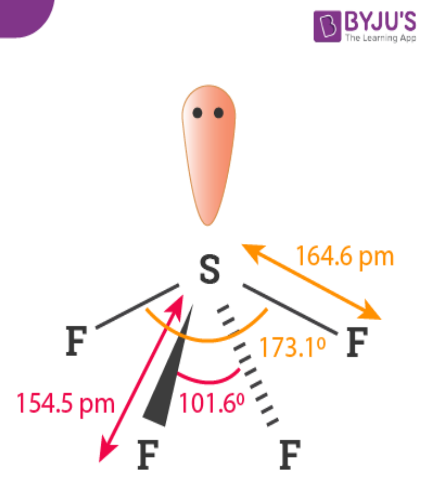
	$3S^2$	$3Px^2$	$3Py^1$	$3Pz^1$	3d				
S ની ઈલે. રચના ભૂમિ અવસ્થામાં	↑↓	↑↓	↑	↑					
S ની ઈલે. રચના ઉત્તેજિત અવસ્થામાં	↑↓	↑	↑	↑	↑				
SF_4 અણુની સંકૃત કક્ષકો	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓				
	L.P	F	F	F	F				

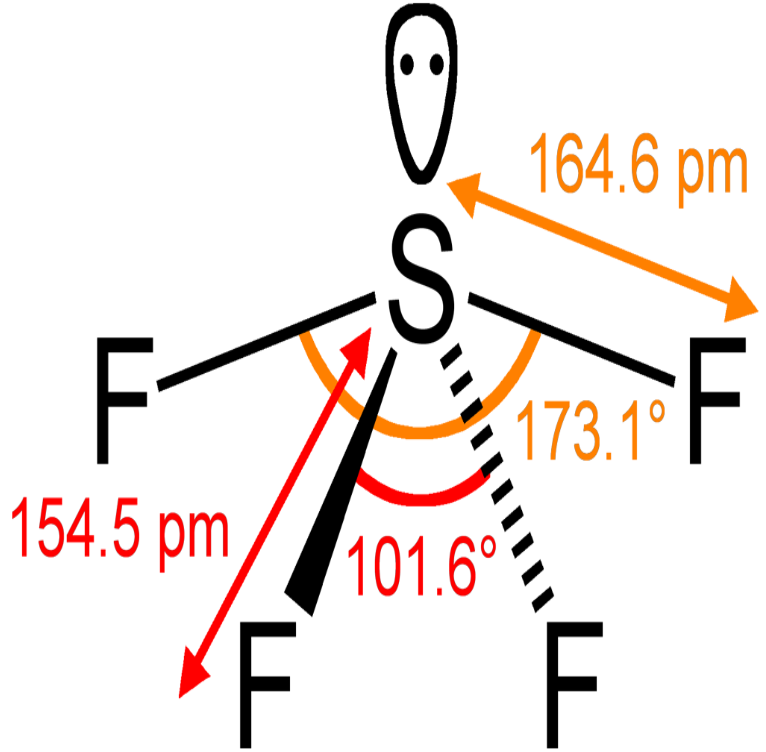


SP³d - hybridization

Hybridization of SF_4







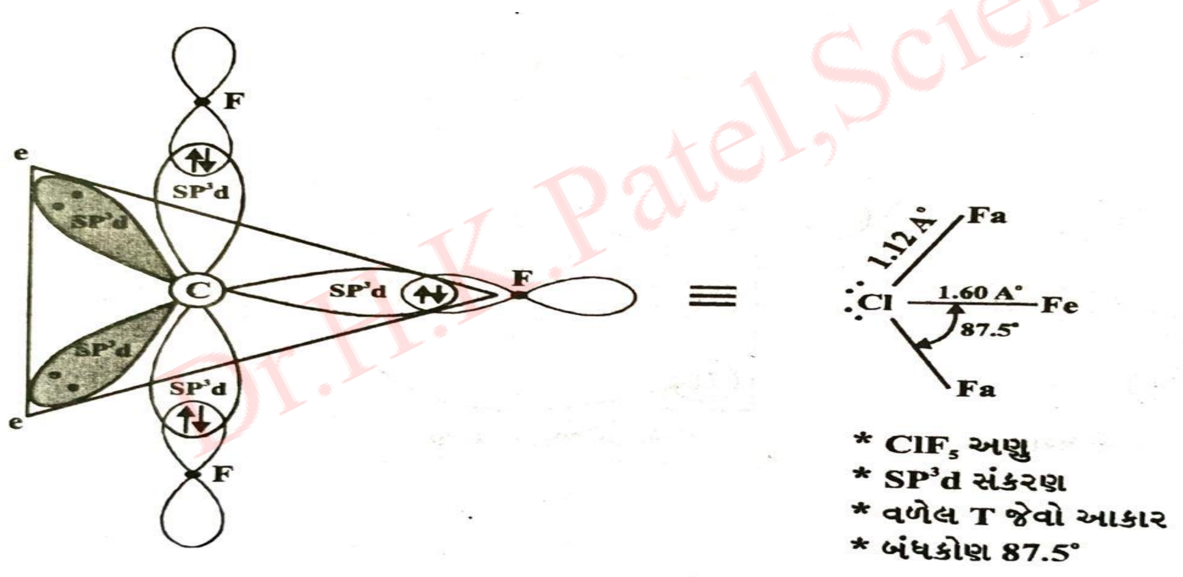
Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

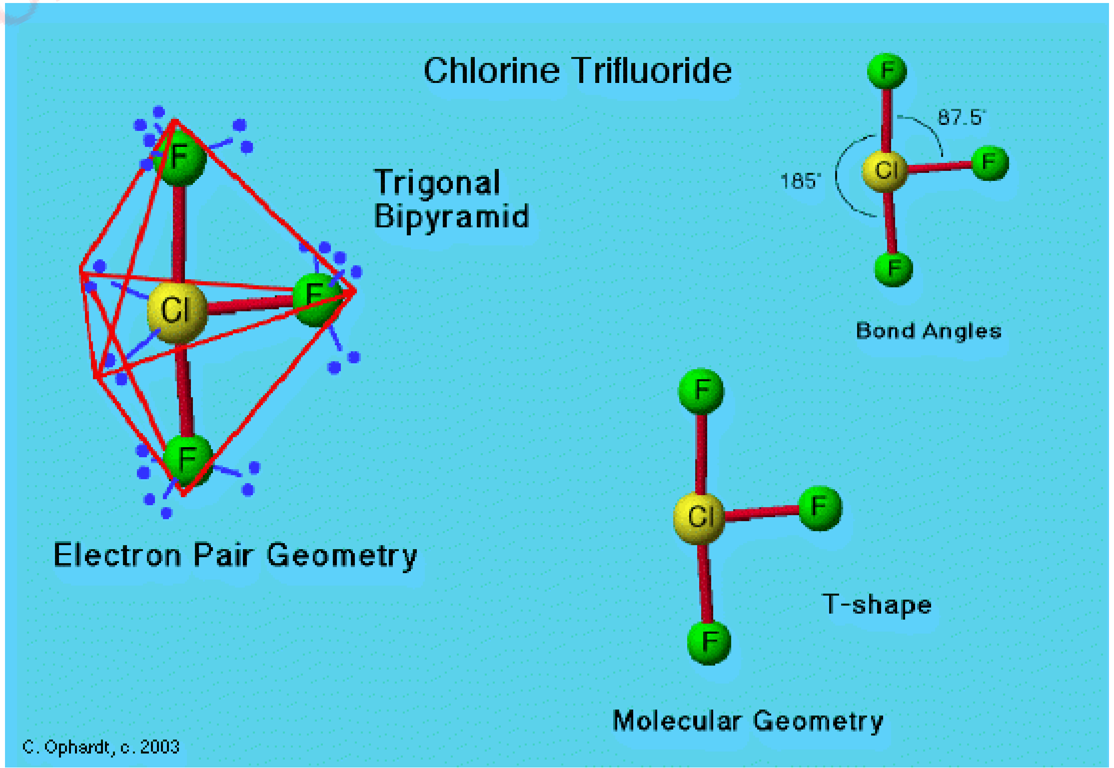
▪ ClF_3 અણુમાં SP^3d સંકરણ

Cl (z=17) : $[Ne]_{10}$ $3S^2$ $3Px^2$ $3Py^2$ $3Pz^1$

	$3S^2$	$3Px^2$	$3Py^2$	$3Pz^1$	3d				
Cl ની ઈલે. રચના ભૂમિ અવસ્થામાં	↑↓	↑↓	↑↓	↑					
Cl ની ઈલે. રચના ઉત્તેજિત અવસ્થામાં	↑↓	↑↓	↑	↑	↑				

ClF_3 અણુની સંકૃત કક્ષકો	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓
	L.P	L.P	F	F	F





Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

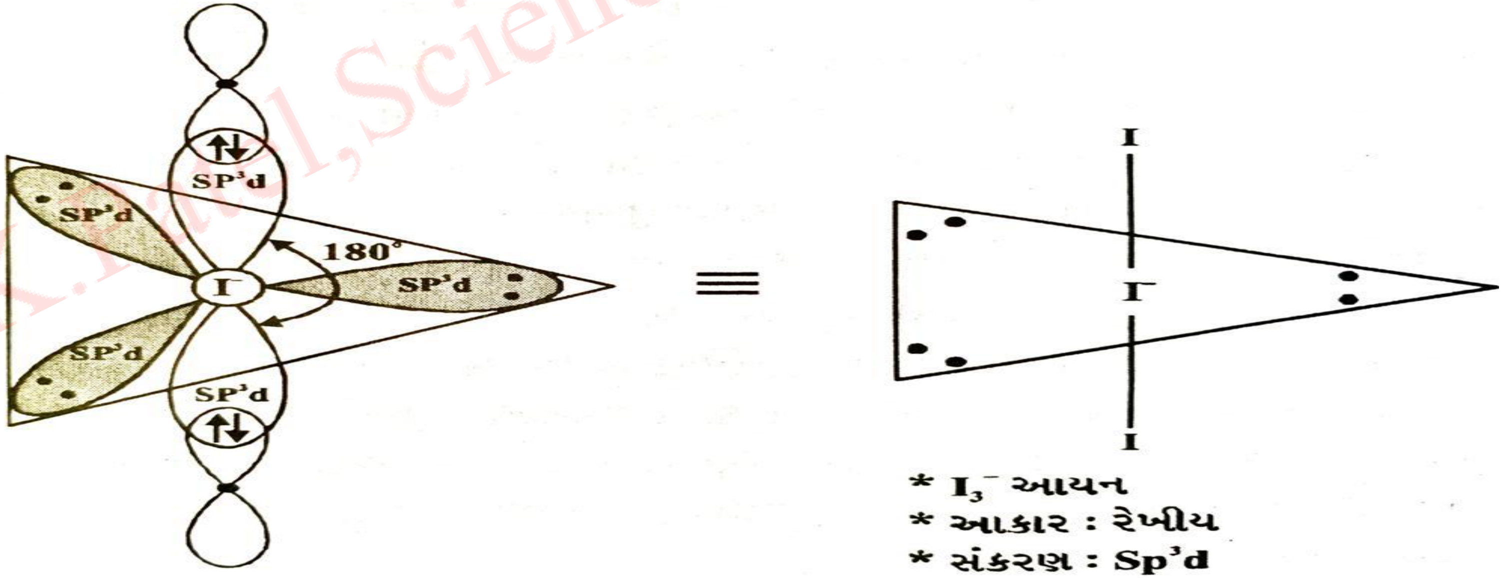
▪ I_3^- આયનમાં SP^3d સંકરણ

I (z=53) : $[Kr]_{36}$ $4d^{10}\,5S^2\,5Px^2\,5Py^2\,5Pz^1$ (I + e → I^-)

	$5S^2$	$5Px^2$	$5Py^2$	$5Pz^2$	5d				
I^- ની ઈલે. રચના ભૂમિ અવસ્થામાં	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓					
I^- ની ઈલે. રચના ઉત્તેજિત અવસ્થામાં	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑				

I_3^- આયન (I^- + I = I_3^-)

↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓
L.P	L.P	L.P	F	F



* I_3^- આયન
* આકાર : રેખીય
* સંકરણ : Sp^3d
* બંધકોણ : 180°

Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

SP^3d^2 સંકરણ

- જયારે કોઈ પરમાણુની એક s અને ત્રણ P તથા બે d કક્ષક સંકરણ અનુભવે છે ત્યારે સમાન આકાર તથા ઉર્જા વળી છ સંતુલ્ય SP^3d^2 સંકૃત કક્ષકો પ્રાપ્ત થાય છે આ છ સંકૃત કક્ષકો વચ્ચે અપાકર્ષણ થતું હોવાથી તે અવકાશમાં અષ્ટફલકીય આકારમાં ગોઠવાય છે અને તેમની વચ્ચેનો બંધકોણ 90° જોવા મળે છે.

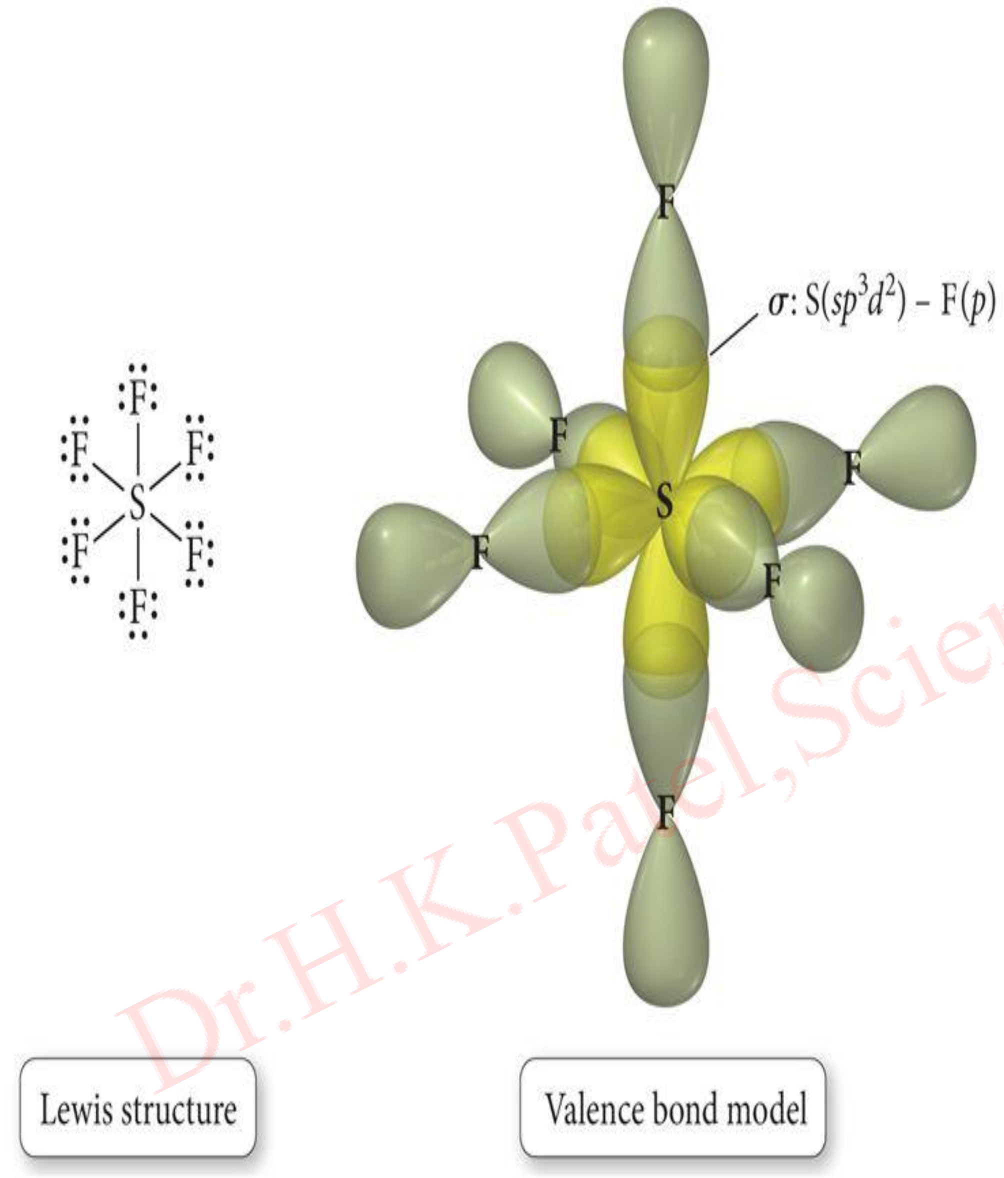
SF_6 અણુમાં SP^3d^2 સંકરણ

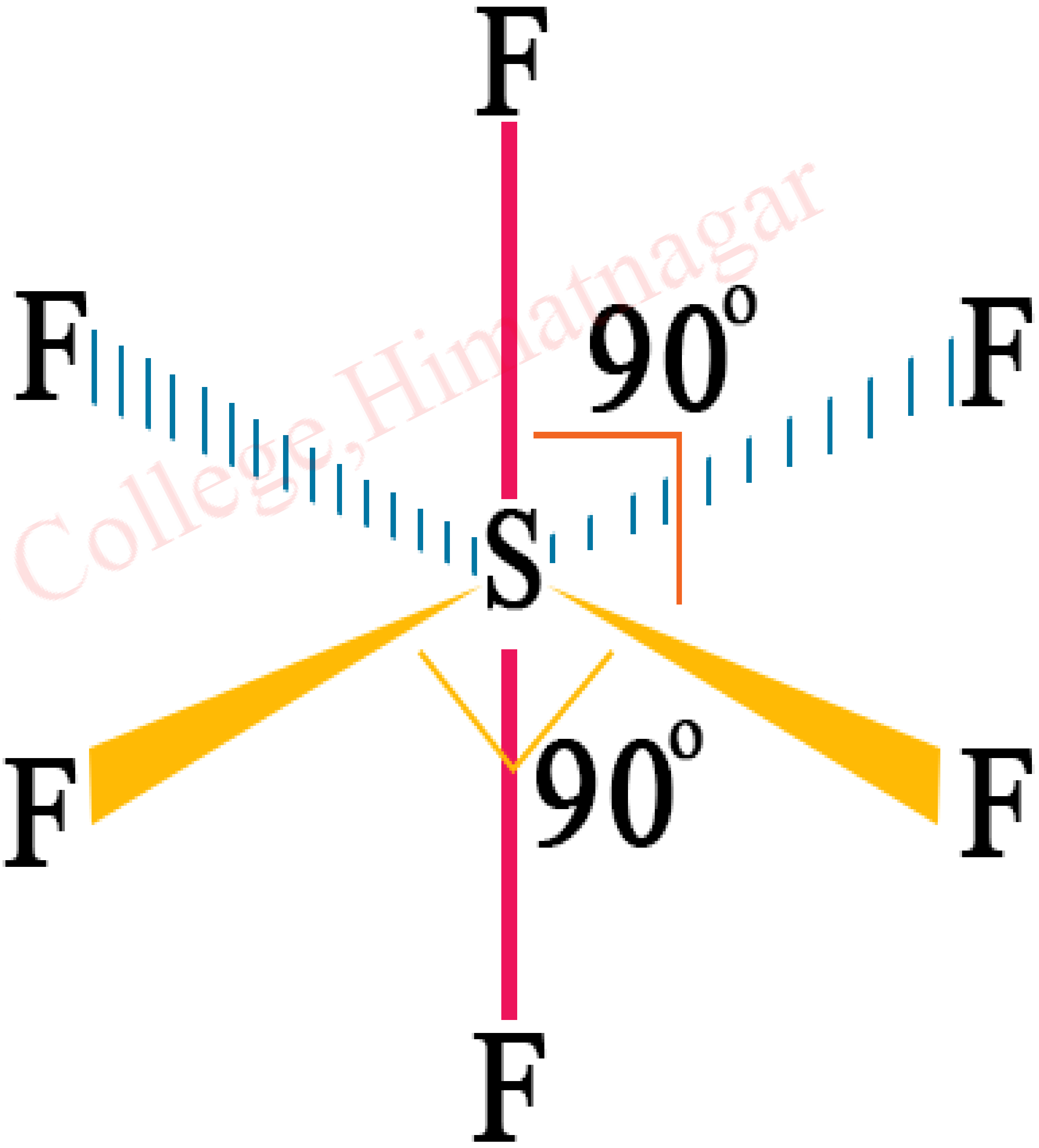
S (z=16) : $[Ne]_{10}$ $3S^2$ $3Px^2$ $3Py^1$ $3Pz^1$

	$3S^2$	$3Px^2$	$3Py^1$	$3Pz^1$	3d				
S ની ઈલે. રચના ભૂમિ અવસ્થામાં	↑↓	↑↓	↑	↑					
S ની ઈલે. રચના ઉત્તેજિત અવસ્થામાં	↑	↑	↑	↑	↑	↑			
SF_6 અણુની સંકૃત કક્ષકો	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓			
	↓ F	↓ F	↓ F	↓ F	↓ F	↓ F			

Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

sp^3d^2 Hybridization for SF_6





Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

© 2013 Pearson Education, Inc.

V.S.E.P.R. Theory (Valence Shell Electron Pair Repulsion Theory)

સંયોજકતા કોષ ઈલેકટ્રોન યુગ્મ અપાકર્ષણ સિધાંત

- આ સિદ્ધાંત બહુપરમાણુંક અણુઓ તથા આયનોના આકાર(ભૂમિતિ) સમજવામાં ઉપયોગી છે.
- આ સિદ્ધાંત ઈ.સ.1940 માં સિઝવિક અને પોવેલ નામના વૈજ્ઞાનિકો એ આપ્યો ત્યારબાદ ઈ.સ.1957 માં ગિલેપ્સી અને નાયહોમ નામના વૈજ્ઞાનિકો એ ફેરફારો કરી આ સિધાંત આપ્યો.
- આ સિદ્ધાંત અનુસાર કોઈપણ અણુ કે આયનનો આકાર(ભૂમિતિ) તેના મધ્યસ્થ પરમાણુની આસપાસ હાજર ઈલે.યુગ્મોની સંખ્યા, તેના પ્રકાર અને તેની વર્તણુક પર આધરિત છે.
- અણુના મધ્યસ્થ પરમાણુની સયોજ્કતા કોષ(બહ્યતમ કોષ)માં હાજર ઈલે.યુગ્મો વચ્ચે થતી આંતર-ક્રિયા એટલેકે અપાકર્ષણ અણુના આકાર માટે જવાબદાર છે.
- સયોજ્કતા કોષ(બહ્યતમ કોષ)માં આવેલ કક્ષકો વચ્ચે અપાકર્ષણ થતું હોવાથી તે ત્રિ-પરિમાણમાં(અવકાશમાં) એવી વ્યવસ્થિત રીતે ગોઠવાય છે કે તેમની વચ્ચે અપાકર્ષણ ઓછામાં ઓછુ અનુભવાય.
- સંયોજ્કતા કોષમાં બે પ્રકારના ઈલે.યુગ્મો જોવા મળે છે. (૧) બંધકારક ઈલે.યુગ્મ (બોન્ડીંગ પેર) B.P (૨) એકાકી ઈલે.યુગ્મ (લોન પેર) L.P

Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

- અણુના મધ્યસ્થ પરમાણુંની સયોજ્કતા કોષ(બહ્યતમ કોષ)માં માત્ર બંધકારક ઈલે.યુગ્મ હોય તો અણુનો આકાર નિયમિત સમીતીય હોય છે.

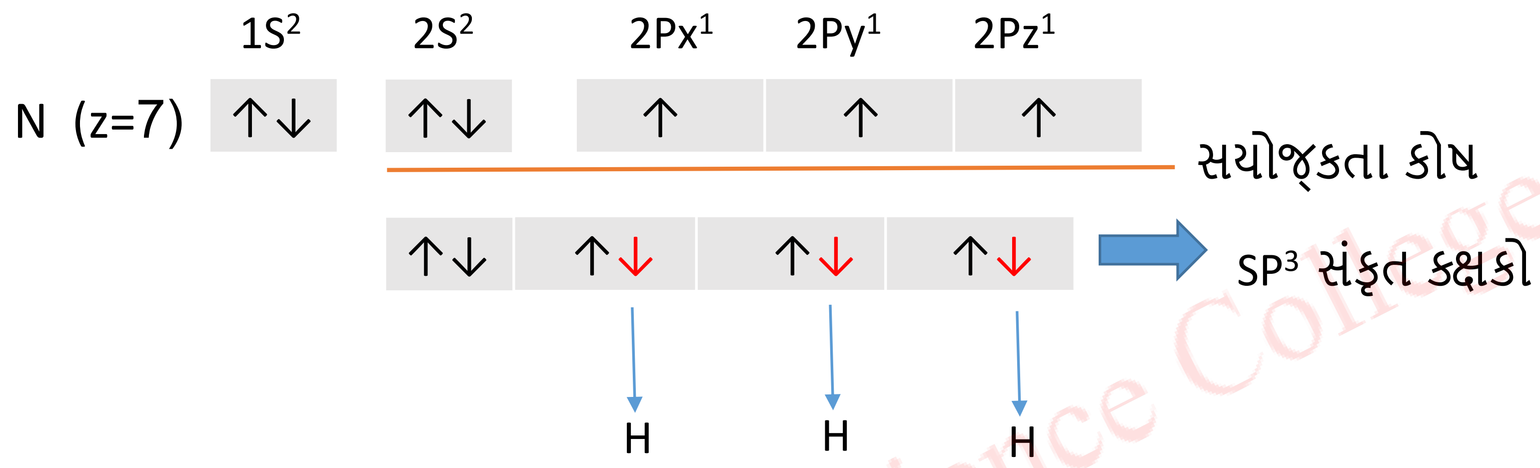
બંધકારક ઈલે.યુગ્મ ની સંખ્યા	આકાર
૨	રેખીય
૩	સમતલીય ત્રિકોણ
૪	સમચતુસફલકીય
૫	ત્રિકોણીય દ્વિ-પીરામીડલ
૬	અષ્ટફલકીય
૭	પંચકોણીય દ્વિ-પીરામીડલ

- અણુના મધ્યસ્થ પરમાણુંની સયોજ્કતા કોષમાં બંધકારક ઈલે.યુગ્મ ઉપરાંત એકાકી ઈલે.યુગ્મ હોયતો અણુના આકારમાં વિકૃતિ જોવા મળે છે એટલે કે અણુનો આકાર અસમીતીય બને છે.
- પ્રત્યેક ઈલે.યુગ્મ અન્ય ઈલે.યુગ્મ સાથે પ્રબળ અપાકર્ષણ અનુભવે છે.
- સંયોજ્કતા કોષમાં અપાકર્ષણ આ મુજ્બ અનુભવાય છે. B.P - B.P < B.P - L.P < L.P- L.P

Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

➢ V.S.E.P.R. Theory for NH_3

- NH_3 અણુમાં N મધ્યસ્થ પરમાણું છે તેની સાથે ત્રણ H હાઇડ્રોજન પરમાણુ સહસંયોજક σ-બંધ દ્વારા જોડાય છે.

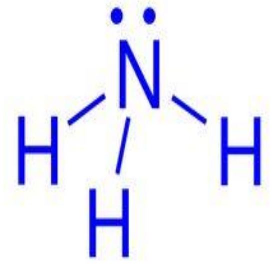


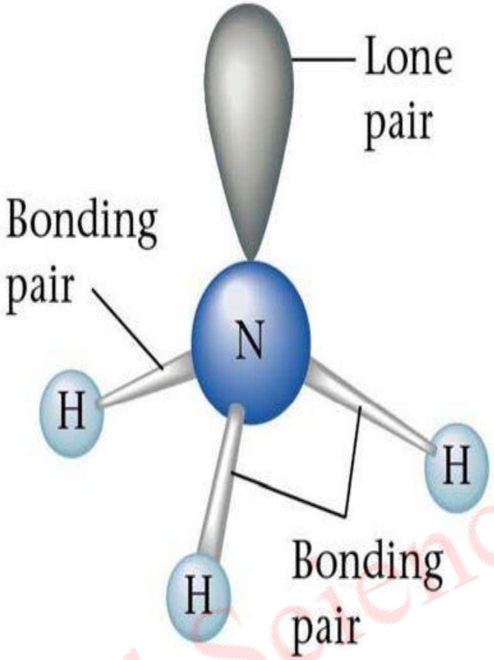
- NH_3 અણુમાં એક L.P અને ત્રણ B.P આવેલ છે.
- NH_3 અણુમાં SP^3 સંકરણ થતું હોવાથી આકાર સમચતુસફલકીય અને બંધકોણ 109° 28’ હોવો જોઈએ પરંતુ એક લોન પેર (L.P) હોવાથી અપાકર્ષણ વધુ અનુભવાય છે જેથી બંધકોણ 107° 18’ અને આકાર ત્રિકોણીય પીરામીડલ બને છે.

Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

Ammonia: NH_3

Lewis Structure



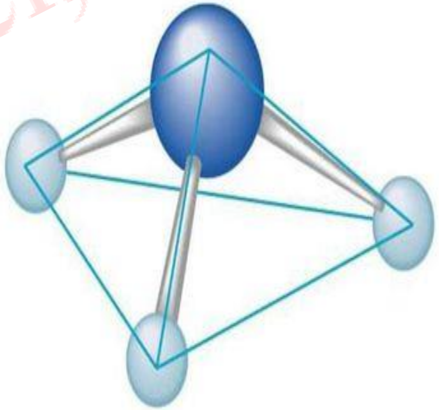


Four “things” (bonds/LP)

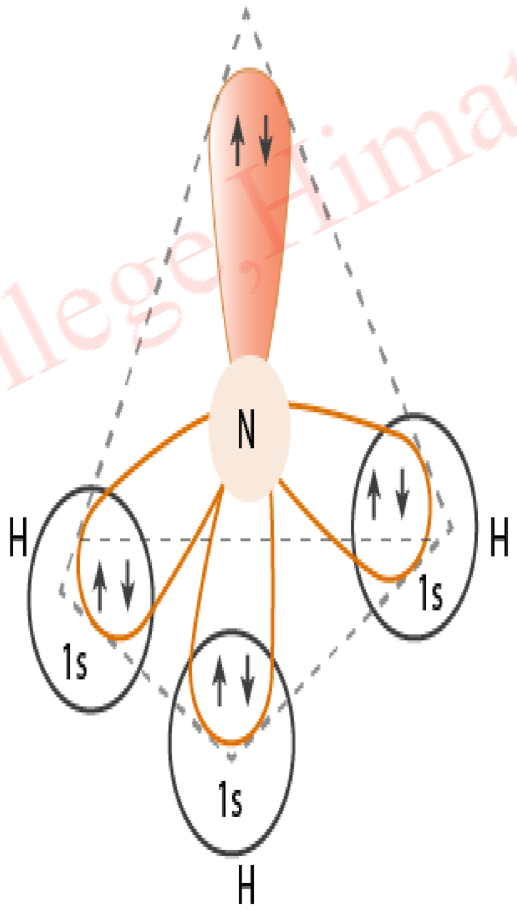
Tetrahedral geometry

1 LP → Trigonal pyramid shape

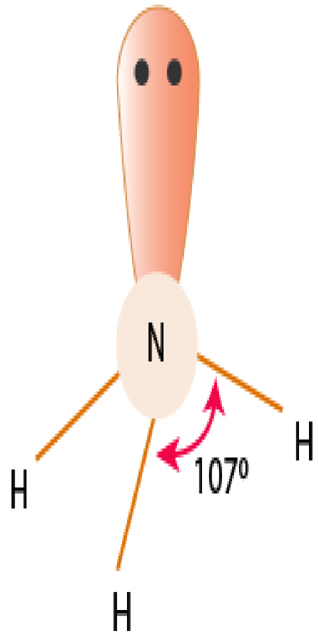
107° bond angles



Hybridization of NH_3



Orbital overlap in NH_3

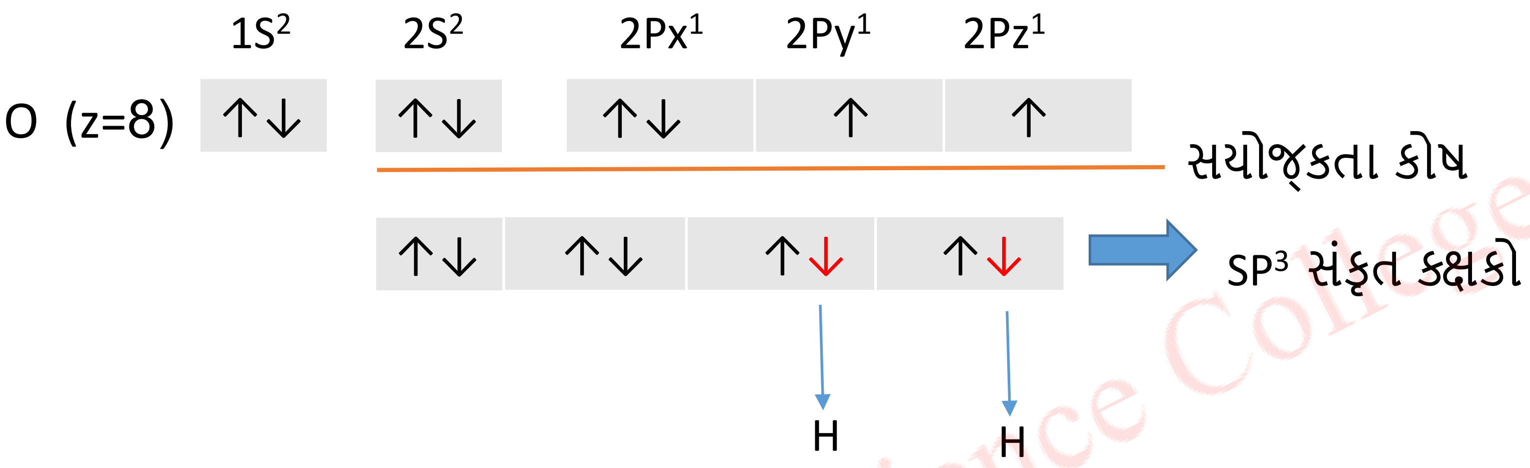


Pyramidal shape

BYJU'S The Learning App
Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

➢ V.S.E.P.R. Theory for H_2O

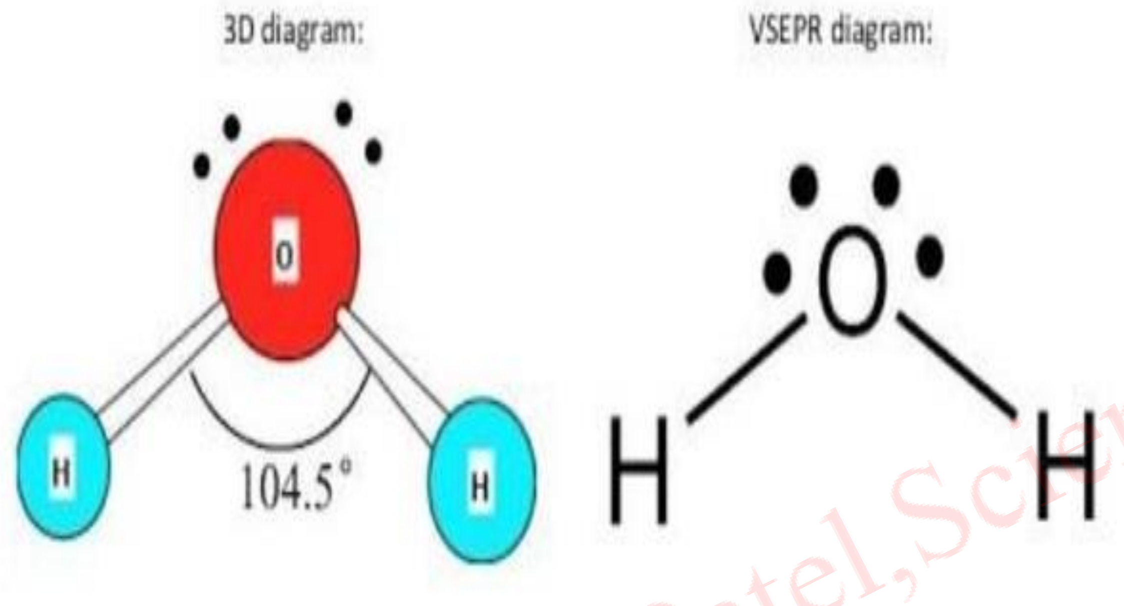
- H_2O અણુમાં O મધ્યસ્થ પરમાણુ છે તેની સાથે બે H હાઇડ્રોજન પરમાણુ સહસંયોજક σ-બંધ દ્વારા જોડાય છે.



- H_2O અણુમાં બે L.P અને બે B.P આવેલ છે.
- H_2O અણુમાં SP^3 સંકરણ થતું હોવાથી આકાર સમચતુસફલકીય અને બંધકોણ 109° 28’ હોવો જોઈએ પરંતુ બે લોન પેર (L.P) હોવાથી અપાકર્ષણ વધુ અનુભવાય છે જેથી બંધકોણ 104° 30’ અને આકાર કોણીય બને છે.

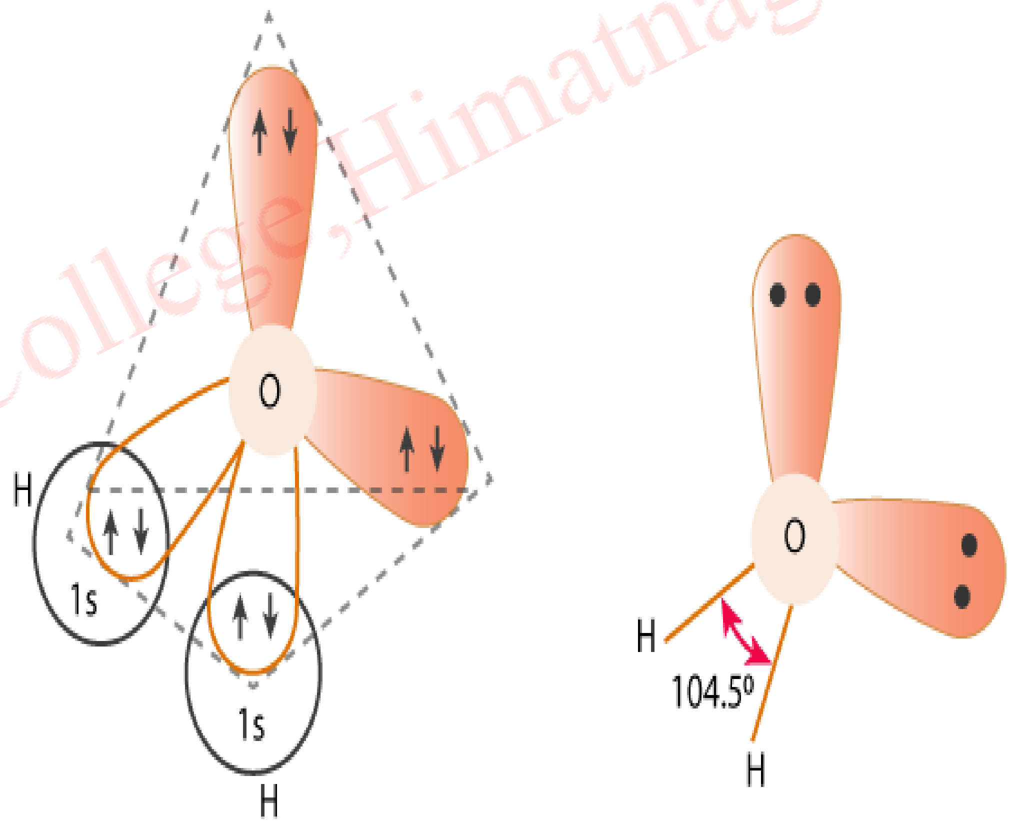
Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

Ex: H_2O



Hybridization of H_2O

BYJU'S The Learning App



Orbital overlap in H_2O

Bent shape

Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

M.O. Theory

- સંયોજકતા બંધન વાદ(V.B.T) સહસંયોજક બંધ સંપૂર્ણપણે સમજાવી શકતો નથી તેથી સારી રીતે સમજવા માટે ઈ.સ.1932 માં હુન્ડ અને મૂલિક્ન નામના વૈજ્ઞાનિકો એ આણ્વીય કક્ષક સિધાત (M.O.T) આપ્યો જે સહસંયોજક બંધને વધુ સારી રીતે સમજાવે છે.
- આ સિધ્ધાંત અનુસાર અણુ બન્યા પછી પરમાણવીય કક્ષકો પોતાનું અસ્તિત્વ ગુમાવી દે છે તેથી તેમાં રહેલ ઈલે. પરમાણવીય કક્ષકોમાં ન રહેતા નવી કક્ષકોમાં પોતાનું સ્થાન લે છે જેને આણ્વીય કક્ષકો (**Molecular Orbitals**) કહે છે.
- આણ્વીય કક્ષકોને પણ પરમાણવીય કક્ષકોની માફક કવોન્ટમ અંકો (*n, l, m, s*) દ્વારા દર્શાવી શકાય છે.
- પરમાણુની લગભગ સમાન ઉર્જા અને સરખી સમમિતિ ધરાવતી કક્ષકો પરસ્પર સંયોજાવાથી આણ્વીય કક્ષકો બને છે. જે બહુકેન્દ્રીય ન્યુક્લીયસ ની માફક વર્તે છે.
- પરમાણુની જેટલી કક્ષકો સંયોજનમાં ભાગ લે છે તેટલી આણ્વીય કક્ષકો બને છે.
- આણ્વીય કક્ષકો જેટલી બને છે તે પૈકીની અડધી કક્ષકો ઉંચી શક્તિવળી અને બાકીની અડધી કક્ષકો નીચી શક્તિવળી હોય છે.
- પરમાણુની કક્ષકોથી નીચી શક્તિવળી કક્ષકોને બંધકારક આણ્વીય કક્ષક (Bonding Molecular Orbital : B.M.O.) અને ઉંચી શક્તિવળી કક્ષકોને પ્રતિબંધકારક આણ્વીય કક્ષક (Antibonding Molecular Orbital : A.B.M.O.) કહે છે.
- બંધકારક આણ્વીય કક્ષકો સ્થાઈ અને પ્રતિબંધકારક આણ્વીય કક્ષકો અસ્થાઈ હોય છે.

Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

- આણ્વીય કક્ષકોના આકાર સંયોજાતી પરમાણુની કક્ષકોના આકાર પર આધારિત હોય છે.
- આણ્વીય કક્ષકોમાં ઈલે. ગોઠવણ આઉફ-બાઉ,પાઉંલિંગ અને હુંન્ડના નિયમ મુજબ થાય છે.
- આણ્વીય કક્ષકોના નિર્માણ માટે સમમિશ્રણમાં પરમાણવીય કક્ષકો પૈકી ખાલી,અર્ધપૂર્ણ કે પૂર્ણ ભરાયેલ એમ બધ્ધાજ પ્રકારની કક્ષકો ભાગ લે છે.

સમ તથા વિષમકીન્દ્રય દ્વિ-પરમાણુક અણુઓની આણ્વીય કક્ષકો માટેના શક્તિ સ્તર આલેખ
(Energy level diagram for homo nucleus diatomic molecules and Hetero nucleus diatomic molecules)

- સમ તથા વિષમકીન્દ્રય દ્વિ-પરમાણુક અણુઓની આણ્વીય કક્ષકો માટેના શક્તિ સ્તર આલેખ દર્શાવા માટે પ્રથમ પરમાણવીય કક્ષકોના રૈખિક સંગઠન(Linear Combination Of Atomic Orbitals : L.C.A.O.) ની પધ્ધતિ દ્વારા આણ્વીય કક્ષકો મેળવવામાં આવે છે.
- મેળવેલ કક્ષકોને શક્તિના ચઢતા ક્રમમાં ગોઠવી શક્તિ સ્તર મેળવવામાં આવે છે ત્યાર બાદ આણ્વીય કક્ષકોમાં ઈલે. ગોઠવણ આઉફ-બાઉ,પાઉંલિંગ અને હુંન્ડના નિયમ મુજબ કરવામાં આવે છે અને મળતા ચિતારને આણ્વીય કક્ષકો માટેના શક્તિ સ્તર આલેખ કહે છે.
- રૈખિક સંગઠનમા ભાગ લેતી પરમાણવીય કક્ષકો બે સમાન પરમાણુની હોયતો સમ દ્વિ-પરમાણુક અણુઓ માટેનો શક્તિ સ્તર આલેખ કહે છે. (દા.ત . N_2 અને O_2)

Dr. H.K. Patel, Science College, Himatnagar

- રૈખિક સંગઠનમા ભાગ લેતી પરમાણવીય કક્ષકો બે ભિન્ન પરમાણુની હોયતો વિષમ દ્વિ-પરમાણુક અણુઓ માટેનો શક્તિ સ્તર આલેખ કહે છે. (દા.ત . NO અને CO)

પરમાણવીય કક્ષકોના રૈખિક સંગઠનની પદ્ધતિ (Linear Combination Of Atomic Orbitals : (L. C. A. O. method))

- પરમાણવીય કક્ષકો માંથી આણવીય કક્ષકો મેળવવાની જુદી-જુદી ગણિતીય પધ્ધતિઓ છે પણ તે પૈકી **પરમાણવીય કક્ષકોના રૈખિક સંગઠનની પદ્ધતિ વધુ સરળ અને ઉપયોગી છે.**
- ક્વોન્ટમ યંત્રશાસ્ત્ર અનુસાર પરમાણવીય કક્ષકો ને તરંગફલન ψ દ્વારા દર્શાવી શકાય છે આ તરંગફલન શ્રોડીન્જર સમીકરણના ઉકેલ દ્વારા મેળવાય છે.
- દ્વિ-**પરમાણવીય અણુ માટે રૈખિક સંગઠન એટલેકે** પરમાણવીય કક્ષકોના તરંગફલનનો સરવાળો કે બાદબાકી લેવામાં આવે છે અને આરીતે મળતા તરંગફલનને આણવીય કક્ષક માટેનું તરંગફલન કહે છે.
- AB અણુ એ A અને B પરમાણુ દ્વારા બનેલ છે તો L. C. A. O. મુજબ ψ_A એ A પરમાણુનું તરંગફલન છે, ψ_B એ B પરમાણુનું તરંગફલન છે તથા ψ_{AB} એ અણુ AB નું તરંગફલન થાય.

$$\psi_{AB} = \psi_A \pm \psi_B$$

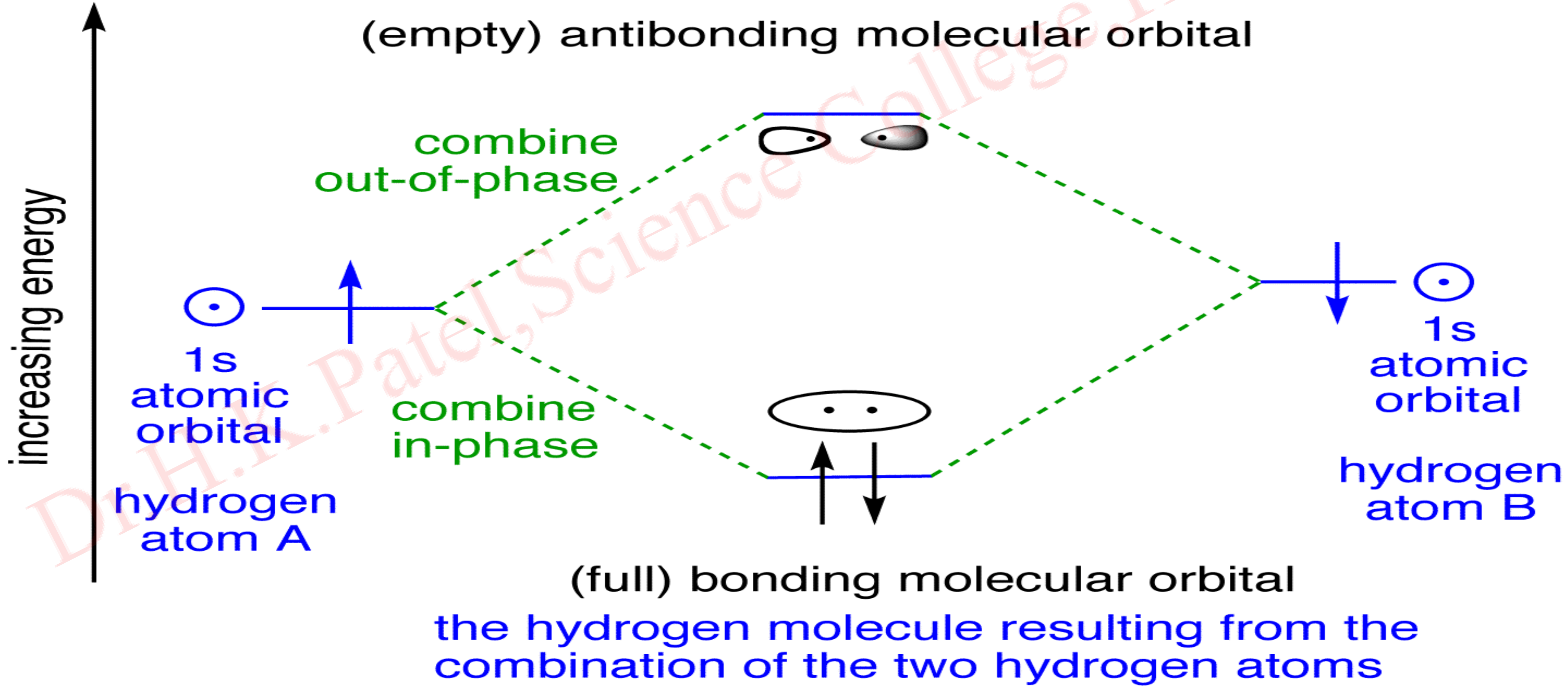
- આ સમીકરણ દર્શાવે છે કે **પરમાણવીય કક્ષકોના રૈખિક સંગઠન દ્વારા બે આણવીય કક્ષકો પ્રાપ્ત થય છે.**

$$\psi^b = \psi_A + \psi_B$$

$$\psi^* = \psi_A - \psi_B$$

Dr.H.K Patel,Science College,Himatnagar

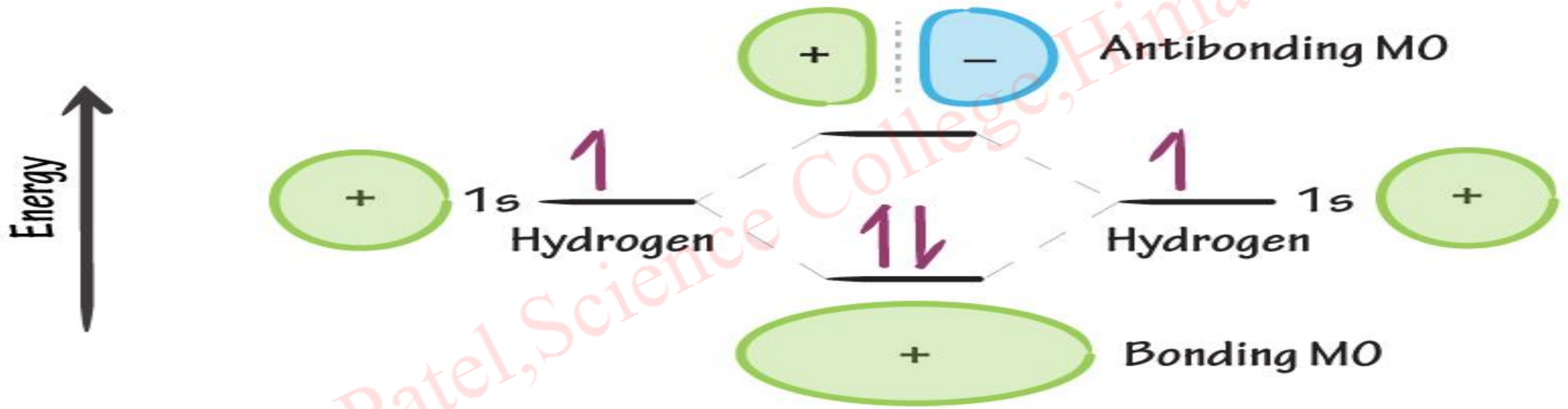
- આણ્વીય કક્ષક તરંગફલન ψ^b એ પરમાણવીય કક્ષકો કરતા ઓછી શક્તિ વળી છે જેને બંધકારક આણ્વીય કક્ષક (B.M.O.) કહે છે જે અણુને સ્થાઈત્વ આપે છે.
- આણ્વીય કક્ષક તરંગફલન ψ* એ પરમાણવીય કક્ષકો કરતા વધુ શક્તિ વળી છે જેને અબંધકારક આણ્વીય કક્ષક (A.B.M.O.) કહે છે જે અણુના સ્થાઈત્વનો વિરોધ કરે છે.
- હાઇડ્રોજન પરમાણુની 1s પરમાણવીય કક્ષકોનુ **રૈખિક સંગઠન નીચે આકૃતિમાં દર્શાવેલ છે.**



Dr.H.K.Patel,Science College Himatnagar

Orbital Interaction Diagram

Molecular hydrogen: H_2



Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

પરમાણવીય કક્ષકોના રૈખિક સંગઠન માટેની શરતો (Condition for the Combination of atomic orbitals)

- સંગઠનમા ભાગ લેતી પરમાણુની કક્ષકોની શક્તિ સમાન હોવી જોઈએ. (1S કક્ષક બીજી 1S કક્ષક સાથે સંયોજાઈ શકે છે પરંતુ 2S કક્ષક સાથે સંયોજાઈ શકે નહી)
- સંગઠનમા ભાગ લેતી પરમાણુની કક્ષકોની આણ્વીય અક્ષના સંદર્ભમાં સંમીતી સમાન હોવી જોઈએ સરળતા ખાતર Z અક્ષ ને આણ્વીય અક્ષ તરીકે લેવામાં આવે છે. (દા.ત. કોઈ એક પરમાણુની 2Pz કક્ષક અન્ય પરમાણુની 2Pz કક્ષક સાથે સંયોજાઈ શકે છે પણ 2Px અને 2Py સાથે સંયોજાઈ શકતી નથી.
- સંગઠનમા ભાગ લેતી પરમાણુની કક્ષકોનુ સંમિશ્રણ (Overlapping) જેટલું વધારે તેટલો બંધ મજબુત બને છે અને આણ્વીય કક્ષકો વચ્ચે ઈલે. ઘનતા વધુ રહે છે.

બંધકારક આણ્વીય કક્ષક (Bonding Molecular Orbital : B.M.O.)

- આણ્વીય કક્ષકોની શક્તિ પરમાણવીય કક્ષકોની શક્તિ કરતા ઓછી હોયતો ઈલે. પરમાણુ કક્ષકમા રહેવાને બદલે આણ્વીય કક્ષકમાં દાખલ થઈ બંધ બનાવે છે જેને બંધકારક આણ્વીય કક્ષક(ψ^b અથવા ψ+) કહે છે અને તેમાં રહેલ ઈલે.ને બંધકારક ઈલે. કહે છે.
- AB અણુ એ A અને B પરમાણુ દ્વારા બનેલ છે તો L. C. A. O. મુજબ ψ_A એ A પરમાણુનું તરંગફલન છે, ψ_B એ B પરમાણુનું તરંગફલન છે હવે ઈલે.ઘનતા એ તરંગફલનના વર્ગ બરાબર હોય છે તેથી ψ_A^2 એ A પરમાણુની ઈલે.ઘનતા છે અને ψ_B^2 એ B પરમાણુનું ઈલે.ઘનતા છે

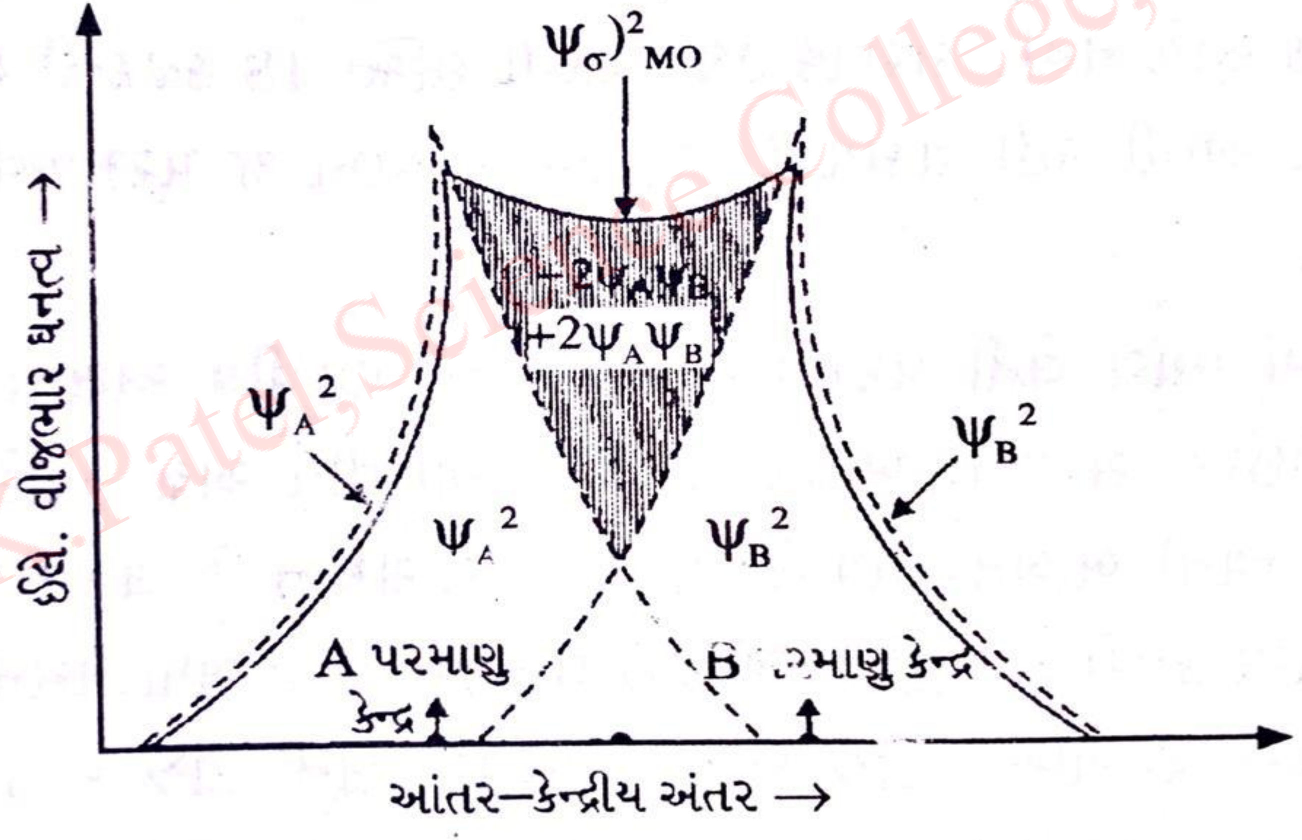
Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

આપણે જાણીએ છીએ કે $\psi^b = \psi_A + \psi_B$

માટે $(\psi^b)^2 = (\psi_A + \psi_B)^2$

$$(\psi^b)^2 = (\psi_A)^2 + 2\psi_A\psi_B + (\psi_B)^2$$

$(\psi^b)^2$ માં $(\psi_A)^2 + (\psi_B)^2$ કરતા $2\psi_A\psi_B$ જેટલી ઈલે.ઘનતા વધારે છે. તેથી બંધ રચાય છે જે નીચેની આકૃતિમાં દરશાવેલ છે.



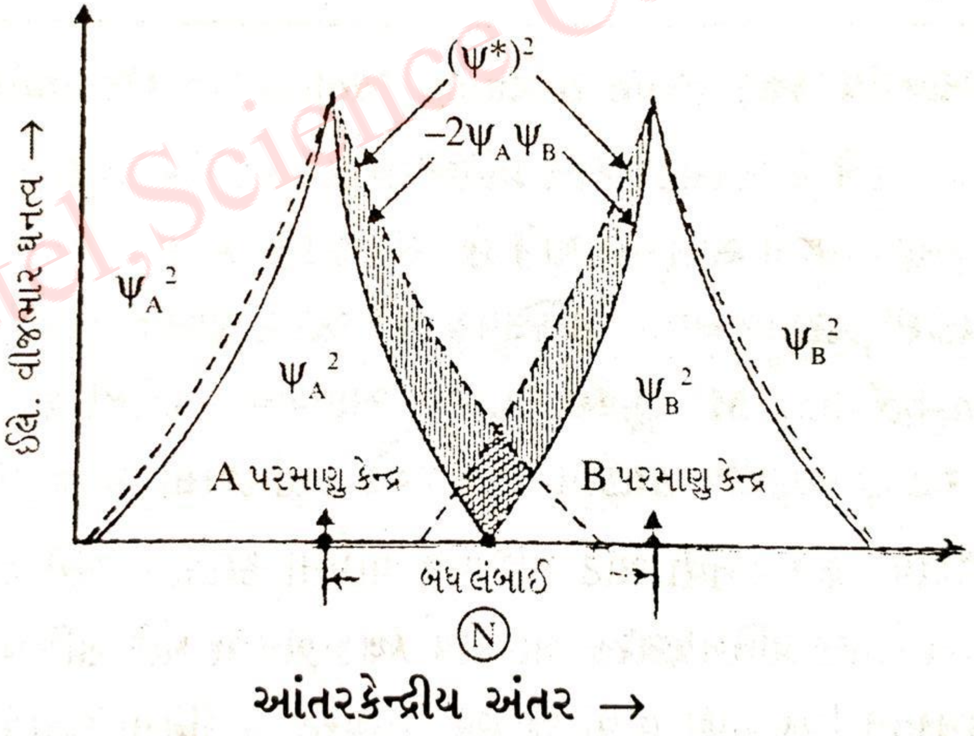
Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

પ્રતિબંધકારક આણ્વીય કક્ષક (Antibonding Molecular Orbital : A.B.M.O.)

- આણ્વીય કક્ષકોની શક્તિ પરમાણવીય કક્ષકોની શક્તિ કરતા થોડીક વધારે હોવાથી ઈલે.ને આ કક્ષકમાં દાખલ કરવા વધુ શક્તિની જરૂર પડે છે આવી અણુ કક્ષકને પ્રતિબંધકારક આણ્વીય કક્ષક (Antibonding Molecular Orbital) કહે છે જેને ψ_- કે ψ^* વડે દર્શાવાય છે.
- આ કક્ષકમાં ઈલે.ની હાજરીથી સંયોજાતા બે પરમાણુ કેન્દ્રો વચ્ચે ઈલે.ઘનતા ઘટે છે તેથી આ અણુ કક્ષકો બંધ બનાવવામાં મદદરૂપ થતી નથી પરંતુ અવરોધરૂપ રહે છે.
- આપણે જાણીએ છીએ કે $\psi^* = \psi_A - \psi_B$

$$(\psi^*)^2 = (\psi_A - \psi_B)^2$$
$$(\psi^*)^2 = (\psi_A)^2 - 2\psi_A\psi_B + (\psi_B)^2$$

- $(\psi^*)^2$ માં $(\psi_A)^2 + (\psi_B)^2$ કરતા $-2\psi_A\psi_B$ જેટલી ઈલે.ઘનતા ઓછી છે. તેથી બંધ રચાય છે જે નીચેની આકૃતિમાં દરશાવેલ છે. જે નીચેની આકૃતિમાં દરશાવેલ છે.



Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

આકૃતિ (4) : પરમાણ્વીય કક્ષકોના (+, –) સંમિશ્રણમાં ઈલે. વીજભાર ઘનતાના વિતરણ દર્શાવતું ચિત્ર

▲ બંધકારક અને પ્રતિબંધકારક આણ્વીય કક્ષકો વચ્ચેનો તફાવત :

બંધકારક આણ્વીય કક્ષક (BMO)	પ્રતિબંધકારક આણ્વીય કક્ષક (ABMO)
1. સરખા ચિહ્નવાળા બે ઈલેક્ટ્રોન તરંગોનું જોડાણ થવાથી એટલે કે બે પરમાણ્વીય કક્ષકોનું **પૂરક સંમિશ્રણ** થવાથી બંધકારક આણ્વીય કક્ષક બને છે.	વિરુદ્ધ ચિહ્નવાળા બે ઈલેક્ટ્રોન તરંગોનું જોડાણ થવાથી એટલે કે બે પરમાણ્વીય કક્ષકોનું **વિરોધક જોડાણ** (સંમિશ્રણ) થવાથી પ્રતિબંધકારક આણ્વીય કક્ષક બને છે.
2. બંધકારક આણ્વીય કક્ષકની શક્તિ તેના ઘટક પરમાણ્વીય કક્ષકોની શક્તિ કરતાં ઓછી હોય છે.	પ્રતિબંધકારક આણ્વીય કક્ષકોની શક્તિ તેના ઘટક પરમાણ્વીય કક્ષકોની શક્તિ કરતાં વધુ હોય છે.
3. બંધકારક આણ્વીય કક્ષકમાં ઈલેક્ટ્રોન ભરાય તો બન્ને પરમાણુ કેન્દ્રો પ્રબળ આકર્ષણ અનુભવી બંધ રચે છે.	જ્યારે પ્રતિબંધકારક આણ્વીય કક્ષકમાં ઈલેક્ટ્રોન ભરાય તો તે પરમાણુઓ વચ્ચેનાં બંધનો પ્રતિકાર કરે છે.
4. બંધકારક આણ્વીય કક્ષક બન્ને પરમાણુના ન્યુક્લિયસ પર છવાયેલી હોય છે, એટલે કે બન્ને પરમાણુ ન્યુક્લિસ વચ્ચે ઈલે. ઘનતા ઊંચી હોય છે અને તેથી તે બન્ને ન્યુક્લિયસ પ્રબળ આકર્ષણ અનુભવે છે કે જે બન્ને પરમાણુઓ વચ્ચેના બંધ નિર્માણની સમજૂતી આપે છે.	પ્રતિબંધકારક આણ્વીય કક્ષક બન્ને ન્યુક્લિયસ પર છવાયેલી હોતી નથી, એટલે કે બન્ને પરમાણુઓના ન્યુક્લિયસ વચ્ચે ઈલેક્ટ્રોન ઘનતા ઓછી હોય છે અને તેથી તે બન્ને ન્યુક્લિયસ વચ્ચેનું અપાકર્ષણ ઊંચું હોય છે કે જે પરમાણુઓ વચ્ચે બંધનો પ્રતિકાર કરે છે.

Dr.H.K.Patel Science College Himatnagar

અબંધકારક આણ્વીય કક્ષક (Non-bonding Molecular Orbital)

- આપણે જાણીએ છીએ કે પરમાણુની સંયોજકતા કોષની કક્ષકો સમિશ્રણ પામે છે ત્યારે બંધકારક અને પ્રતિબંધકારક આણ્વીય કક્ષકો નીપજે છે.
- પરમાણુની સંયોજકતા કોષની કક્ષકો સિવાયની આંતર સંવૃત કોષની કક્ષકોમાં રહેલ ઈલે. પડોશી પરમાણુના ન્યુક્લીયસ વડે અસર પામતા નથી આ આંતર સંવૃત કોષની કક્ષકોને અબંધકારક આણ્વીય કક્ષક કહે છે જેની શક્તિ પરમાણ્વીય કક્ષકો જેટલીજ હોય છે.
- અબંધકારક આણ્વીય કક્ષકોને K. K. વડે દર્શાવાય છે.

જિરાડ અને અનજિરાડ કક્ષકો (Gerade and Ungerade Orbitals)

- આણ્વીય કક્ષકો માટે તરંગ વિધેયો ψ^b અને ψ^* ને અનુક્રમે $\psi_{(g)}$ અને $\psi_{(u)}$ તરીકે દર્શાવવામાં આવે છે.
- જ્યાં g એટલે કે gerade બેકી અને u એટલે કે ungerade એકી હોય છે.
- g અને u એ તેના કેન્દ્રની આસપાસ કક્ષકની સંમિતિ દર્શાવે છે.
- કક્ષકનું તેની કેન્દ્રની આસપાસ પરાવર્તન કરવામાં આવે ત્યારે X , Y અને Z નું -X , -Y અને -Z માં પરિવર્તન થાય ત્યારે ψ નું ચિન્હ બદલાય નહિ તો તેને જિરાડ અને ψ નું ચિન્હ બદલાય તો તેને અનજિરાડ કહે છે.

Dr.H.K.Patel, Science College,Himatnagar

બંધક્રમાંક (Bond Order)

- બંધકારક આણ્વીય કક્ષકમાંના ઈલે. બંધ બનાવવામાં મદદ કરે છે જયારે પ્રતિબંધકારક આણ્વીય કક્ષકમાંના ઈલે. બંધનો વિરોધ કરે છે
- અણુમાંના બે પરમાણુઓ વચ્ચે આવેલ સહસંયોજક બંધની સંખ્યાને બંધક્રમાંક કહે છે.
- બંધકારક આણ્વી કક્ષકમાં આવેલ ઈલે. સંખ્યા અને પ્રતિબંધકારક આણ્વી કક્ષકમાં આવેલ ઈલે. સંખ્યાના તફાવતને બે વડે ભગવાથી મળતી સંખ્યાને બંધક્રમાંક (B.O) કહે છે.

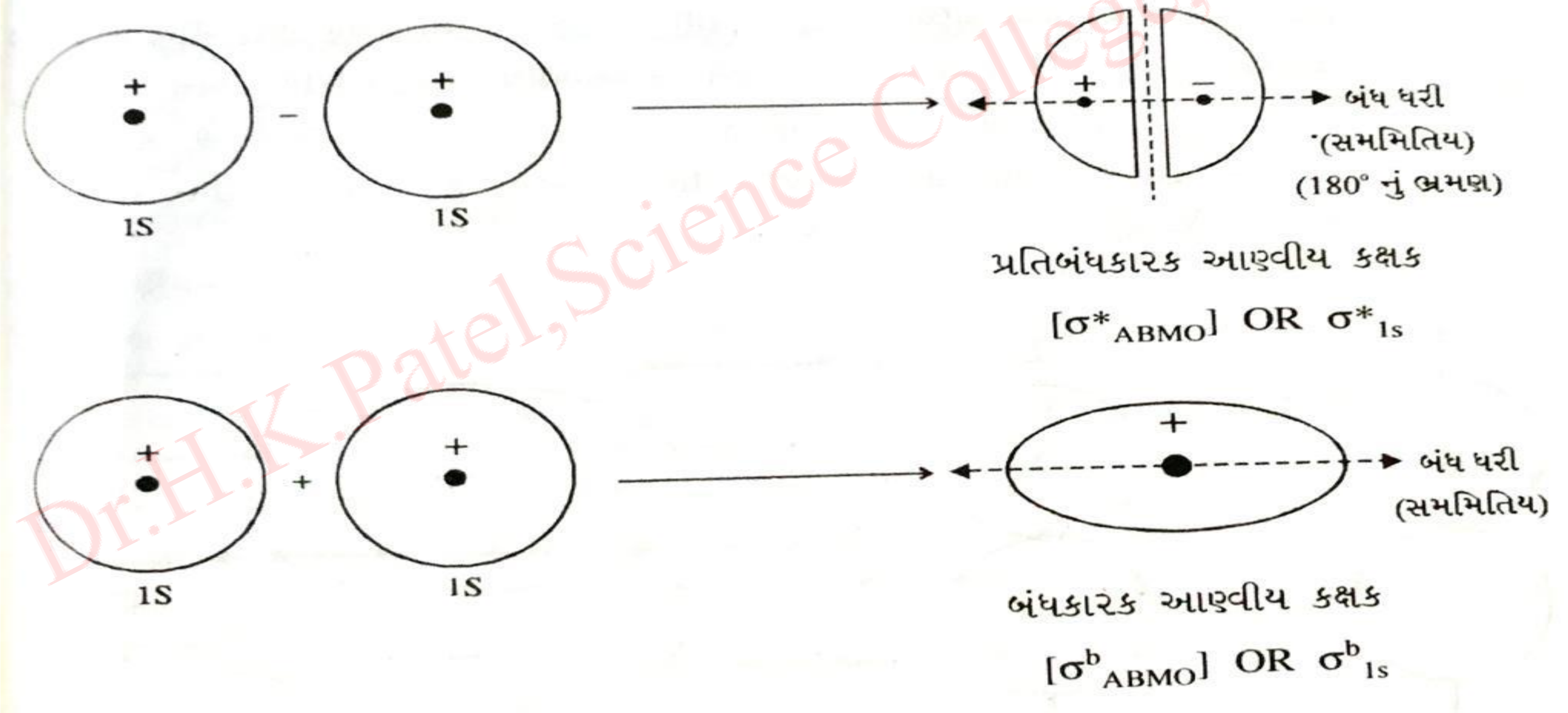
બંધક્રમાંક = $\frac{1}{2}$[બંધકારક આણ્વી કક્ષકમાં આવેલ ઈલે. સંખ્યા - પ્રતિબંધકારક આણ્વી કક્ષકમાં આવેલ ઈલે. સંખ્યા]

- બંધક્રમાંક ધન (Positive) હોય તો તેનો અર્થ એ થાય કે અણુ સ્થાઇ અને સ્વતંત્ર અસ્તિત્વ ધરાવે છે.
- બંધક્રમાંક શૂન્ય કે ઋણ (Negative) હોય તો તેનો અર્થ એ થાય કે અણુ અસ્થાઈ અને સ્વતંત્ર અસ્તિત્વ ધરાવે નહી.
- બંધલંબાઈ હંમેશા બંધક્રમાંકના વ્યસ્ત પ્રમાણમાં હોય છે તેથી કહી શકાય કે બંધક્રમાંકનું ઊંચું મુલ્ય એ બંધલંબાઈનું નીચું મુલ્ય દર્શાવે છે જે બંધની મજબૂતી દર્શાવે છે.
- બંધક્રમાંક = અણુમાં સહસંયોજક બંધની સંખ્યા
- બંધક્રમાંકના મુલ્ય ઉપરથી અણુના ચુંબકીય ગુણ અંગે અનુમાન કરી શકાય છે. જો બંધક્રમાંકનું મુલ્ય પૂર્ણાંક હોયતો અણુ પ્રતિચુંબકીય(Diamagnetic) અને અપૂર્ણાંક હોયતો અણુ અનુચુંબકીય(peramagnetic) ગુણ ધરાવે છે.

Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

આણ્વીય કક્ષકોના પ્રકાર

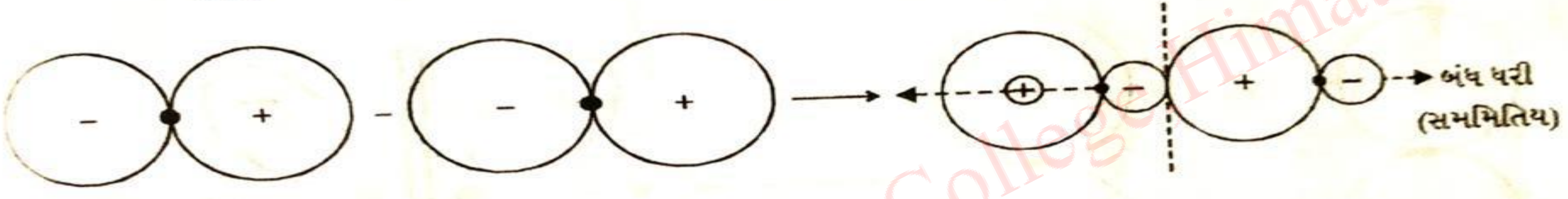
- દ્વિ-પરમાણુક અણુઓની આણ્વીયકક્ષકોને σ ,π કે δ દ્વારા દર્શાવામાં આવે છે.
- σ આણ્વીયકક્ષકો આણ્વીય અક્ષ ના સંદર્ભમાં સંમિતીય હોય છે જયારે π આણ્વીયકક્ષકો સંમિતીય હોતી નથી.
- બે પરમાણ્વીય કક્ષકોના જોડાણ દ્વારા એક બંધકારક આણ્વીય કક્ષક મળે છે જેમાં ઈલે. રહેવાનું પસંદ કરે છે અને બે પરમાણ્વીય કક્ષકોના જોડાણ દ્વારા એક પ્રતિ બંધકારક આણ્વીય કક્ષક મળે છે.



Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

P કક્ષકોનું જોડાણ :

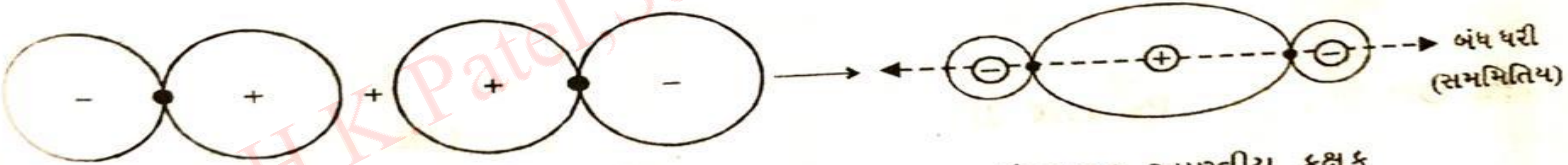
(i) જો આંતરકેન્દ્રીય અક્ષને z–અક્ષની દિશામાં લેવામાં આવે તો જોઈ શકાય કે બે પરમાણુઓની 2Pz કક્ષકોનું રૈખિક જોડાણથી બે σ આણ્વીય કક્ષકોનું નિર્માણ થાય છે. તેને σ^{b}_{2Pz} અને σ^{*}_{2Pz} દ્વારા દર્શાવવામાં આવે છે, જે આકૃતિ (7)માં દર્શાવ્યા પ્રમાણે છે.



2Pz 2Pz

પ્રતિબંધકારક આણ્વીય કક્ષક

$[\sigma^{*}_{ABMO}]$ OR σ^{*}_{2Pz}

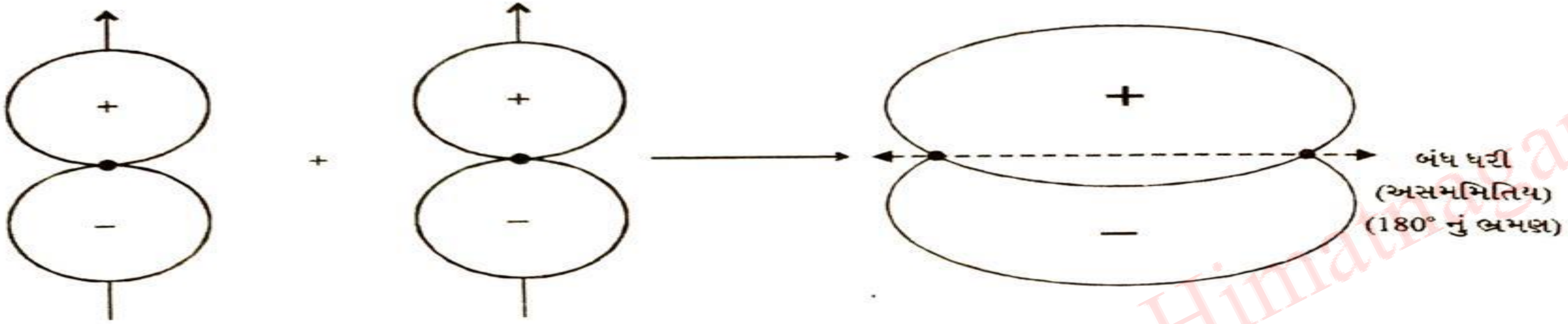


2Pz 2Pz

બંધકારક આણ્વીય કક્ષક

(σ_{BMO}) OR σ_{2Pz}

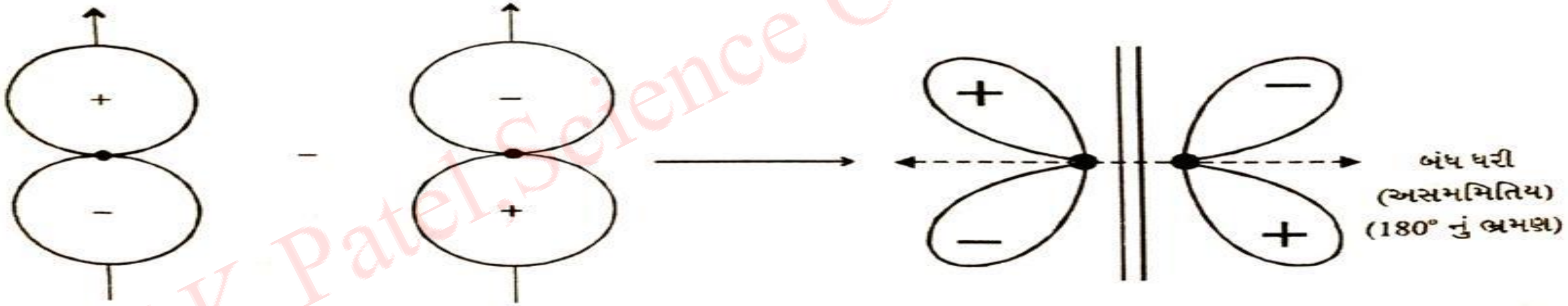
Dr.H.K.Patel Science College Himatnagar



2Px **OR** 2Py   2Px **OR** 2Py

બંધકારક આણ્વીય કક્ષક

$[\pi_{BMO}]$ **OR** π^{b}_{2Px} **OR** π^{b}_{2Py}



2Px **OR** 2Py   2Px **OR** 2Py

π^{*}_{2Px} **OR** π^{*}_{2Py}

પ્રતિબંધકારક આણ્વીય કક્ષક

$[\pi^{*}_{ABMO}]$

π^{*} પ્રતિબંધકારક આણ્વીય કક્ષકમાં બે કેન્દ્રો વચ્ચે Node આવેલ હોય છે.

Dr.H.K.Patel Science College Himatnagar

સમ દ્વિ-પરમાણુક અણુઓની આણ્વીય કક્ષકો માટેના શક્તિ સ્તર આલેખ

(Energy level diagram for homo nucleus diatomic molecules)

- આણ્વીય કક્ષક સિધ્ધાંત ઉપરથી બંધકારક અને પ્રતિબંધકારક આણ્વીય કક્ષકોની સપેક્ષ શક્તિના આધરે આણ્વીય કક્ષકોની શ્રેણી બનાવી શકાય છે જેના આધરે અણુના ઈલે. વિન્યાસનો ખ્યાલ આવે છે.
- Li_2 થી N_2 સુધીના અણુઓ માટે ઈલે. વિન્યાસ નીચે મુજબ હોય છે.

$$\sigma 1S < \sigma^* 1S < \sigma 2S < \sigma^* 2S < \pi 2Px = \pi 2Py < \sigma 2Pz < \pi^* 2Px = \pi^* 2Py < \sigma^* 2Pz$$

K< K< Zσ < Yσ < Wπ < xσ < Vπ < uσ

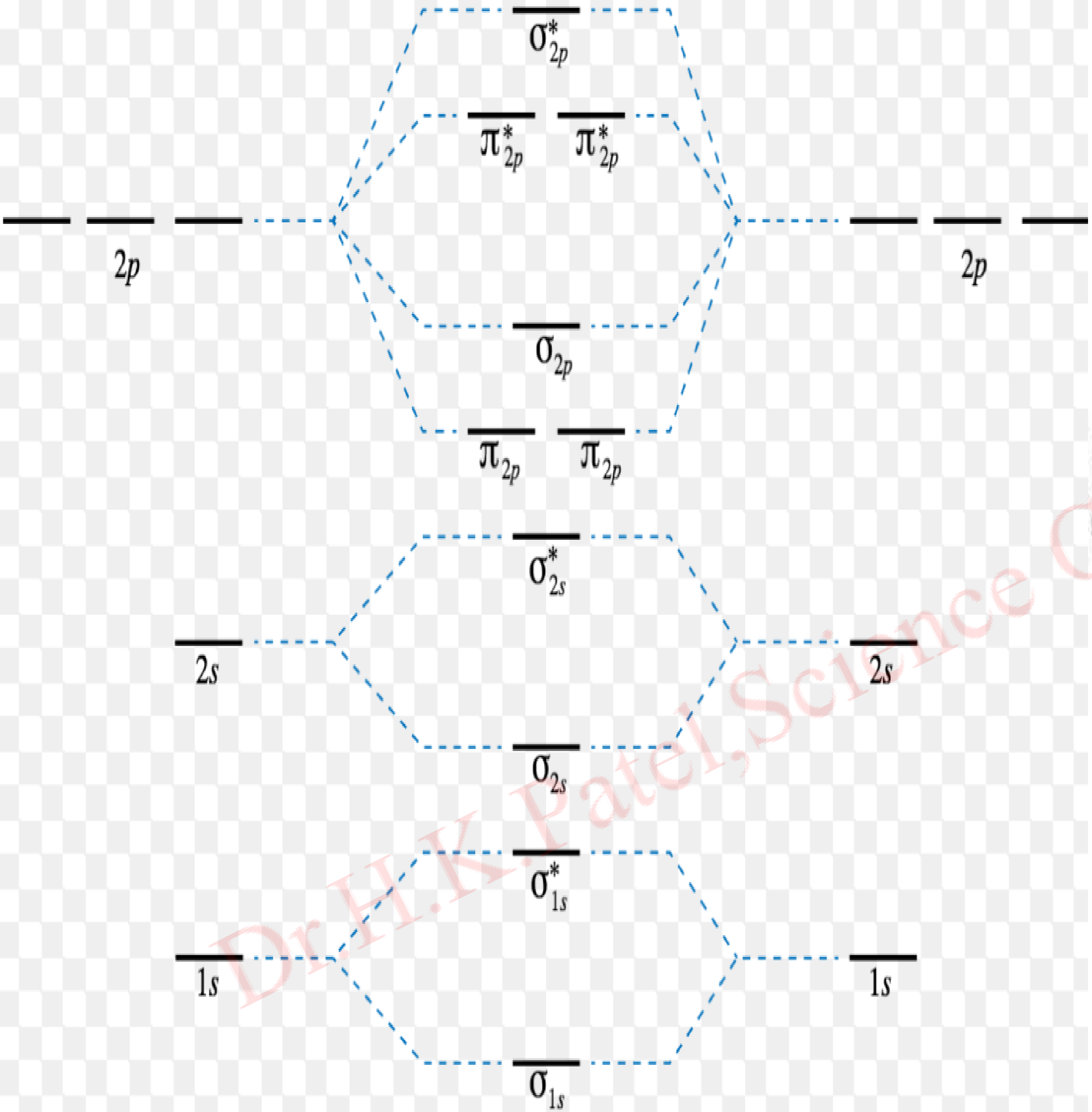
ઓછી શક્તિ--વધુ શક્તિ

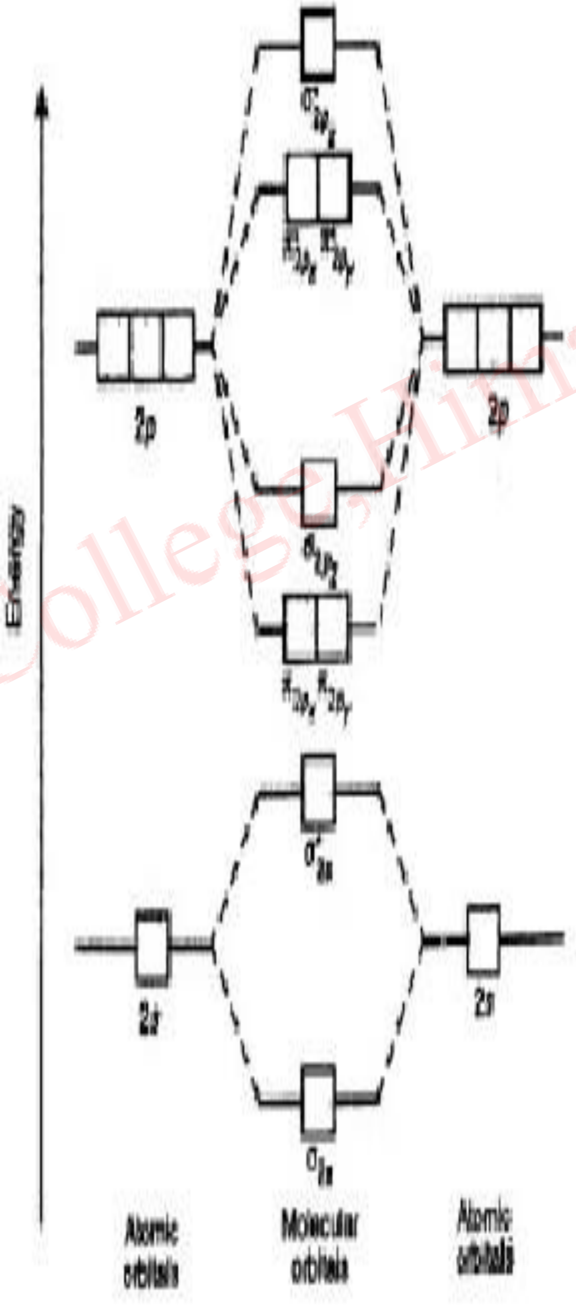
- O_2 થી F_2 સુધીના અણુઓ માટે ઈલે. વિન્યાસ નીચે મુજબ હોય છે.

$$\sigma 1S < \sigma^* 1S < \sigma 2S < \sigma^* 2S < \sigma 2Pz < \pi 2Px = \pi 2Py < \pi^* 2Px = \pi^* 2Py < \sigma^* 2Pz$$

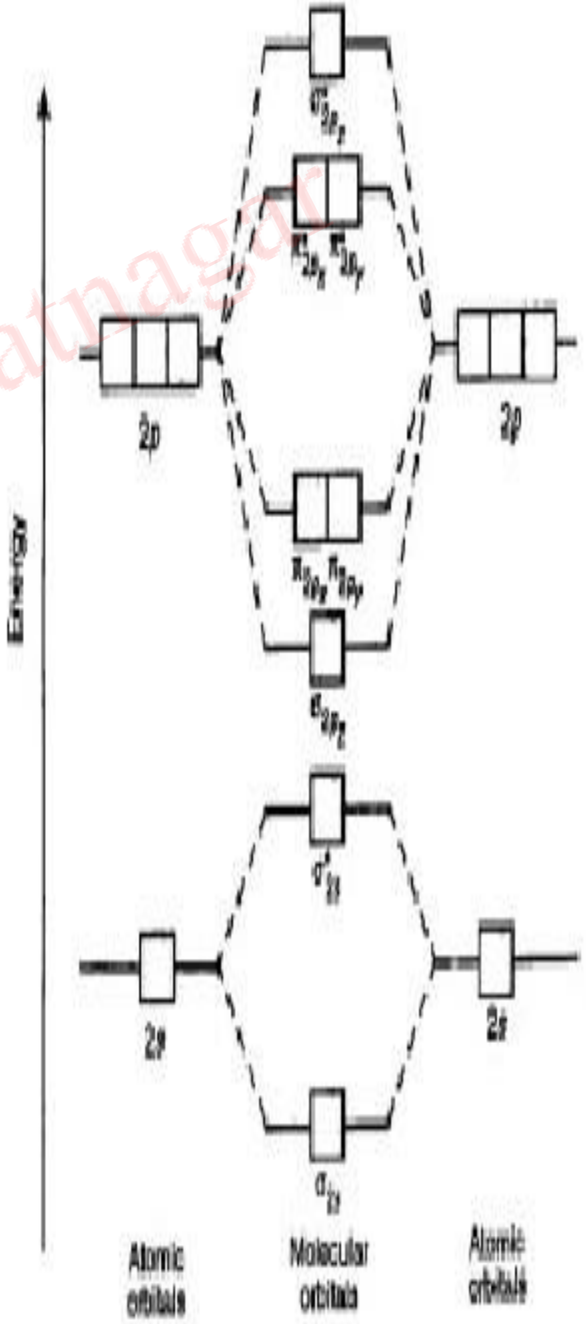
ઓછી શક્તિ--વધુ શક્તિ

Dr.H.K.Patel,Science College Himatnagar





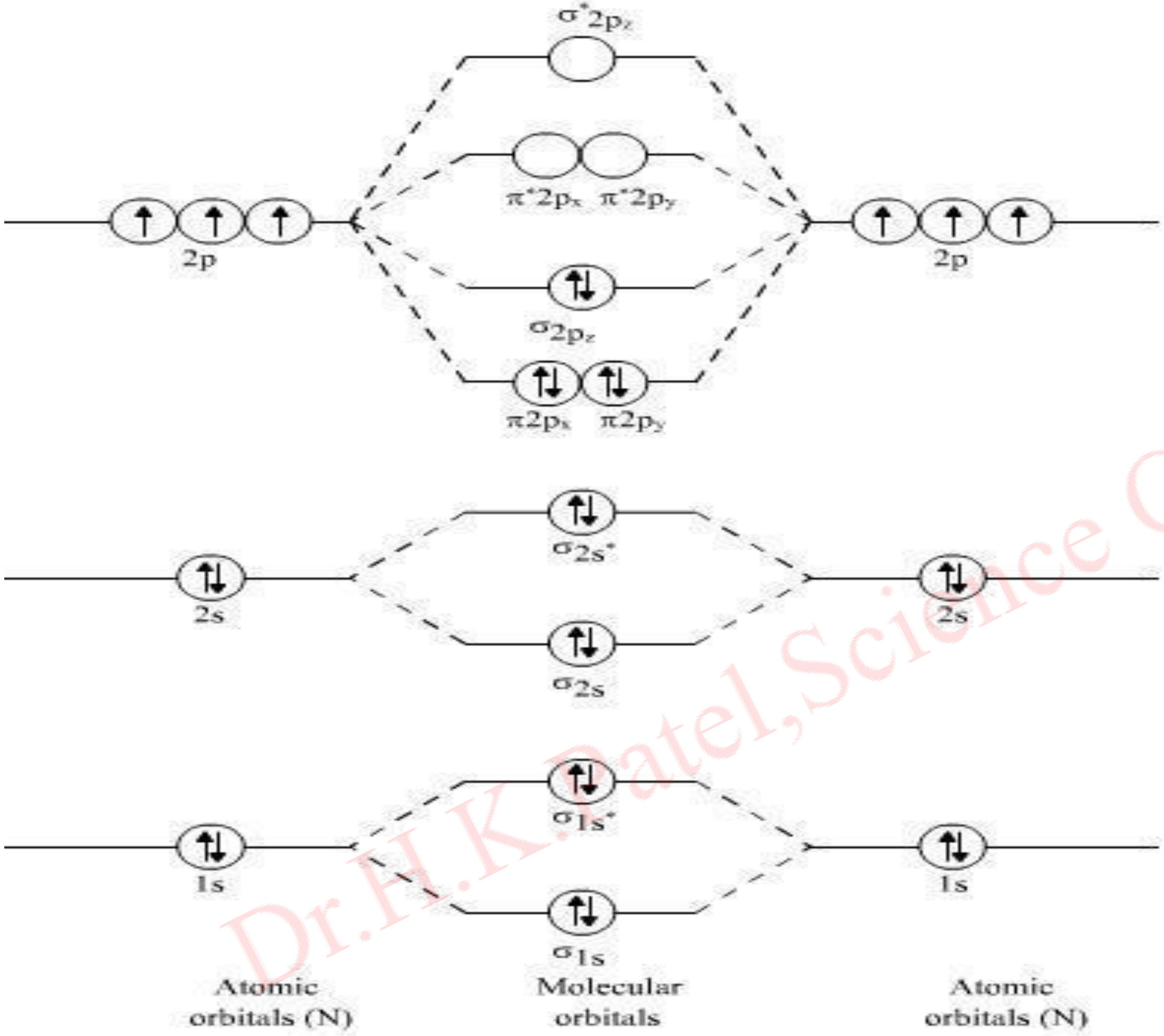
Li_2 to N_2



O_2 and F_2

Dr.H.K.Patel,Science College,Himatnagar

N_2 અણુ માટેનો શક્તિસ્તર આલેખ (Energy level diagram for N_2 molecules)



બંધક્રમાંક= $\frac{1}{2}$[B.M.O.માં ઈલે.સંખ્યા – A.B.M.O. માં ઈલે.સંખ્યા]

બંધક્રમાંક= $\frac{1}{2}[10-4]$

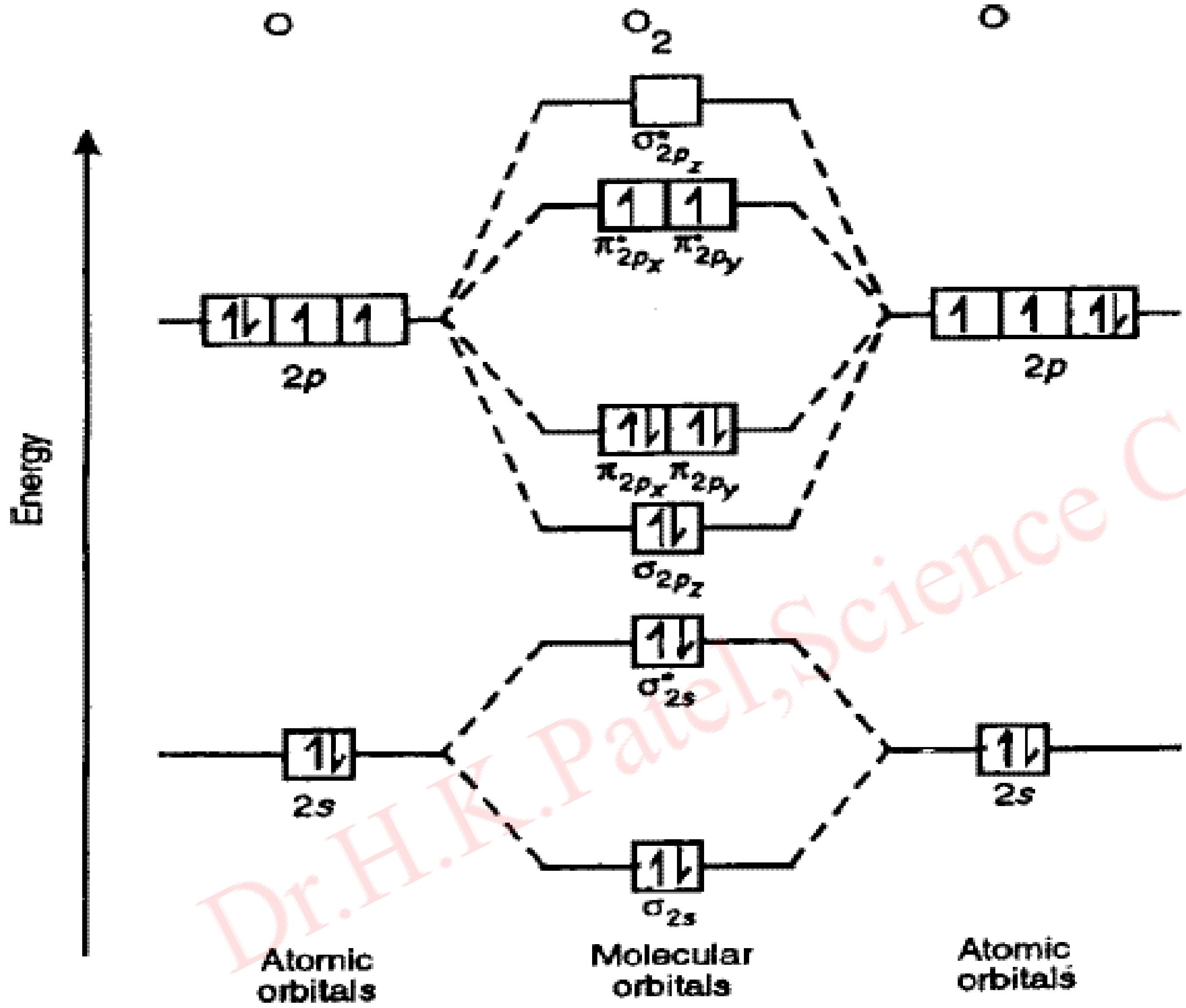
બંધક્રમાંક= 3

- બે નાઈટ્રોજન વચ્ચે ત્રિપલ બંધ હોય છે. (N ≡ N)
- N_2 અણુની આણ્વીય કક્ષકોમાં એક પણ અયુગ્મિત ઈલે. નથી તેથી તે પ્રતિચુંબકીય (Diamagnetic) ગુણ ધરાવે છે.

$(\sigma\ 1S)^2 < (\sigma^*1S)^2 < (\sigma\ 2S)^2 < (\sigma^*2S)^2 < (\pi 2Px)^2 = (\pi 2Py)^2 < (\sigma\ 2Pz)^2 < \pi^*2Px = \pi^*2Py < \sigma^*2Pz$

Dr.H.K.Patel,Science College, Himatnagar

O_2 અણુ માટેનો શક્તિસ્તર આલેખ (Energy level diagram for O_2 molecules)



બંધક્રમાંક= $\frac{1}{2}$[B.M.O.માં ઈલે.સંખ્યા – A.B.M.O. માં ઈલે.સંખ્યા]

બંધક્રમાંક= $\frac{1}{2}$[08– 4]

બંધક્રમાંક= 2

- બે ઓકસીજન વચ્ચે ડબલ બંધ હોય છે. (O=O)
- O_2 અણુની આણ્વીય કક્ષકોમાં બે અયુગ્મિત ઈલે.છે. તેથી તે અનુચુંબકીય(Peramagnetic) ગુણ ધરાવે છે.

$(\sigma\ 1S)^2 < (\sigma^*1S)^2 < (\sigma\ 2S)^2 < (\sigma^*2S)^2 < (\sigma\ 2Pz)^2 < (\pi 2Px)^2 = (\pi 2Py)^2 < (\pi^*2Px)^1 = (\pi^*2Py)^1 < \sigma^*2Pz$

Dr.H.K.Patel,Science College, Himatnagar

વિષમકીન્દ્રય દ્વિ-પરમાણુક અણુઓની આણ્વીય કક્ષકો માટેના શક્તિ સ્તર આલેખ
(Energy level diagram for Hetero nucleus diatomic molecules)

- જયારે અણુમાં બન્ને પરમાણું સમાન હોય ત્યારે બંધમાં રહેલા ઈલે.ની વહેચણી સમાન રીતે થાય છે, પરંતુ જયારે બે પરમાણું અસમાન હોય ત્યારે તેમની વિધુત ઋણતા અલગ હોવાને કારણે બંધમાં ઈલે.ની વહેચણી પણ અસમાન થાય છે.
- જે પરમાણુની વિધુત ઋણતા વધુ હોય તે પરમાણુ કક્ષકોને નીચી શક્તિ સપાટીએ દર્શાવામાં આવે છે અને તે પરમાણુ કક્ષકો કેન્દ્રની વધુ નજીક હોય છે.

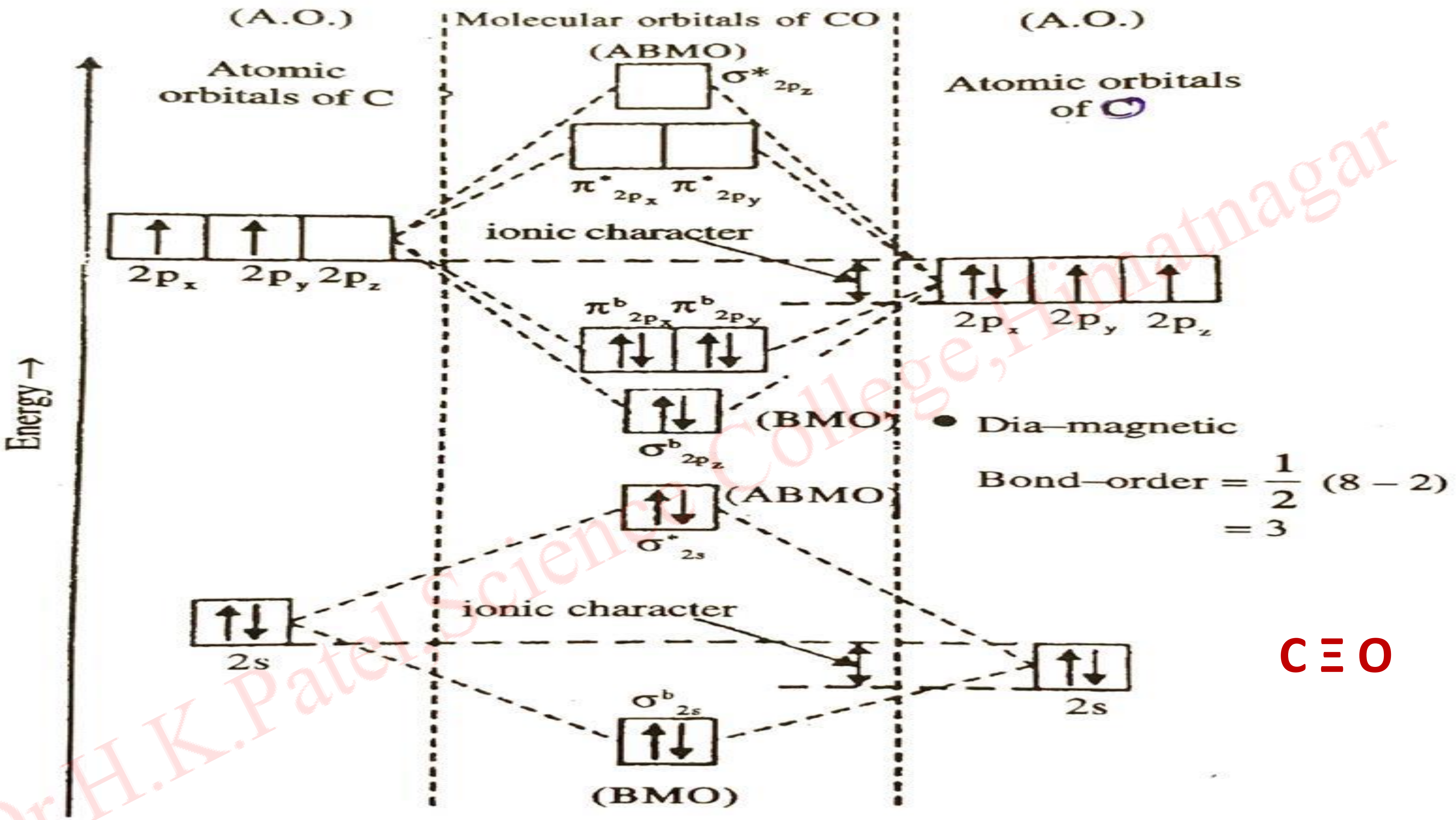
CO અણુ માટેનો શક્તિસ્તર આલેખ (Energy level diagram for CO molecules)

- CO અણુમા C તથા O પરમાણુની પરમાણ્વીય કક્ષકોની શક્તિ ભિન્ન–ભિન્ન હોય છે
- O ની શક્તિ-સપાટી C ની તુલનામાં નીચી હોય છે.
- C ની સંયોજ્કતા કોષમાં 4 ઈલે. અને O ની સંયોજ્કતા કોષમાં 6 ઈલે. એમ કુલ 10 ઈલે. CO અણુમાં આવેલા છે.

C (z=6) : $1S^2\ 2S^2\ 2Px^1\ 2Py^1\ 2Pz^0$

O (z=8) : $1S^2\ 2S^2\ 2Px^2\ 2Py^1\ 2Pz^1$

Dr.H.K.Patel Science College,Himatnagar



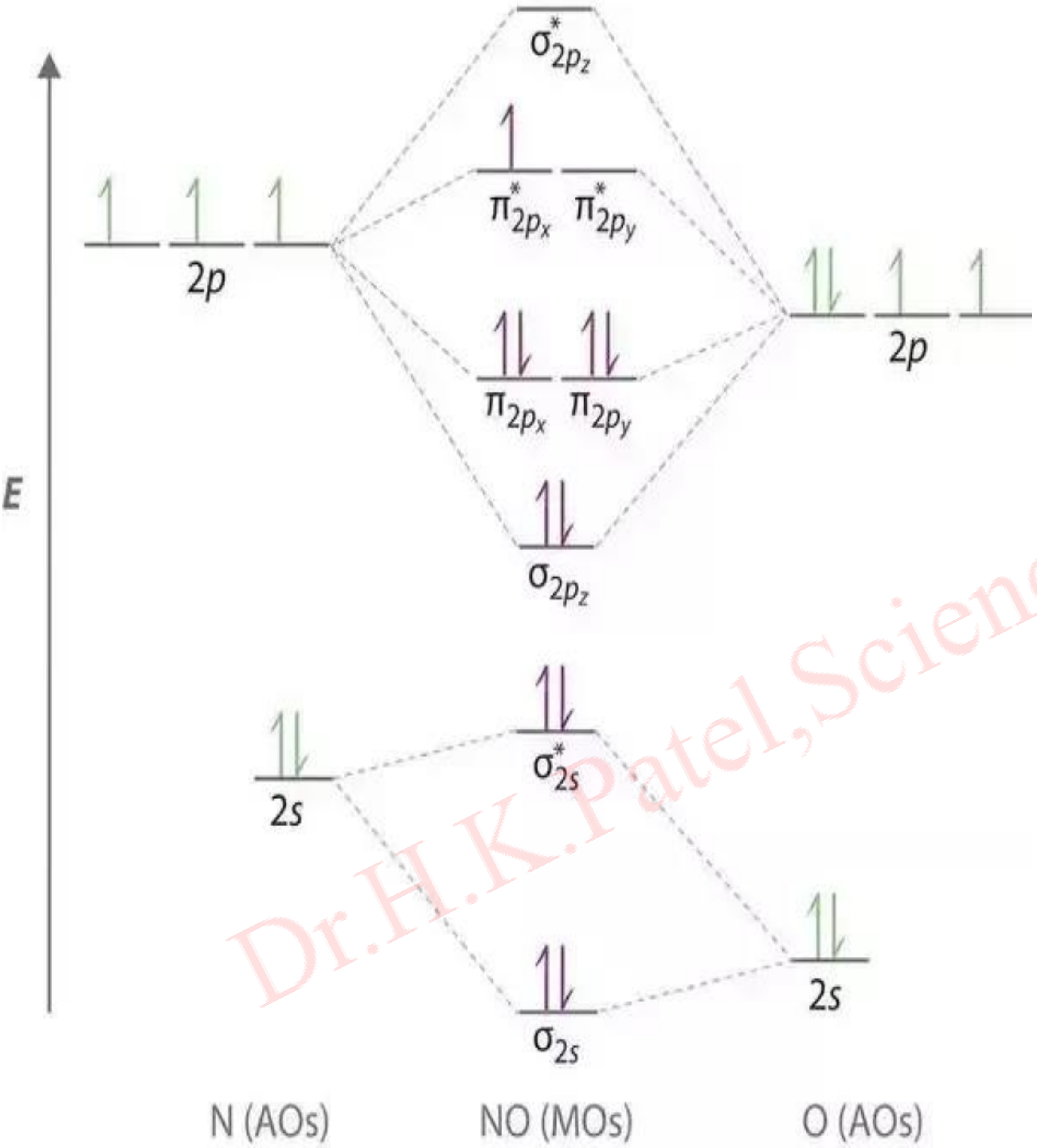
(વિષમ પરમાણ્વીય CO નો શક્તિ–સ્તર આલેખ)

C Ξ O

$(\sigma\ 1S)^2 < (\sigma^* 1S)^2 < (\sigma\ 2S)^2 < (\sigma^* 2S)^2 < (\sigma\ 2Pz)^2 < (\pi 2Px)^2 = (\pi 2Py)^2 < \pi^* 2Px = \pi^* 2Py < \sigma^* 2Pz$

Dr.H.K.Patel Science College, Himatnagar

NO અણુ માટેનો શક્તિસ્તર આલેખ (Energy level diagram for NO molecules)



- NO અણુમા N તથા O પરમાણુની પરમાણ્વીય કક્ષકોની શક્તિ ભિન્ન–ભિન્ન હોય છે
- O ની શક્તિ-સપાટી N ની તુલનામાં નીચી હોય છે.
- N ની સંયોજ્કતા કોષમાં 5 ઈલે. અને O ની સંયોજ્કતા કોષમાં 6 ઈલે. એમ કુલ 11 ઈલે. NO અણુમાં આવેલા છે.

N (z=7) : $1S^2\ 2S^2\ 2Px^1\ 2Py^1\ 2Pz^1$

O (z=8) : $1S^2\ 2S^2\ 2Px^2\ 2Py^1\ 2Pz^1$

- બંધક્રમાંક = $\frac{1}{2}[8 – 03]$

  = 2.5

- NO અણુની આણ્વીય કક્ષકોમાં એક અયુગ્મિત ઈલે.છે. તેથી તે અનુચુંબકીય(Peramagnetic) ગુણ ધરાવે છે.

Dr.H.K.Patel,Science College Himatnagar