એકમ 4

રાસાયણિક બંધન અને આણ્વીય રચના (Chemical Bonding and Molecular Structure)

હેતુઓ :

આ એકમના અભ્યાસ પછી તમે...

- રાસાયણિક બંધન માટે કોસેલ-લુઈસ અભિગમ સમજી શકશો.
- અષ્ટક નિયમ અને તેની મર્યાદાઓ સમજાવી શકશો. સાદા અણુઓની લુઈસ રચના દોરી શકશો.
- જુદા જુદા પ્રકારના બંધનોની રચના સમજાવી શકશો.
- VSEPR સિદ્ધાંત સમજાવી શકશો અને સાદા અણુઓની ભૂમિતિ વર્ણવી શકશો.
- સહસંયોજક બંધની રચના માટે સંયોજકતા બંધન અભિગમ સમજાવી શકશો.
- સહસંયોજક બંધના દિશામય ગુણધર્મોનું પ્રાક્કથન કરી શકશો.
- *s*, *p* અને *d* કક્ષકોને સમાવિષ્ટ કરતાં જુદા જુદા પ્રકારના સંકરણ સમજાવી શકશો અને સાદા સહસંયોજક અણુના આકાર દોરી શકશો.
- સમકેન્દ્રિય દ્વિપરમાણ્વીય અણુઓનો આણ્વીય કક્ષકવાદ વર્ણવી શકશો.
- હાઈડ્રોજન બંધનો ખ્યાલ સમજાવી શકશો.

"વૈજ્ઞાનિકો સતત નવા સંયોજનોની શોધમાં, તેમના વિશેની હકીકતો ક્રમિક રીતે ગોઠવવામાં, અસ્તિત્વ ધરાવતા (હાલમાં પ્રાપ્ત થતા) જ્ઞાન સાથે તેમને સમજાવવાનો પ્રયત્ન કરવામાં નવીન અવલોકિત થયેલી હકીકતોને સમજાવવા માટે અગાઉના મંતવ્યોને સુધારવામાં અથવા નવા સિદ્ધાંતોનો ઉદય કરવાના પ્રયત્નો કરી રહ્યા છે."

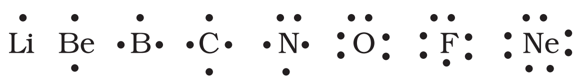
દ્રવ્ય એક અથવા જુદા જુદા પ્રકારના તત્ત્વોનું બનેલું છે. સામાન્ય પરિસ્થિતિમાં ઉમદા વાયુઓ સિવાયનું કોઈ તત્ત્વ કુદરતમાં સ્વતંત્ર રીતે અસ્તિત્વ ધરાવતું જાણવા મળ્યું નથી, છતાં પરમાણુઓનો સમૂહ જે અસ્તિત્વ ધરાવે છે તે લાક્ષણિક ગુણધર્મો ધરાવતી સ્પીસિઝને અથવા પરમાણુના સમૂહને અણુ કહે છે. એ સ્વાભાવિક છે કે આ ઘટક કણોને અણુમાં સાથે બાંધી રાખવા માટે કોઈ બળ હોવું જોઈએ. **જુદી જુદી રાસાયણિક સ્પીસિઝમાં જુદા જુદા ઘટકોને (પરમાણુઓ, અણુઓ, આયનો વગેરે) એક સાથે જકડી રાખે છે. તે આકર્ષણ બળને રાસાયણિક બંધન કહે છે.** રાસાયણિક સંયોજનોની રચના જુદા જુદા તત્ત્વોના જુદી જુદી રીતે સંયોગીકરણના પરિણામરૂપે હોય છે. આને લીધે ઘણા પ્રશ્નો ઉદ્ભવે છે. પરમાણુઓ શા માટે સંયોજાય છે ? શા માટે અમુક ચોક્કસ સંયોજનો શક્ય છે ? શા માટે અમુક પરમાણુઓ સંયોજાય છે અને બીજા કેટલાક સંયોજાતા નથી ? શા માટે અણુઓ ચોક્કસ આકાર ધરાવે છે. આવા પ્રશ્નોના ઉત્તર માટે સમય અનુસાર જુદા જુદા સિદ્ધાંતો અને ખ્યાલો રજૂ કરવામાં આવેલ છે. જેમાં કોસેલ-લુઈસ અભિગમ, સંયોજકતા કોશ ઈલેક્ટ્રૉન યુગ્મ અપાકર્ષણ (VSEPR) સિદ્ધાંત, સંયોજકતા બંધન (VB) વાદ અને આણ્વીય કક્ષક (MO) વાદ વગેરે છે. સંયોજકતાના જુદા જુદા સિદ્ધાંતો અને રાસાયણિક બંધનમાં તેમનું અર્થઘટન વગેરે પરમાણુની રચના, તત્ત્વોની ઈલેક્ટ્રૉનીય રચના અને આવર્ત કોષ્ટકને સમજાવવાના વિકાસ સાથે સંબંધિત છે. દરેક પ્રણાલી વધુ સ્થાયી થવાની વૃત્તિ રાખે છે અને બંધન આ પ્રકારનું પ્રણાલીની શક્તિ ઘટાડવાનું કામ કરે છે અને સ્થાયીતા મેળવે છે.

4.1 રાસાયણિક બંધન અંગેનો કોસેલ-લુઈસ અભિગમ (Kossel-Lewis Approach to Chemical Bonding)

ઈલેક્ટ્રૉનના સંદર્ભમાં રાસાયણિક બંધનની રચના સમજાવવા માટે ઘણા પ્રયત્નો થયા હતા. પરંતુ માત્ર 1916માં કોસેલ અને લુઈસ સ્વતંત્ર રીતે સંતોષકારક સમજણ આપવામાં સફળ રહ્યા. તેઓ સૌપ્રથમ હતા જેમણે સંયોજકતા વિશે તર્કબદ્ધ સમજૂતી આપી જે ઉમદા વાયુઓની નિષ્ક્રિયતા પર આધારિત હતી.

લુઈસે પરમાણુને એક ધનભાર ધરાવતા 'કર્નેલ' (Kernel) (કેન્દ્ર વત્તા અંદરના ઈલેક્ટ્રૉન) તરીકે ગણ્યું અને જણાવ્યું કે બાહ્ય કોશમાં વધુમાં વધુ આઠ ઈલેક્ટ્રૉન સમાઈ શકે. વિશેષમાં એ પણ જણાવ્યું કે આ આઠ ઈલેક્ટ્રૉન કર્નેલની આસપાસ સમઘનના આઠેય ખૂણાઓ પર ગોઠવાય છે. આમ, સોડિયમનો બાહ્ય કક્ષાનો ઈલેક્ટ્રૉન સમઘનના એક ખૂણા પર ગોઠવાશે. જ્યારે ઉમદા વાયુની બાબતમાં આઠ ઈલેક્ટ્રૉન ગોઠવાયેલા હશે. ઈલેક્ટ્રૉનનું આ અષ્ટક વિશિષ્ટ રીતે સ્થાયી ઈલેક્ટ્રૉનીય ગોઠવણી રજૂ કરે છે. **લુઈસે પ્રતિપાદિત કર્યું કે પરમાણુ જ્યારે રાસાયણિક બંધનથી જોડાય છે, ત્યારે સ્થાયી અષ્ટક પ્રાપ્ત કરે છે.** સોડિયમ અને ક્લોરિનની બાબતમાં સોડિયમમાંથી એક ઈલેક્ટ્રૉન ક્લોરિન પરમાણુમાં બદલી પામે છે જેથી Na^+ અને Cl^- આયન આપે છે. Cl_2, H_2, F_2 વગેરે જેવા બીજા અણુઓમાં બંધ પરમાણુઓના ઈલેક્ટ્રૉન યુગ્મની ભાગીદારીથી બને છે. આ પ્રક્રિયામાં દરેક પરમાણુ **ઈલેક્ટ્રૉનનું સ્થાયી બાહ્ય અષ્ટક** પ્રાપ્ત કરે છે.

લુઈસ સંજ્ઞાઓ : અણુની રચનામાં માત્ર બાહ્ય કોશના ઈલેક્ટ્રૉન રાસાયણિક બંધનમાં ભાગ લે છે અને તે **સંયોજકતા ઈલેક્ટ્રૉન** તરીકે ઓળખાય છે. અંદરના કોશના ઈલેક્ટ્રૉન સારી રીતે સંરક્ષિત રહે છે અને સામાન્ય રીતે સંયોગીકરણ પ્રક્રિયામાં સમાવિષ્ટ થતાં નથી. અમેરિકન રસાયણશાસ્ત્રી જી. એન. લુઈસે (G. N. Lewis) પરમાણુમાં સંયોજકતા ઈલેક્ટ્રૉન દર્શાવવા માટે સાદા સંકેતો દાખલ કર્યા. આ સંકેતો **લુઈસ સંજ્ઞા** કહેવાય છે. ઉદાહરણ તરીકે લઈએ તો બીજા આવર્તના તત્ત્વોની લુઈસ સંજ્ઞા નીચે પ્રમાણે છે :



લુઈસ સંજ્ઞાની સાર્થકતા (significance) : તત્ત્વની ચોપાસના બિંદુ સંયોજકતા ઈલેક્ટ્રૉનની સંખ્યા દર્શાવે છે. આ સંયોજકતા ઈલેક્ટ્રૉનની સંખ્યા તત્ત્વની સામાન્ય અથવા **સમૂહ સંયોજકતા** ગણવામાં મદદરૂપ થાય છે. સામાન્ય રીતે સમૂહ સંયોજકતા લુઈસ સંજ્ઞામાં ઈલેક્ટ્રૉનની સંખ્યા અને આઠમાંથી બિંદુની સંખ્યા (અથવા સંયોજકતા ઈલેક્ટ્રૉન) બાદ કરતાં મળે છે.

કોસેલે રાસાયણિક બંધનના સંબંધમાં નીચેની હકીકતો પ્રત્યે ધ્યાન દોર્યું.

- આવર્તકોષ્ટકમાં સૌથી ઊંચા વિદ્યુતઋણ હેલોજન અને ઊંચી વિદ્યુતધન આલ્કલી ધાતુઓ ઉમદા વાયુથી અલગ કરેલ છે.
- હેલોજન પરમાણુમાંથી ઋણ આયન અથવા આલ્કલી ધાતુના ધન આયન અનુક્રમે ઈલેક્ટ્રૉન મેળવીને અથવા ગુમાવીને રચાય છે.
- આ રીતે બનેલા ઋણ અને ધન આયનો સ્થાયી ઉમદા વાયુ જેવી ઈલેક્ટ્રૉનીય રચના પ્રાપ્ત કરે છે. ઉમદા વાયુઓ (હિલિયમને અપવાદ સાથે જે બે જ ઈલેક્ટ્રૉન ધરાવે છે.) આઠ ઈલેક્ટ્રૉનની (અષ્ટક) સ્થાયી બાહ્ય કોશ રચના ઈલેક્ટ્રૉન ns^2np^6 આપે છે.
- ઋણ અને ધન આયનો સ્થિરવિદ્યુતીય આકર્ષણથી સ્થાયી થાય છે.

ઉદાહરણ તરીકે લઈએ તો સોડિયમ અને ક્લોરિનમાંથી NaClની રચના ઉપરની પદ્ધતિ પ્રમાણે નીચે પ્રમાણે લખી શકાય :

$$Na \rightarrow Na^+ + e^-$$
$$[Ne]\,3s^1 \qquad [Ne]$$
$$Cl + e^- \rightarrow Cl^-$$
$$[Ne]\,3s^2\,3p^5 \qquad [Ne]\,3s^2\,3p^6 \text{ અથવા } [Ar]$$
$$Na^+ + Cl^- \rightarrow NaCl \text{ અથવા } Na^+Cl^-$$

એ જ પ્રમાણે CaF_2 ની રચના નીચે પ્રમાણે દર્શાવી શકાય :

$$Ca \rightarrow Ca^{2+} + 2e^-$$
$$[Ar]4s^2 \qquad [Ar]$$
$$F + e^- \rightarrow F^-$$
$$[He]\,2s^2\,2p^5 \qquad [He]\,2s^2\,2p^6 \text{ અથવા } [Ne]$$
$$Ca^{2+} + 2F^- \rightarrow CaF_2 \text{ અથવા } Ca^{2+}[F^-]_2$$

ધન આયન અને ઋણ આયન વચ્ચે સ્થિરવિદ્યુતીય આકર્ષણના પરિણામરૂપે રચાતા આ બંધને વિદ્યુતસંયોજક

બંધ (electrovalent bond) કહે છે. આમ, વિદ્યુતસંયોજકતા આયન પરના એકમ ભારની સંખ્યા છે. આમ ધન કૅલ્શિયમની વિદ્યુતસંયોજકતાનો બે વડે નિર્દેશ થાય છે, જ્યારે ફ્લોરિનની ઋણ વિદ્યુતસંયોજકતા એક તરીકે નિર્દેશિત થાય છે.

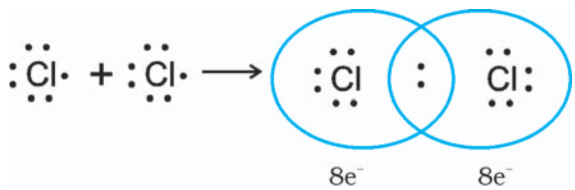
કોસેલે કરેલી અભિધારણાઓ ઇલેક્ટ્રૉન હેરફેર વડે આયનની રચનાને અને આયનીય સ્ફટિકમય સંયોજનો અંગેનો આધુનિક ખ્યાલ પૂરો પાડે છે. આયનીય સંયોજનની સમજણમાં અને પદ્ધતિકરણ માટે કોસેલની અભિધારણાઓ ખૂબ જ મૂલ્યવાન બનેલ છે. તે સાથે સાથે તેમણે એ પણ હકીકતને પિછાણી કે મોટા ભાગના સંયોજનો આ ખ્યાલ સાથે મેળ ધરાવતા નથી.

4.1.1 અષ્ટક નિયમ (Octet Rule)

કોસેલ અને લુઇસે 1916માં પરમાણુઓ વચ્ચે રાસાયણિક સંયોગીકરણનો અગત્યનો સિદ્ધાંત વિકસાવ્યો જે **રાસાયણિક બંધનનો ઇલેક્ટ્રૉનીય વાદ** છે. આ નિયમ પ્રમાણે પરમાણુઓ સંયોજકતા ઇલેક્ટ્રૉન એક પરમાણુમાંથી બીજા પરમાણુમાં સ્થાનાંતરણ (transfer) દ્વારા (ઇલેક્ટ્રૉન મેળવીને કે ગુમાવીને) અથવા સંયોજકતા ઇલેક્ટ્રૉનની ભાગીદારી કરી તેમની સંયોજકતા કોશોનું અષ્ટક બનાવે છે. આને **અષ્ટક નિયમ** કહે છે.

4.1.2 સહસંયોજક બંધ (Covalent Bond)

લેંગ્મ્યુરે (Langmuir) 1919માં લુઇસ (Lewis)ની ધારણામાં સુધારો સૂચવ્યો અને અષ્ટકની સ્થાયી સમઘનીય રચનાને ફગાવી દીધી. તેને બદલે **સહસંયોજક બંધ** પર્યાય દાખલ કર્યો. લુઇસ-લેંગ્મ્યુર સિદ્ધાંત Cl_2 અણુની રચનાથી સમજી શકાય. $[Ne]3s^23p^5$ ઇલેક્ટ્રૉનીય રચના ધરાવતો Cl પરમાણુ આર્ગોન રચના કરતાં એક ઇલેક્ટ્રૉન ઓછો ધરાવે છે. Cl_2 અણુની રચના એ રીતે સમજી શકાય કે દરેક ક્લોરિન પરમાણુ ઇલેક્ટ્રૉન યુગ્મ(pair)ની ભાગીદારી કરે છે. દરેક Cl પરમાણુ એકએક ઇલેક્ટ્રૉન આપીને સહિયારી જોડ બનાવે છે. આમ કરવામાં બન્ને ક્લોરિન પરમાણુ બાહ્ય કોશનું અષ્ટક નજીકના ઉમદા વાયુ (એટલે આર્ગોન) જેવું પ્રાપ્ત કરે છે.



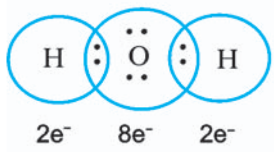
અથવા Cl – Cl

બે Cl પરમાણુઓ વચ્ચે સહસંયોજક બંધ

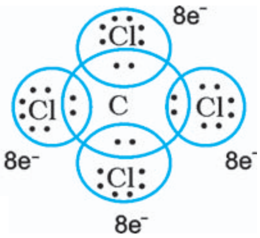
બિંદુઓ ઇલેક્ટ્રૉનને દર્શાવે છે. આવી રચના લુઇસ રચના તરીકે ઓળખાય છે.

બીજા અણુઓ માટે પણ લુઇસ બિંદુ રચના લખી શકાય. જેમાં સંયોજાતા પરમાણુઓ એકસરખા હોય અથવા અલગ અલગ હોય. જરૂરી શરતો આ પ્રમાણે છે :

- દરેક બંધ પરમાણુઓ વચ્ચે ઇલેક્ટ્રૉન ભાગીદારીનું પરિણામ છે.
- દરેક સંયોજાતો પરમાણુ ભાગીદારી યુગ્મને ઓછામાં ઓછો એક ઇલેક્ટ્રૉન આપે છે.
- ઇલેક્ટ્રૉનની ભાગીદારીના પરિણામરૂપે સંયોજાતા પરમાણુઓની બાહ્ય કોશ ઉમદા વાયુ જેવી રચના ધારણ કરે છે.
- આમ પાણી અને કાર્બન ટેટ્રાક્લોરાઇડ અણુઓમાં સહસંયોજક બંધની રચના નીચે પ્રમાણે છે :

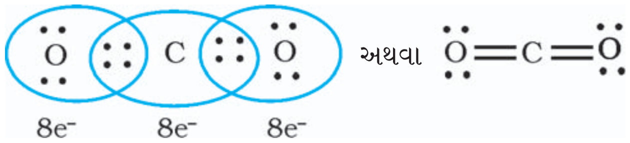


H પરમાણુઓ જોડકું (dublet) પ્રાપ્ત કરે છે અને O અષ્ટક

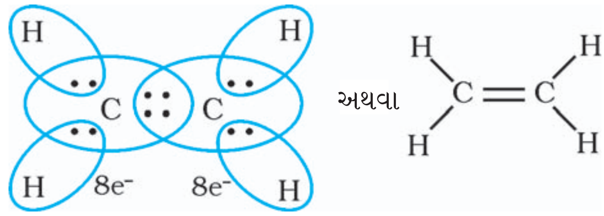


ચાર Cl પરમાણુ અને C પરમાણુ દરેક ઇલેક્ટ્રૉનથી અષ્ટક રચે છે.

આમ જ્યારે બે પરમાણુ એક-એક ઇલેક્ટ્રૉનની ભાગીદારી કરી યુગ્મ રચે છે તેને એક સહસંયોજક બંધથી જોડાયેલા કહેવાય છે. ઘણા અણુઓ પરમાણુઓ વચ્ચે આપણને **બહુ**(ગુણક) (multiple) **બંધ** મળે છે. બહુ બંધની રચના એમ દર્શાવે છે કે બે પરમાણુઓ વચ્ચે એક કરતાં વધારે ઇલેક્ટ્રૉન યુગ્મ છે. જો પરમાણુઓ **ઇલેક્ટ્રૉનના બે યુગ્મોની ભાગીદારી કરે તો તેમની વચ્ચે રચાતા સહસંયોજક બંધને દ્વિબંધ કહે છે.** ઉદાહરણ તરીકે લઈએ તો કાર્બન ડાયૉક્સાઇડ અણુમાં કાર્બન અને ઑક્સિજન પરમાણુઓ વચ્ચે બે દ્વિબંધ આપણને મળશે. એ જ પ્રમાણે ઈથીન અણુમાં બે કાર્બન પરમાણુઓ દ્વિબંધથી જોડાયેલ છે.

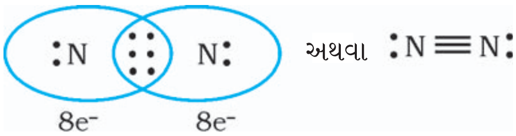


CO_2 અણુમાં દ્વિબંધ

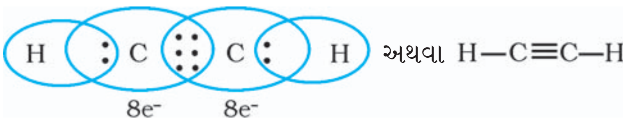


C_2H_4 અણુ

જ્યારે સંયોજાતા પરમાણુઓ ત્રણ ઈલેક્ટ્રૉન યુગ્મની ભાગીદારી કરે છે જેમકે N_2 અણુ બે નાઈટ્રોજન પરમાણુ અને બે કાર્બન પરમાણુઓ ઈથાઈન અણુમાં. તેથી ત્રિબંધ રચાય છે.



N_2 અણુ



C_2H_2 અણુ

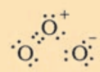
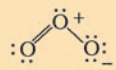
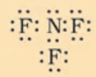
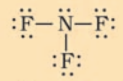
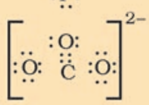
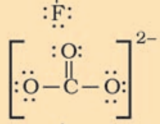
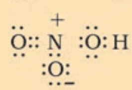
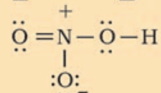
4.1.3 સાદા અણુઓની લુઈસ રજૂઆત (લુઈસ રચનાઓ) (Lewis Representation of Simple Molecules - the Lewis Structures)

લુઈસ બિંદુ રચના અણુઓ અને આયનોમાં બંધન તેમની ભાગીદારી કરેલા ઈલેક્ટ્રૉન યુગ્મ અને અષ્ટક નિયમના સંદર્ભમાં સમજાવે છે. આવું ચિત્ર અણુનું બંધન અને વર્તણૂક સંપૂર્ણ રીતે સમજાવી શકે નહિ, પરંતુ મહદ્ અંશે અણુની રચના અને ગુણધર્મોને સમજવામાં મદદરૂપ બને છે. આથી અણુઓની લુઈસ બિંદુ રચના લખવી ઘણી ઉપયોગી છે. લુઈસ બિંદુ રચના નીચેના સોપાનો સ્વીકારીને લખી શકાય.

- રચના લખવા માટે જરૂરી ઈલેક્ટ્રૉનની કુલ સંખ્યા સંયોજાતા પરમાણુઓના સંયોજકતા ઈલેક્ટ્રૉનનો ઉમેરો કરીને મેળવાય છે. ઉદાહરણ તરીકે CH_4 અણુમાં બંધન માટે આઠ સંયોજકતા ઈલેક્ટ્રૉન પ્રાપ્ય છે. (4 કાર્બનમાંથી અને ચાર હાઈડ્રોજનના ચાર પરમાણુમાંથી).
- ઋણાયન માટે દરેક ઋણભારનો અર્થ એમ થાય કે એક ઈલેક્ટ્રૉનનો ઉમેરો. ધનાયન માટે ધનભાર કુલ સંયોજકતા ઈલેક્ટ્રૉનની સંખ્યામાંથી એકની બાદબાકી. ઉદાહરણ તરીકે લઈએ તો CO_3^{2-} આયનનો બે ઋણભાર સૂચવે છે કે તટસ્થ પરમાણુ માટે જરૂરી ઈલેક્ટ્રૉન કરતાં બે વધારે છે. NH_4^+ આયન માટે એક ધનભાર સૂચવે છે કે તટસ્થ પરમાણુઓમાંના સમૂહમાંથી એક ઈલેક્ટ્રૉન ગુમાવે છે.
- જો સંયોજાતા પરમાણુઓની રાસાયણિક સંજ્ઞાઓ જાણતા હોઈએ અને માળખાંકીય (skeletal) રચનાનું (જ્ઞાન હોય અથવા સમજણપૂર્વક અનુમાન કરેલું હોય) જ્ઞાન હોય તો ઈલેક્ટ્રૉનની કુલ સંખ્યાને કુલ બંધના પ્રમાણમાં બંધન યુગ્મ ભાગીદારીની વહેંચણી પરમાણુઓ વચ્ચે કરી શકાય છે.
- સામાન્ય રીતે અણુ/આયનમાં સૌથી ઓછો વિદ્યુતઋણ પરમાણુ કેન્દ્રમાં સ્થાન લે છે. ઉદાહણ તરીકે NF_3 અને CO_3^{2-}માં નાઈટ્રોજન અને કાર્બન કેન્દ્રીય પરમાણુઓ છે, જ્યારે ફ્લોરિન અને ઑક્સિજન છેડાના (terminal) સ્થાન પ્રાપ્ત કરે છે.
- એકલ બંધની ઈલેક્ટ્રૉન ભાગીદારીની જોડ માટે ગણતરી કર્યા પછી વધારાના ઈલેક્ટ્રૉન યુગ્મ બહુ બંધનમાં ઉપયોગમાં લેવાય છે અથવા અબંધકારક યુગ્મ (lone pair) તરીકે રહે છે. મૂળ જરૂરિયાત એ છે કે બંધિત પરમાણુ ઈલેક્ટ્રૉનનું અષ્ટક પ્રાપ્ત કરે.

કોષ્ટક 4.1માં કેટલાક અણુઓ/આયનોની લુઈસ રજૂઆત આપવામાં આવી છે.

કોષ્ટક 4.1 કેટલાક અણુઓની લુઈસ રજૂઆત

અણુ/આયન		લુઈસ રજૂઆત
H_2	H : H*	H – H
O_2	:Ö::Ö:	:Ö=Ö:
O_3		
NF_3		
CO_3^{2-}		
HNO_3		

* દરેક H પરમાણુ હિલિયમની રચના પ્રાપ્ત કરે છે (ઇલેક્ટ્રૉનનું જોડકું).

કોયડો 4.1

CO અણુની લુઈસ બિંદુ રચના લખો.

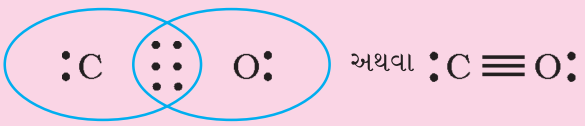
ઉકેલ :

સોપાન 1 : કાર્બન અને ઑક્સિજન પરમાણુના કુલ સંયોજકતા ઈલેક્ટ્રૉન ગણો. કાર્બન અને ઑક્સિજન પરમાણુઓની બાહ્ય (સંયોજકતા) કોશ રચના અનુક્રમે $2s^2 2p^2$ અને $2s^2 2p^4$ પ્રાપ્ય ઈલેક્ટ્રૉનની સંખ્યા $4 + 6 = 10$ થશે.

સોપાન 2 : COની માળખાંકીય રચના C O તરીકે લખી શકાય.

સોપાન 3 : C અને O વચ્ચે એકલ બંધ (ભાગીદારી ઈલેક્ટ્રૉન યુગ્મ) દોરો અને O ઉપર અષ્ટક પૂર્ણ કરો. બાકીના બે ઈલેક્ટ્રૉન C પરનું અબંધકારક યુગ્મ છે.

આ કાર્બન પર અષ્ટક પૂરું થતું નથી અને તેથી C અને O પરમાણુ વચ્ચે બહુ બંધ(ત્રિબંધની બાબતમાં)નો સહારો લેવો પડે. આ પ્રમાણે કરવાથી બન્ને પરમાણુઓ માટેના અષ્ટક નિયમોની શરતોને સંતોષી શકાશે.



કોયડો 4.2

નાઈટ્રાઈટ આયન NO_2^-ની લુઈસ રચના લખો.

ઉકેલ :

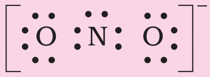
સોપાન 1 : નાઈટ્રોજન પરમાણુ અને ઑક્સિજન પરમાણુના કુલ ઈલેક્ટ્રૉનની સંખ્યા અને એક વધારાનો ઈલેક્ટ્રૉન ઋણ આયનનો ગણો.

$$N(2s^2 2p^3),\ O(2s^2 2p^4)$$

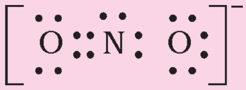
$$5 + 2(6) + 1 = 18 \text{ ઈલેક્ટ્રૉન}$$

સોપાન 2 : NO_2^-ની માળખાંકીય રચના O N O.

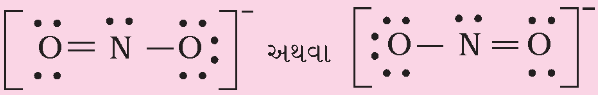
સોપાન 3 : નાઈટ્રોજન અને દરેક ઑક્સિજન પરમાણુઓ વચ્ચે એકલ બંધ (એક ભાગીદારી ઈલેક્ટ્રૉન યુગ્મ), ઑક્સિજન પરમાણુઓના અષ્ટક પૂર્ણ કરો. આમ કરવા છતાં નાઈટ્રોજન પર અષ્ટક પૂર્ણ થતું નથી. બાકી રહેલા બે ઈલેક્ટ્રૉન તેના પર અબંધકારક યુગ્મ તરીકે રહેશે.



આથી આપણે નાઈટ્રોજન અને ગમે તે એક ઑક્સિજન વચ્ચે બહુ બંધનનો સહારો લેવો પડશે (આ બાબતમાં દ્વિબંધ). આને પરિણામે લુઈસ બિંદુ રચના નીચે પ્રમાણે થશે :



અથવા



4.1.4 નિયમનિષ્ઠ ભાર (Formal Charge)

બહુપરમાણ્વીય આયનોની બાબતમાં અણુઓના ખરેખર આકાર સામાન્ય રીતે લુઈસ બિંદુ રચનાથી રજૂ કરી શકાતા નથી. કારણ કે આયનમાં દરેક પરમાણુથી નહિ, પરંતુ એકંદરે આયન પરનો કુલ ભાર ધરાવે છે, પરંતુ દરેક પરમાણુ પર નિયમનિષ્ઠ ભાર સૂચવવાનું શક્ય છે. બહુપરમાણ્વીય અણુ અથવા આયનના નિયમનિષ્ઠ ભારની વ્યાખ્યા આપી શકાય. અલગ અથવા મુક્ત અવસ્થામાં પરમાણુ હોય ત્યારે સંયોજકતા ઈલેક્ટ્રૉનની સંખ્યા અને લુઈસ રચના પ્રમાણે તે પરમાણુને સૂચિત ઈલેક્ટ્રૉનની સંખ્યાના તફાવતને નિયમનિષ્ઠ ભાર કહે છે. તે નીચે પ્રમાણે દર્શાવી શકાય :

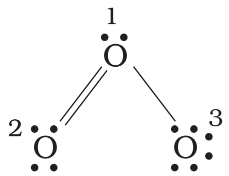
લુઈસ રચનામાં પરમાણુ પરનો નિયમનિષ્ઠ ભાર (F.C.) =

[મુક્ત પરમાણુમાં સંયોજકતા ઈલેક્ટ્રૉનની કુલ સંખ્યા] − [અબંધકારક ઈલેક્ટ્રૉનની કુલ સંખ્યા]

$-\frac{1}{2}$ [બંધકારક ઈલેક્ટ્રૉન (ભાગીદારી કરેલા ઈલેક્ટ્રૉન)ની કુલ સંખ્યા]

આ ગણતરી એ ધારણાના આધારે કરવામાં આવી છે કે અણુમાં દરેક પરમાણુના દરેક ભાગીદાર યુગ્મનો એક ઈલેક્ટ્રૉન અને અબંધકારક યુગ્મના બન્ને ઈલેક્ટ્રૉન તેના પોતાના છે.

આપણે ઓઝોન અણુ (O_3)નો વિચાર કરીએ. O_3ની લુઈસ રચના નીચે પ્રમાણે દોરી શકાય :



પરમાણુઓને 1, 2, 3 ક્રમ આપેલ છે. નિયમનિષ્ઠ ભાર નીચે પ્રમાણે થશે :

- મધ્યસ્થ O પરમાણુ જેને 1થી દર્શાવેલ છે.

  $= 6 - 2 - \frac{1}{2}(6) = +1$

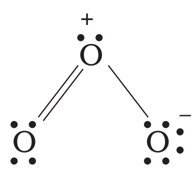
- છેડા પરનો O પરમાણુ જેને 2થી દર્શાવેલ છે.

  $= 6 - 4 - \frac{1}{2}(4) = 0$

- છેડા પરનો O પરમાણુ જેને 3થી દર્શાવેલ છે.

  $= 6 - 6 - \frac{1}{2}(2) = -1$

આથી O_3ને નિયમનિષ્ઠ ભાર સાથે નીચે પ્રમાણે રજૂ કરી શકીએ :



આપણે સમજવું જોઈએ કે નિયમનિષ્ઠ ભાર અણુમાં સાચું ભાર અલગીકરણ દર્શાવતો નથી. ભારનો નિર્દેશ કરવાથી આપણને અણુમાં સંયોજકતા ઈલેક્ટ્રૉનનો માર્ગ (track) જાણવામાં મદદ કરે છે. નિયમનિષ્ઠ ભાર શક્ય લુઈસ રચનાઓની સંખ્યામાંથી નિમ્નતમ ઊર્જા ધરાવતી રચનાની પસંદગી કરવામાં મદદરૂપ થાય છે. **સામાન્ય રીતે નિમ્નતમ ઊર્જા રચના એ છે કે જેમાં સૌથી ઓછો નિયમનિષ્ઠ ભાર છે. નિયમનિષ્ઠ ભાર એવું પરિબળ (factor) છે જે બંધનના શુદ્ધ સહસંયોજક ખ્યાલ જેમાં પડોશી પરમાણુઓથી સમાન રીતે ભાગીદાર થયેલ ઈલેક્ટ્રૉન યુગ્મ છે.**

4.1.5 અષ્ટક નિયમની મર્યાદાઓ (Limitations of the Octet Rule)

અષ્ટક નિયમ ઉપયોગી હોવા છતાં પણ સાર્વત્રિક નથી. મોટા ભાગના કાર્બનિક સંયોજનોની રચના સમજવા માટે ઉપયોગી છે અને તે મુખ્યત્વે આવર્તકોષ્ટકના બીજા આવર્તના તત્ત્વોને લાગુ પડે છે. આ અષ્ટકના નિયમને ત્રણ પ્રકારના અપવાદ છે.

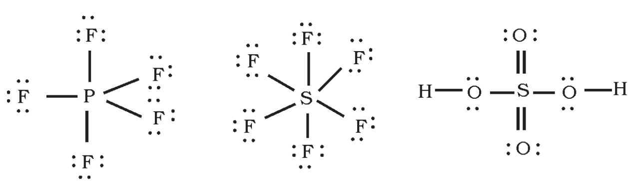
મધ્યસ્થ પરમાણુનું અપૂર્ણ અષ્ટક : કેટલાક સંયોજનોનાં મધ્યસ્થ પરમાણુની આસપાસ ઈલેક્ટ્રૉનની સંખ્યા આઠ કરતાં ઓછી હોય છે. આ ખાસ કરીને જે તત્ત્વોના સંયોજકતા ઈલેક્ટ્રૉન ચાર કરતાં ઓછા છે તેને માટે છે. ઉદાહરણ તરીકે LiCl, BeH_2 અને BCl_3.

Li, Be અને B અનુક્રમે 1, 2 અને 3 સંયોજકતા ઈલેક્ટ્રૉન ધરાવે છે, આવા બીજા સંયોજનો $AlCl_3$, BF_3 છે.

એકી ઈલેક્ટ્રૉન અણુઓ : એકી ઈલેક્ટ્રૉનની સંખ્યા ધરાવતા અણુઓ જેવાં કે નાઈટ્રિક ઑક્સાઈડ NO અને નાઈટ્રોજન ડાયૉક્સાઈડ NO_2માં દરેક પરમાણુ માટે અષ્ટક નિયમ સંતોષકારક નથી.

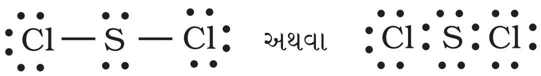
વિસ્તરિત (Expanded) અષ્ટક : આવર્તકોષ્ટકના ત્રીજા અને પછીના આવર્તોમાં 3*s* અને 3*p* કક્ષકો ઉપરાંત 3*d*-કક્ષકો બંધન માટે પ્રાપ્ય હોય છે. આ તત્ત્વોના ઘણા સંયોજનોમાં મધ્યસ્થ પરમાણુની આસપાસ આઠ કરતાં વધારે ઈલેક્ટ્રૉન હોય છે. આને વિસ્તરિત અષ્ટક કહે છે. આવી બાબતોમાં અષ્ટક નિયમ લાગુ પડતો નથી.

આવા સંયોજનોના કેટલાક ઉદાહરણો જેવાં કે PF_5, SF_6, H_2SO_4 અને ઘણા બધા સવર્ગ સહસંયોજક સંયોજનો.



PF_5	SF_6	H_2SO_4
P પરમાણુની આસપાસ 10 ઈલેક્ટ્રૉન	S પરમાણુની આસપાસ 12 ઈલેક્ટ્રૉન	સલ્ફર પરમાણુની આસપાસ 12 ઈલેક્ટ્રૉન

એ રસપ્રદ છે કે સલ્ફર પરમાણુ ઘણા સંયોજનો બનાવે છે, જેમાં અષ્ટકનો નિયમ પળાય છે. સલ્ફર ડાયક્લોરાઇડમાં S પરમાણુને તેની આસપાસ ઇલેક્ટ્રૉનનું અષ્ટક હોય છે.



અષ્ટક નિયમની બીજી ખામીઓ :

- એ સ્પષ્ટ છે કે અષ્ટક નિયમ ઉમદા વાયુઓની રાસાયણિક નિષ્ક્રિયતાના પાયા પર રચાયેલો છે. આમ છતાં કેટલાંક ઉમદા વાયુઓ (ઝેનોન અને ક્રિપ્ટોન) ઑક્સિજન અને ફ્લોરિન સાથે સંયોજાય છે અને XeF_2, KrF_2, $XeOF_2$ વગેરે જેવા ઘણા સંયોજનો બનાવે છે.
- આ સિદ્ધાંત અણુઓના આકાર સમજાવી શકતો નથી.
- તે અણુઓની સાપેક્ષ સ્થાયીતા પણ સમજાવી શકતો નથી અને અણુની ઊર્જા બાબતમાં સંપૂર્ણ મૂક (silent) છે.

4.2 આયનીય અથવા વિદ્યુતસંયોજક બંધ (Ionic or Electrovalent Bond)

કોસેલ અને લુઇસના સિદ્ધાંતના ઉપયોગથી આયનીય બંધની રચના સમજતાં તે એમ દર્શાવે છે કે આયનીય સંયોજનો નીચેની બાબતો પર આધાર રાખશે :

- અનુવર્તી તટસ્થ પરમાણુઓમાંથી ધન અથવા ઋણ આયનોની બનવાની સરળતા.
- ઘનમાં ધન અને ઋણ આયનોની ગોઠવણી એટલે કે સ્ફટિકમય સંયોજનની લેટિસ.

ધન આયનની રચનામાં આયનીકરણ સંકળાયેલ છે એટલે કે ઇલેક્ટ્રૉનનું તટસ્થ પરમાણુમાંથી દૂર થવું અને ઋણ આયનની રચના એટલે ઇલેક્ટ્રૉનનો તટસ્થ પરમાણુમાં ઉમેરો.

$M(g) \rightarrow M^+(g) + e^-$; આયનીકરણ એન્થાલ્પી

$X(g) + e^- \rightarrow X^-(g)$;

ઇલેક્ટ્રૉન પ્રાપ્તિ (gain) એન્થાલ્પી

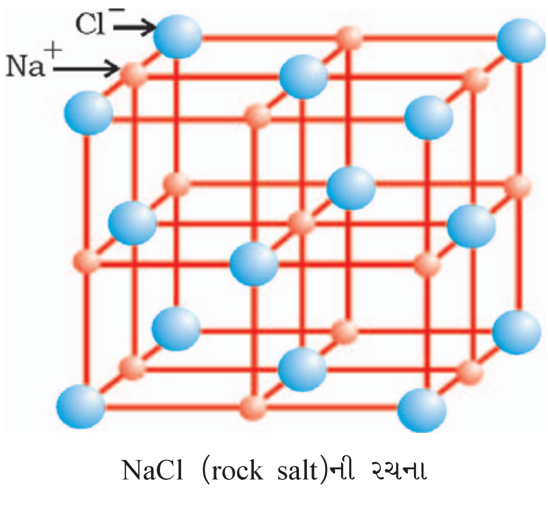
$M^+(g) + X^-(g) \rightarrow MX(s)$

ઇલેક્ટ્રૉન પ્રાપ્તિ એન્થાલ્પી ($\Delta_{eg}H$) એટલે વાયુમય કલામાં પરમાણુ તેની ધરા અવસ્થામાં ઇલેક્ટ્રૉન મેળવે છે તે એન્થાલ્પી ફેરફાર છે. ઇલેક્ટ્રૉન પ્રાપ્તિ ઘટના ઉષ્માક્ષેપક અથવા ઉષ્માશોષક હોઈ શકે છે, જ્યારે બીજી તરફ આયનીકરણ એન્થાલ્પી હંમેશાં ઉષ્માક્ષેપક હોય છે. ઇલેક્ટ્રૉન બંધુતા ઇલેક્ટ્રૉન પ્રાપ્તિ સાથે સંકળાયેલ ઊર્જા ફેરફારનું ઋણ મૂલ્ય છે.

આથી એ સહજ છે કે આયનીય બંધ પ્રમાણમાં નીચી આયનીકરણ એન્થાલ્પી ધરાવતા તત્ત્વો અને ઇલેક્ટ્રૉન પ્રાપ્તિ એન્થાલ્પીના ઊંચા ઋણ મૂલ્ય ધરાવતા તત્ત્વો વચ્ચે રચાશે.

મોટા ભાગના આયનીય સંયોજનોમાં ધનાયન ધાત્વીય તત્ત્વોમાંથી વ્યુત્પિત થાય છે અને ઋણાયન અધાત્વીય તત્ત્વોમાંથી. બે અધાત્વીય તત્ત્વોમાંથી બનેલો એમોનિયમ આયન (NH_4^+) અપવાદ છે. તે ઘણા આયનીય સંયોજનોમાં ધનાયન રચે છે.

આયનીય સંયોજનો સ્ફટિકમય અવસ્થામાં હોય છે. જે ધનાયન અને ઋણાયનની કુલંબીય પારસ્પરિક ક્રિયા ઊર્જાથી સાથે સાથે જકડાઈને ક્રમબદ્ધ ત્રિપરિમાણીય ગોઠવણી ધરાવે છે. આ સંયોજનો જુદી જુદી સ્ફટિક રચનામાં સ્ફટિકીકરણ પામે છે જે આયનના કદ, તેમની પૅકિંગ ગોઠવણી અને અન્ય પરિબળો પર આધારિત હોય છે. સોડિયમ ક્લોરાઇડ NaCl (rock salt)ની સ્ફટિક રચના નીચે દર્શાવેલ છે.



NaCl (rock salt)ની રચના

આયનીય સંયોજનોમાં ઇલેક્ટ્રૉન પ્રાપ્તિ એન્થાલ્પી અને આયનીકરણ એન્થાલ્પીનો સરવાળો ધન હોય તેમ છતાં પણ સ્ફટિક રચનાની સ્થાયીતા સ્ફટિક લેટિસની રચનામાં મુક્ત થતી ઊર્જાને કારણે હોય છે. ઉદાહરણ તરીકે, Na(g)માંથી $Na^+(g)$ની રચનાની આયનીકરણ એન્થાલ્પી 495.8 kJ mol^{-1} છે. જ્યારે $Cl(g) + e^- \rightarrow Cl^-(g)$ માટેની ઇલેક્ટ્રૉન પ્રાપ્તિ એન્થાલ્પી માત્ર –348.7 kJ mol^{-1} છે. એ બન્નેનો સરવાળો 147.1 kJ mol^{-1} NaCl(s)ની લેટિસ સર્જન એન્થાલ્પી

(–788 kJ mol^{-1}) સાથે વળતરરૂપ થવા છતાં પણ વધુ છે. આથી આ પ્રક્રિયામાં શોષાયેલી ઊર્જા કરતાં છૂટી પડેલી ઊર્જા વધારે છે.

આમ, આયનીય સંયોજનની સ્થાયીતાનું ગુણાત્મક માપન તેની લેટિસની સર્જન એન્થાલ્પી દ્વારા પૂરું પાડવામાં આવે છે નહિ કે વાયુમય અવસ્થામાં આયનીય સ્પીસિઝની ફરતે માત્ર અષ્ટકની પ્રાપ્તિથી.

લેટિસ એન્થાલ્પી આયનીય બંધના સર્જનમાં ચાવીરૂપ ભૂમિકા ભજવે છે. તેના અંગે વિશેષ શીખવું અગત્યનું છે.

4.2.1 લેટિસ એન્થાલ્પી (Lattice Enthalpy)

આયનીય ઘનની લેટિસ એન્થાલ્પી આ રીતે વ્યાખ્યાયિત કરી શકાય. એક મોલ ઘન સંયોજનને સંપૂર્ણપણે તેના વાયુમય ઘટકીય આયનોમાં ફેરવવા માટે જરૂરી ઊર્જા છે. ઉદાહરણ તરીકે NaClની લેટિસ એન્થાલ્પી 788 kJ mol^{-1} છે. આનો અર્થ એમ કે એક મોલ ઘન NaClને અનંત અંતરે એક મોલ $Na^{+}(g)$ અને એક મોલ $Cl^{-}(g)$ માં ફેરવવા માટે 788 kJ ઊર્જાની જરૂર પડશે.

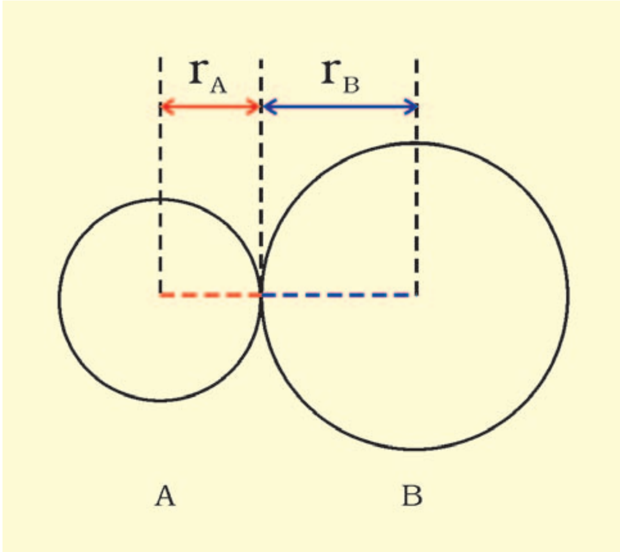
આ ઘટનામાં અસમાન ભાર ધરાવતા આયનો વચ્ચે આકર્ષણ અને સમાન ભાર ધરાવતા આયનો વચ્ચેના અપાકર્ષણ બળનો સમાવેશ થાય છે. ઘન સ્ફટિક ત્રિપરિમાણીય હોવાથી માત્ર આકર્ષણ અને અપાકર્ષણ બળો વચ્ચેની પારસ્પરિક ક્રિયા પરથી લેટિસ એન્થાલ્પી સીધા જ ગણી શકાય નહિ. સ્ફટિક ભૂમિતિ સાથે સંકળાયેલ પરિબળોનો સમાવેશ કરવો પડે.

4.3 બંધ પ્રાચલો (Bond Parameters)

4.3.1 બંધ લંબાઈ (Bond Length)

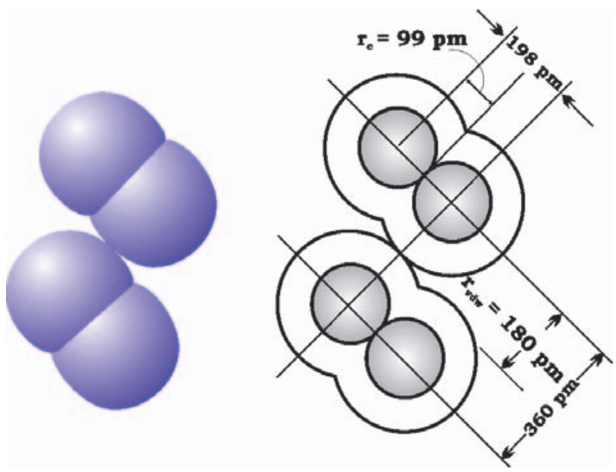
બંધ લંબાઈને આ પ્રમાણે વ્યાખ્યાયિત કરી શકાય. **અણુમાં જોડાયેલા બે પરમાણુના કેન્દ્રો વચ્ચેના સંતુલિત અંતરને બંધ લંબાઈ કહે છે.** બંધ લંબાઈ વર્ણપટદર્શકીય પદ્ધતિઓ, ક્ષ-કિરણ વિવર્તન અને ઈલેક્ટ્રૉન વિવર્તન તક્નિકોથી નક્કી કરી શકાય છે. જેનો અભ્યાસ તમે ઉચ્ચતર ધોરણોમાં કરશો. બંધિત થયેલા પરમાણુઓની જોડ બંધલંબાઈમાં ફાળો આપે છે (આકૃતિ 4.1). સહસંયોજક બંધમાં દરેક પરમાણુનો ફાળો તે પરમાણુની સહસંયોજક ત્રિજ્યા કહેવાય છે.

બંધિત અવસ્થામાં કોઈ પરમાણુના કોર જે સંલગ્ન પરમાણુના કોર સાથે સંપર્કમાં હોય છે તેમની ત્રિજ્યા પરથી સહસંયોજક ત્રિજ્યા માપવામાં આવે છે. સમાન અણુમાં



આકૃતિ 4.1 સહસંયોજક અણુ ABની બંધલંબાઈ $R = r_A + r_B$ (R બંધ ત્રિજ્યા છે અને r_A અને r_B અનુક્રમે પરમાણુઓ A અને Bની સહસંયોજક ત્રિજ્યાઓ છે.)

સહસંયોજક બંધથી જોડાયેલા બે સમાન પરમાણુઓ વચ્ચેના અંતરનું અડધું મૂલ્ય છે. **વાન્ ડર વાલ્સ ત્રિજ્યા પરમાણુની એકંદરે ત્રિજ્યા દર્શાવે છે. જેમાં અબંધકારક પરિસ્થિતિમાંના સંયોજકતા કોશનો સમાવેશ કરે છે.** ઉપરાંત, વાન્ ડર વાલ્સ ત્રિજ્યા ઘનમાંના અલગ અલગ અણુઓમાંના બે સમાન પરમાણુઓ વચ્ચેના અંતરનું અડધું છે. ક્લોરિનની સહસંયોજક અને વાન્ ડર વાલ્સ ત્રિજ્યાઓ આકૃતિ 4.2માં દર્શાવેલ છે.



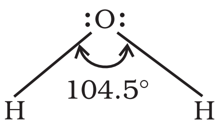
આકૃતિ 4.2 ક્લોરિન અણુમાં સહસંયોજક અને વાન્ ડર વાલ્સ ત્રિજ્યાઓ અંદરના વર્તુળ ક્લોરિન પરમાણુના કદને અનુરૂપ છે. (r_{vdw} અને r_c અનુક્રમે વાન્ ડર વાલ્સ અને સહસંયોજક ત્રિજ્યાઓ છે.)

એકલ બંધ, દ્વિબંધ અને ત્રિબંધની કેટલીક ખાસ ત્રિજ્યાઓ કોષ્ટક 4.2માં દર્શાવેલ છે. કેટલાક સામાન્ય અણુઓની બંધલંબાઈ કોષ્ટક 4.3માં આપેલી છે.

કેટલાક સામાન્ય તત્ત્વોની સહસંયોજક ત્રિજ્યાઓની યાદી કોષ્ટક 4.4માં કરેલ છે.

4.3.2 બંધકોણ (Bond Angle)

અણુ/સંકીર્ણ આયનમાં મધ્યસ્થ પરમાણુની આસપાસ બંધન ઇલેક્ટ્રૉન ધરાવતી કક્ષકોની વચ્ચે રચાતા ખૂણાને બંધકોણ તરીકે વ્યાખ્યાયિત કરી શકાય છે. બંધકોણ અંશમાં રજૂ કરવામાં આવે છે. જે વર્ણપટદર્શકીય પદ્ધતિઓ વડે પ્રાયોગિક રીતે નક્કી કરી શકાય છે. તે અણુ/સંકીર્ણ આયનમાંના મધ્યસ્થ પરમાણુની આસપાસ વહેંચાયેલી કક્ષકો વિશે કંઈક ખ્યાલ આપે છે અને તેથી તેનો આકાર નક્કી કરવામાં મદદરૂપ થાય છે. ઉદાહરણ તરીકે પાણીમાં H-O-H બંધકોણ નીચે પ્રમાણે રજૂ કરી શકાય :



4.3.3 બંધ એન્થાલ્પી (Bond Enthalpy)

વાયુમય અવસ્થામાંના બે પરમાણુઓ વચ્ચે ખાસ પ્રકારના એક મોલ બંધને તોડવા માટે જરૂરી ઊર્જા તરીકે તેને વ્યાખ્યાયિત કરી શકાય છે. બંધ એન્થાલ્પીનો એકમ kJ mol^{-1} છે. ઉદાહરણ તરીકે હાઇડ્રોજન અણુમાં H-H બંધ એન્થાલ્પી 435.8 kJ mol^{-1} છે.

$$H_2(g) \rightarrow H(g) + H(g);\ \Delta_a H^\ominus = 435.8\ kJ\ mol^{-1}$$

આ જ પ્રમાણે બહુ બંધ ધરાવતા અણુઓની બંધ એન્થાલ્પી ઉદાહરણ તરીકે O_2 અને N_2 અણુની નીચે પ્રમાણે થશે :

$$O_2(O=O)(g) \rightarrow O(g) + O(g);\ \Delta_a H^\ominus = 498\ kJ\ mol^{-1}$$

$$N_2(N\equiv N)(g) \rightarrow N(g) + N(g);\ \Delta_a H^\ominus = 946.0\ kJ\ mol^{-1}$$

એ અગત્યનું છે કે બંધ વિયોજન એન્થાલ્પી જેટલી વધારે તેટલું જ વધારે અણુમાં પ્રબળ બંધન. HCl જેવા વિષમકેન્દ્રીય દ્વિઅણુ માટે આપણને મળશે.

$$HCl(g) \rightarrow H(g) + Cl(g);\ \Delta_a H^\ominus = 431.0\ kJ\ mol^{-1}$$

બહુપરમાણ્વીય અણુઓમાં બંધ લંબાઈનું માપન ખૂબ જ જટિલ છે. ઉદાહરણ તરીકે લઈએ તો H_2Oની બાબતમાં O-H બંધને તોડવા માટે જરૂરી એન્થાલ્પી સરખી નથી હોતી.

કોષ્ટક 4.2 કેટલાક એકલ, દ્વિબંધ અને ત્રિબંધની સરેરાશ બંધલંબાઈ

બંધપ્રકાર	સહસંયોજક બંધલંબાઈ (pm)
O–H	96
C–H	107
N–O	136
C–O	143
C–N	143
C–C	154
C=O	121
N=O	122
C=C	133
C=N	138
C≡N	116
C≡C	120

કોષ્ટક 4.3 કેટલાક સામાન્ય અણુમાં બંધલંબાઈ

અણુ	બંધલંબાઈ (pm)
H_2 (H – H)	74
F_2 (F – F)	144
Cl_2 (Cl – Cl)	199
Br_2 (Br – Br)	228
I_2 (I – I)	267
N_2 (N ≡ N)	109
O_2 (O = O)	121
HF (H – F)	92
HCl (H – Cl)	127
HBr (H – Br)	141
HI (H – I)	160

કોષ્ટક 4.4 સહસંયોજક ત્રિજ્યાઓ *r_{cov}/(pm)

H	37						
C	77(1)	N	74(1)	O	66(1)	F	64
	67(2)		65(2)		57(2)	Cl	99
	60(3)		55(3)				
		P	110	S	104(1)	Br	114
					95(2)		
		As	121	Se	101	1	133
		Sb	141	Te	137		

* ઉપર દર્શાવેલા મૂલ્યો એકલ બંધના છે. સિવાય કે (કૌંસ દર્શાવેલ). (એકમ 3 આવર્ત વલણ માટે જુઓ.)

$H_2O(g) \rightarrow H(g) + OH(g); \Delta_a H^\ominus_1 = 502$ kJ mol^{-1}

$OH(g) \rightarrow H(g) + O(g); \Delta_a H^\ominus_2 = 427$ kJ mol^{-1}

$\Delta_a H^\ominus$ના મૂલ્યોમાં તફાવત દર્શાવે છે કે બીજો OH બંધ કંઈક ફેરફાર પામે છે, કારણ કે રાસાયણિક પર્યાવરણ બદલાઈ જાય છે. C_2H_5OH (ઇથેનોલ) અને પાણી જેવા અલગ અલગ અણુઓમાં સમાન O-H બંધને લીધે મળતા ઊર્જા ફેરફાર કારણરૂપ છે. આથી જ બહુપરમાણ્વીય અણુઓમાં **સરેરાશ બંધ એન્થાલ્પી** પર્યાય વપરાય છે. કુલ બંધ વિયોજન એન્થાલ્પીના મૂલ્યને તૂટેલા બંધની સંખ્યા વડે ભાગતાં તે મેળવાય છે. જે પાણીના અણુ માટે નીચે પ્રમાણે દર્શાવેલ છે.

$$\text{સરેરાશ બંધ એન્થાલ્પી} = \frac{502 + 427}{2}$$

$$= 464.5 \text{ kJ mol}^{-1}$$

4.3.4 બંધક્રમાંક (Bond Order)

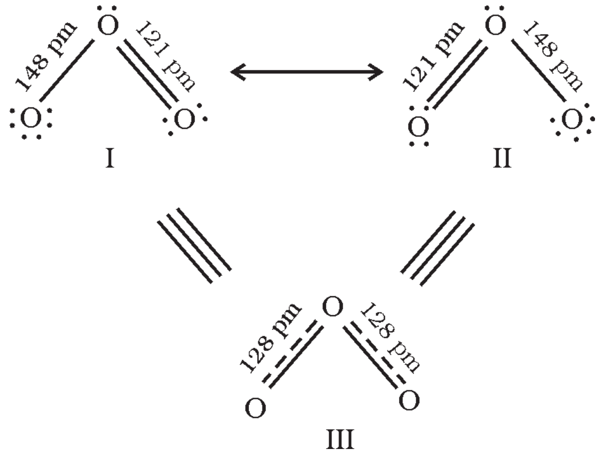
સહસંયોજક બંધના લુઈસ વર્ણનમાં બંધક્રમાંક અણુમાંના બે પરમાણુઓ વચ્ચેના બંધની સંખ્યા છે. બંધક્રમાંક ઉદાહરણ તરીકે લઈએ તો H_2માં (એક ભાગીદારી ઇલેક્ટ્રૉન યુગ્મ), O_2માં (બે ભાગીદારી ઇલેક્ટ્રૉન યુગ્મ) અને N_2માં (ત્રણ ભાગીદારી ઇલેક્ટ્રૉન યુગ્મ) અનુક્રમે 1, 2 અને 3 છે. એ જ પ્રમાણે COમાં C અને O વચ્ચે ત્રણ ભાગીદાર ઇલેક્ટ્રૉન યુગ્મ છે. તેથી બંધક્રમાંક 3 છે અને તેની $\Delta_a H^\ominus$ 946 kJ mol^{-1} છે જે દ્વિપરમાણ્વીય અણુઓ માટેના મૂલ્યોમાં સૌથી ઊંચી છે.

સમઇલેક્ટ્રૉનીય અણુઓ અને આયનોને સમાન બંધક્રમાંક હોય છે. ઉદાહરણ તરીકે F_2 અને O_2^{2-}ને બંધક્રમાંક 1 છે. N_2, CO અને NO^+ને બંધક્રમાંક 3 છે.

અણુઓની સ્થાયિતાને સમજવા માટે ઉપયોગી સામાન્ય સહસંબંધ એ છે કે બંધક્રમાંકમાં વધારો બંધ એન્થાલ્પીમાં વધારો કરે છે અને બંધ લંબાઈમાં ઘટાડો કરે છે.

4.3.5 સસ્પંદન રચનાઓ (Resonance Structures)

એવું અનેકવાર જણાયું છે કે એકલી લુઈસ રચના અણુમાં પ્રાયોગિક રીતે નક્કી કરેલા પ્રાચલ (parameters) સાથે સુસંગતતા સમજાવવામાં અપૂરતા છે. ઉદાહરણ તરીકે O_3 અણુ નીચે દર્શાવ્યા પ્રમાણે રચના I અને II વડે સમાન રીતે રજૂ કરી શકાય.



આકૃતિ 4.3 O_3 અણુમાં સસ્પંદન

રચના I અને II બે વિહિત (canonical) રચના છે. જ્યારે III સસ્પંદન સંકર (hybrid) છે.

બન્ને રચનાઓમાં O - O એકલ બંધ છે અને O = O દ્વિબંધ પણ છે. સામાન્ય O - O બંધ અને O = O બંધ લંબાઈ અનુક્રમે 148 pm અને 121 pm છે. પ્રાયોગિક રીતે નક્કી કરવામાં આવેલ O_3 અણુની બંધ લંબાઈ સરખી જ (128 pm) છે. આમ O_3 અણુના ઑક્સિજન-ઑક્સિજન બંધની લંબાઈ એકલ બંધ અને દ્વિબંધની વચ્ચે છે. જે લુઈસની ઉપર દર્શાવેલી બન્ને રચનાઓથી રજૂ કરી શકાય નહિ.

O_3 જેવા અણુ માટે ચોક્કસ રચના દર્શાવવામાં મુશ્કેલી પડતી હોવાને કારણે સસ્પંદનનો ખ્યાલ દાખલ કરવામાં આવ્યો હતો. **આ સસ્પંદનના ખ્યાલ પ્રમાણે, જ્યારે એક જ લુઈસ રચના અણુને ચોકસાઈથી વર્ણવી શકે નહિ ત્યારે સમાન ઊર્જા, કેન્દ્રના સ્થાન અને બંધકારક અને અબંધકારક ઇલેક્ટ્રૉન યુગ્મો દર્શાવતા ઘણા પ્રમાણિત સ્વરૂપો ગણતરીમાં લેવાય છે અને તેની સંકર રચના અણુનું ચોકસાઈપૂર્વક વર્ણન કરે છે.** આમ O_3 અણુ માટે ઉપર પ્રમાણે બે રચનાઓ દર્શાવી છે અને તેમની સંકર એટલે કે રચના III, O_3 અણુની સાચી રચના રજૂ કરે છે. આને **સસ્પંદન સંકર** પણ કહે છે. સસ્પંદન બે શીર્ષવાળા (double headed) તીર વડે રજૂ કરવામાં આવે છે.

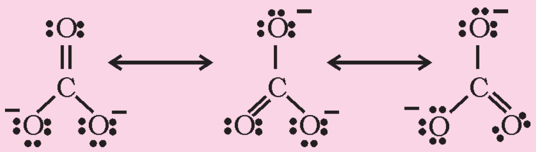
સસ્પંદન રચનાના કેટલાક અન્ય ઉદાહરણોમાં **કાર્બોનેટ આયન અને કાર્બન ડાયોક્સાઈડ અણુ** લઈ શકાય.

કોયડો 4.3

CO_3^{2-} આયનની રચના સસ્પંદનના (સંદર્ભમાં) પર્યાયમાં સમજાવો.

ઉકેલ :

કાર્બન અને ઑક્સિજન વચ્ચે બે એકલ બંધ અને એક દ્વિબંધની હાજરી પર આધારિત લુઈસ રચના સાચી રચના દર્શાવવા માટે અપૂરતી છે. કારણ કે તે અસમાન બંધ દર્શાવે છે. પ્રાયોગિક માહિતીના આધારે CO_3^{2-} આયનમાં બધા જ કાર્બન અને ઑક્સિજન બંધ સમતુલ્ય (equivalent) છે. આથી કાર્બોનેટ આયન વિહિત (canonical) સ્વરૂપો I, II અને IIIના સસ્પંદન સંકર તરીકે ઉત્તમ રીતે વર્ણવી શકાય. જે નીચે દર્શાવ્યા છે.



I II III

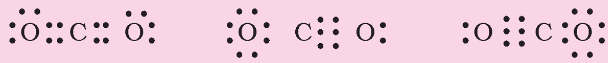
આકૃતિ 4.4 CO_3^{2-} માં સસ્પંદન I, II અને III ત્રણ વિહિત સ્વરૂપો દર્શાવેલ છે.

કોયડો 4.4

CO_2 અણુની રચના સમજાવો.

ઉકેલ :

CO_2માં કાર્બન અને ઑક્સિજન વચ્ચેની બંધલંબાઈ પ્રાયોગિક રીતે 115 pm નક્કી કરાઈ છે. કાર્બન અને ઑક્સિજન વચ્ચે દ્વિબંધ તથા કાર્બન અને ઑક્સિજન વચ્ચેની ત્રિબંધ લંબાઈ સામાન્ય રીતે અનુક્રમે 121 pm અને 110 pm છે. CO_2માં કાર્બન અને ઑક્સિજન $C = O$ અને $C \equiv O$ના મૂલ્યોની વચ્ચે (115 pm) છે. આથી સ્પષ્ટ છે કે એક જ લુઈસ રચના આનું સ્થાન દર્શાવી શકશે નહિ અને તેથી એક કરતાં વધારે લુઈસ રચનાઓ લખવી જરૂરી બને છે અને ગણતરીમાં લેવું પડશે કે CO_2ની ઉત્તમ રચના I, II અને III વિહિત સ્વરૂપોની સંકર અથવા સસ્પંદનથી દર્શાવી શકાશે.



I II III

આકૃતિ 4.5 CO_2માં સસ્પંદન I, II અને III ત્રણ વિહિત સ્વરૂપો દર્શાવેલ છે.

સામાન્ય રીતે કહી શકાય કે,

- સસ્પંદન અણુને સ્થાયી બનાવે છે કારણ કે સસ્પંદન સંકરની ઊર્જા કોઈ પણ વિહિત સ્વરૂપ રચના કરતાં ઓછી હોય છે અને
- સસ્પંદન એકંદરે બંધ ખાસિયતની સરાસરી કરે છે.

આમ O_3 સસ્પંદનની ઊર્જા I અથવા II વિહિત સ્વરૂપોની ઊર્જા કરતાં નીચી છે. (આકૃતિ 4.3)

સસ્પંદન સાથે ઘણા **ગેરખ્યાલો** (misconcepts) સંકળાયેલા છે અને તેમને ફરી બદલવાની જરૂરિયાત છે. તમારે યાદ રાખવું જોઈશે કે,

- વિહિત સ્વરૂપોનું કોઈ સાચું અસ્તિત્વ હોતું નથી.
- અણુ અમુક સમય માટે એક વિહિત સ્વરૂપમાં હશે અને અમુક સમય માટે બીજા વિહિત સ્વરૂપમાં હશે તેવું અસ્તિત્વ ધરાવતા નથી.
- ચલરૂપકતા (ચલાવયવતા)(tautomerism)માં બે ચલરૂપકો (ચલાવયવ સ્વરૂપો)(કિટો અને ઈનોલ)માં જે પ્રકારનું સંતુલન હોય છે તેવું સંતુલન આમાં હોતું નથી.
- અણુને માત્ર એક જ રચના હોય છે જે વિહિત સ્વરૂપોની સસ્પંદન સંકર છે અને તેને એક જ લુઈસ રચના વડે દર્શાવી શકાય નહિ.

4.3.6 બંધની ધ્રુવીયતા (Polarity of Bonds)

સો ટકા આયનીય અથવા સહસંયોજક બંધના અસ્તિત્વનો નિર્દેશ એક આદર્શ પરિસ્થિતિ છે. હકીકતમાં કોઈપણ બંધ અથવા સંયોજન સંપૂર્ણપણે સહસંયોજક અથવા આયનીય હોતો નથી. બે હાઈડ્રોજન પરમાણુઓ વચ્ચેના સહસંયોજક બંધની બાબતમાં પણ કંઈક આયનીય લાક્ષણિકતા હોય છે.

જ્યારે બે સમાન પરમાણુઓ વચ્ચે સહસંયોજક બંધ રચાય છે, ઉદાહરણ તરીકે, H_2, O_2, Cl_2, N_2 અથવા F_2માં ભાગીદાર ઈલેક્ટ્રૉન યુગ્મ બન્ને પરમાણુ વડે સરખી રીતે આકર્ષિત થાય છે અને પરિણામે ઈલેક્ટ્રૉન યુગ્મ બન્ને સમાન કેન્દ્રની બરાબર મધ્યમાં જ ગોઠવાય છે. આ રીતે જે બંધ રચાય છે તેને અધ્રુવીય

બંધ કહે છે. આથી વિરુદ્ધ HF જેવા વિષમકેન્દ્રીય અણુની બાબતમાં બન્ને પરમાણુ વચ્ચેનું ભાગીદાર ઇલેક્ટ્રૉન યુગ્મ ફ્લોરિન તરફ ખેંચાય છે, કારણ કે ફ્લોરિનની વિદ્યુતઋણતા (એકમ 3) હાઇડ્રોજનની વિદ્યુતઋણતા કરતાં ઘણી જ વધારે છે. પરિણમતો સહસંયોજક બંધ ધ્રુવીય સહસંયોજક બંધ હોય છે.

ધ્રુવીભવનને પરિણામે અણુ **દ્વિધ્રુવ ચાકમાત્રા** (નીચે દર્શાવેલ છે) ધારણ કરે છે અને તેને એ રીતે વ્યાખ્યાયિત કરી શકાય કે તે ભારની માત્રા અને ધન અને ઋણ ભારના કેન્દ્રો વચ્ચેના અંતરનો ગુણાકાર છે અને તે સામાન્ય રીતે ગ્રીક અક્ષર μ વડે નિર્દેશિત કરાય છે. ગાણિતીય રીતે તેને નીચે પ્રમાણે રજૂ કરી શકાય :

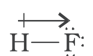
દ્વિધ્રુવ ચાકમાત્રા (μ) = ભાર (Q) $\times$ અલગીકરણનું અંતર (r)

દ્વિધ્રુવ ચાકમાત્રા સામાન્ય રીતે ડીબાય એકમ (D)માં દર્શાવાય છે. તેનો પરિવર્તન ગુણક

$1 \text{ D} = 3.33564 \times 10^{-30}$ C m છે.

જ્યાં, C કુલોમ્બ છે અને m મીટરમાં છે.

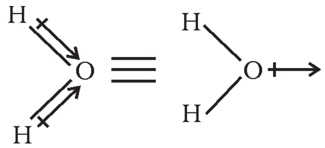
આ ઉપરાંત દ્વિધ્રુવ ચાકમાત્રા સદિશ રાશિ છે અને પ્રણાલિકા પ્રમાણે તેને નાના તીર વડે દર્શાવાય છે. જેમાં પૂંછડીને ઋણ કેન્દ્ર અને શીર્ષને ધન કેન્દ્ર તરફ દર્શાવાય છે, પરંતુ રસાયણવિજ્ઞાનમાં દ્વિધ્રુવ ચાકમાત્રાને ક્રોસ (crossed) કરેલ તીર ($+\!\!\longrightarrow$)ને અણુની લુઇસ રચના પર મૂકવામાં આવે છે. ક્રોસ ધન છેડા પર અને તીરનું શીર્ષ ઋણ છેડા પર હોય છે. ઉદાહરણ તરીકે HFને નીચે પ્રમાણે રજૂ કરી શકાય :



તીર અણુમાંની ઇલેક્ટ્રૉન ઘનતા સ્થાનાંતર(shift)ની દિશામાં હોવાની સંજ્ઞા દર્શાવે છે. એ નોંધવું જરૂરી છે કે ક્રોસ તીરની દિશા પ્રણાલિકાગત દ્વિધ્રુવ ચાકમાત્રા સદિશની ઉલટી દિશામાં હોય છે.

ડચ વૈજ્ઞાનિક પીટર ડીબાયે (Peter Debye) 1936માં ક્ષ-કિરણ વિવર્તન અને દ્વિધ્રુવ ચાકમાત્રા પરના કાર્ય માટે નૉબેલ પારિતોષિક મેળવ્યું હતું. દ્વિધ્રુવ ચાકમાત્રાની માત્રા ડીબાય એકમમાં દર્શાવાય છે, જે ડીબાય પ્રત્યેનું માન છે.

બહુપરમાણ્વીય અણુઓના કિસ્સામાં અણુની દ્વિધ્રુવ ચાકમાત્રા જુદા જુદા બંધની દ્વિધ્રુવ ચાકમાત્રાનો સદિશ સરવાળો છે. ઉદાહરણ તરીકે H_2O અણુ કે જેને વળાંકવાળી (bent) રચના છે તેમાં બે O - H બંધ 104.5^oના ખૂણે દિક્ વિન્યાસ (orientation) પર હોય છે. ચોખ્ખી (net) દ્વિધ્રુવ ચાકમાત્રા 6.17×10^{-30} C m ($1 \text{ D} = 3.33564 \times 10^{-30}$ C m) બે O - H બંધની દ્વિધ્રુવ ચાકમાત્રાના પરિણામની દ્વિધ્રુવ ચાકમાત્રા છે.



(a) બંધ દ્વિધ્રુવ (b) પરિણમતી દ્વિધ્રુવ ચાકમાત્રા

ચોખ્ખી (net) દ્વિધ્રુવ ચાકમાત્રા = 1.85 D

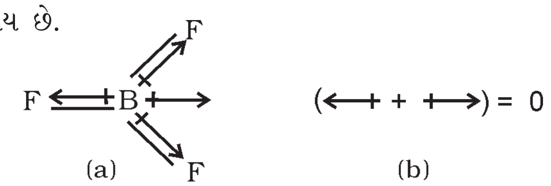
$= 1.85 \times 3.33564 \times 10^{-30}$ C m

$= 6.17 \times 10^{-30}$ C m

BeF_2ની બાબતમાં દ્વિધ્રુવ ચાકમાત્રા શૂન્ય છે. આનું કારણ એ છે કે બન્ને સરખા બંધ દ્વિધ્રુવ બિંદુ એકબીજાની વિરુદ્ધ દિશામાં હોય છે અને એકબીજાને રદ કરે છે.

BeF_2માં બંધ દ્વિધ્રુવ — BeF_2માં કુલ દ્વિધ્રુવ ચાકમાત્રા

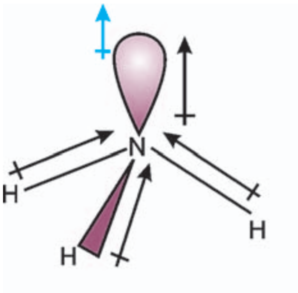
ત્રિપરિમાણીય અણુમાં ઉદાહરણ તરીકે BF_3માં દ્વિધ્રુવ ચાકમાત્રા શૂન્ય છે. જો કે $B \rightarrow F$ બંધ એકબીજાને 120^o ખૂણે દિક્વિન્યાસ ધરાવે છે અને ત્રણેય દ્વિધ્રુવ ચાકમાત્રાનો સરવાળો કોઈ બે સરખી દ્વિધ્રુવ ચાકમાત્રાનો સરવાળો ત્રીજાની વિરુદ્ધમાં હોય છે.



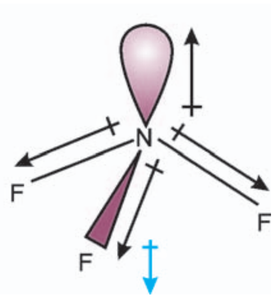
BF_3 અણુ; (a) બંધ દ્વિધ્રુવ અને (b) કુલ દ્વિધ્રુવ ચાકમાત્રાની રજૂઆત

આપણે NH_3 અને NF_3ની રસપ્રદ બાબતનો અભ્યાસ કરીએ. બન્ને અણુઓને પિરામીડલ આકાર હોય છે અને નાઇટ્રોજન પરમાણુ પર ઇલેક્ટ્રૉનનું અબંધકારક યુગ્મ હોય છે. ફ્લોરિન નાઇટ્રોજન કરતાં વધુ વિદ્યુતઋણમય છે છતાં NH_3ની પરિણમતી દ્વિધ્રુવ ચાકમાત્રા (4.90×10^{-30} C m) NF_3ની પરિણમતી દ્વિધ્રુવ ચાકમાત્રા (0.8×10^{-30} C m) કરતાં વધારે છે. આમ થવાનું કારણ એ છે કે NH_3ની

બાબતમાં અબંધકારક યુગ્મને કારણે કક્ષકીય દ્વિધ્રુવ એક જ દિશામાં હોય છે. જે N-H બંધની પરિણમતી દ્વિધ્રુવ ચાકમાત્રાની દિશામાં હોય છે, જ્યારે NF_3માં ત્રણ N-F બંધની પરિણમતી દ્વિધ્રુવ ચાકમાત્રાની વિરુદ્ધ દિશામાં હોય છે. અબંધકારક યુગ્મોને લીધે કક્ષકીય દ્વિધ્રુવ N-F બંધનીય પરિણમતી દ્વિધ્રુવ ચાકમાત્રા પરની અસરમાં ઘટાડો કરે છે. આને પરિણામે NF_3ની દ્વિધ્રુવ ચાકમાત્રા નીચું મૂલ્ય ધરાવે છે. જે નીચે દર્શાવેલ છે :



NH_3માં પરિણમતી દ્વિધ્રુવ ચાકમાત્રા $= 4.90 \times 10^{-30}$ C m



NF_3માં પરિણમતી દ્વિધ્રુવ ચાકમાત્રા $= 0.80 \times 10^{-30}$ C m

કોષ્ટક 4.5માં કેટલાક અણુઓની દ્વિધ્રુવ ચાકમાત્રા દર્શાવેલ છે.

જેમાં બધા જ સહસંયોજક બંધને કંઈક આંશિક આયનીય લાક્ષણિકતા હોય છે તેમ દરેક આયનીય બંધને પણ કંઈક આંશિક સહસંયોજક લાક્ષણિકતા હોય છે. આયનીય બંધની આંશિક સહસંયોજક લાક્ષણિકતા ફજાન વડે નીચેના સ્વરૂપમાં ચર્ચવામાં આવી હતી :

- ધનાયનનું નાનું કદ અને ઋણાયનનું મોટું કદ હોય તો આયનીય બંધમાં વધુ સહસંયોજક લાક્ષણિકતા.
- જેમ ધનાયન પર વધારે ભાર તો આયનીય બંધની સહસંયોજક લાક્ષણિકતા વધારે.
- સમાન કદ અને ભાર ધરાવતાં સંક્રાંતિ ધાતુ ધનાયનમાં જેની ઈલેક્ટ્રોનીય રચના $(n-1)d^ns^0$ છે તે આલ્કલી અને આલ્કલાઈન અર્થ ધાતુ ધનાયન જેની ઈલેક્ટ્રોનીય રચના ઉમદા વાયુ જેવી ns^2np^6 છે તેના કરતાં વધુ ધ્રુવીકરણ પામે છે.

ધનાયન પોતાની તરફ ઈલેક્ટ્રૉનીય ભારને ખેંચીને ઋણાયનને ધ્રુવીભૂત કરે છે. અને તેને લીધે બન્ને વચ્ચે ઈલેક્ટ્રૉનીય ભાર વધારે છે. સહસંયોજક બંધમાં ચોકસાઈપૂર્વક આ પ્રમાણે બને છે એટલે કે બે કેન્દ્રો વચ્ચે ભારઘનતા રચાય છે. ધનાયનની ધ્રુવીભવન શક્તિ, ઋણાયનની ધ્રુવીભવનીયતા અને વિકૃતિ માત્રા (ધ્રુવીભવન) પરિબળો છે જે આયનીય બંધની સહસંયોજક લાક્ષણિકતાના ટકા નક્કી કરે છે.

4.4 સંયોજકતા કોશ ઈલેક્ટ્રૉન યુગ્મ અપાકર્ષણ (VSEPR) સિદ્ધાંત (The Valence Shell Electron Pair Repulsion Theory)

અગાઉ સમજાવ્યા પ્રમાણે લુઈસ ખ્યાલ અણુના આકાર સમજાવી શકતો નથી. આ સિદ્ધાંત સહસંયોજક અણુના આકારનું

કોષ્ટક 4.5 પસંદ કરેલા અણુઓની દ્વિધ્રુવ ચાકમાત્રા

અણુનો પ્રકાર	ઉદાહરણ	દ્વિધ્રુવ ચાકમાત્રા μ(D)	ભૂમિતિ
અણુ (AB)	HF	1.78	રેખીય
	HCl	1.07	રેખીય
	HBr	0.79	રેખીય
	HI	0.38	રેખીય
	H_2	0	રેખીય
અણુ (AB_2)	H_2O	1.85	વળેલો
	H_2S	0.95	વળેલો
	CO_2	0	રેખીય
અણુ (AB_3)	NH_3	1.47	ત્રિકોણીય પિરામિડલ
	NF_3	0.23	ત્રિકોણીય પિરામિડલ
	BF_3	0	ત્રિકોણીય સમતલ
અણુ (AB_4)	CH_4	0	સમચતુષ્ફલકીય
	$CHCl_3$	1.04	સમચતુષ્ફલકીય
	CCl_4	0	સમચતુષ્ફલકીય

પ્રાક્કથન કરવા માટે સરળ પદ્ધતિ પૂરી પાડે છે. સિજવિક (Sidgwick) અને પોવેલે (Powell) 1940માં પરમાણુની સંયોજકતા કોશમાંના ઈલેક્ટ્રૉન યુગ્મની પારસ્પરિક ક્રિયાઓ વિશે એક સરળ સિદ્ધાંત પ્રતિપાદિત કર્યો. નાયહોલ્મ (Nyholm) અને ગિલેસ્પીએ (Gillespie) (1957) તેને વિકસાવ્યો અને પુનઃવ્યાખ્યાયિત કર્યો.

VSEPR સિદ્ધાંતની મુખ્ય અભિધારણાઓ (postulates) નીચે પ્રમાણે છે :

- અણુનો આકાર મધ્યસ્થ પરમાણુની આસપાસની સંયોજકતા કોશ ઈલેક્ટ્રૉન યુગ્મ (બંધકારક અને અબંધકારક)ની સંખ્યા પર આધાર રાખે છે.
- સંયોજકતા કોશમાં ઈલેક્ટ્રૉન યુગ્મો અપાકર્ષણ કરશે કારણ કે તેમના ઈલેક્ટ્રૉન વાદળ ઋણભારિત છે.
- આ ઈલેક્ટ્રૉન યુગ્મ અવકાશમાં એવી રીતે ગોઠવાય છે જેથી અપાકર્ષણ ઓછું થાય અને આમ તેમની વચ્ચેનું અંતર વધે છે.
- સંયોજકતા કોશને વર્તુળાકાર લેવામાં આવે છે. જેમાં ઈલેક્ટ્રૉન યુગ્મ એકબીજાથી મહત્તમ અંતરે વર્તુળાકાર સપાટી પર સ્થાનીકૃત થાય છે.
- બહુ બંધને એકલ ઈલેક્ટ્રૉન-યુગ્મ જેવા ગણવામાં આવે છે અને બહુ બંધના બે કે ત્રણ ઈલેક્ટ્રૉન યુગ્મ એકલ અતિ (super) યુગ્મ તરીકે ગણવામાં આવે છે.
- અણુ જ્યાં બે કે વધારે સસ્પંદન રચના રજૂ કરી શકે છે ત્યાં VSEPR નમૂનો આવી કોઈ રચનાને લાગુ પાડી શકાય છે.

ઈલેક્ટ્રૉન યુગ્મની અપાકર્ષણીય પારસ્પરિક ક્રિયા નીચેના ક્રમમાં ઘટે છે.

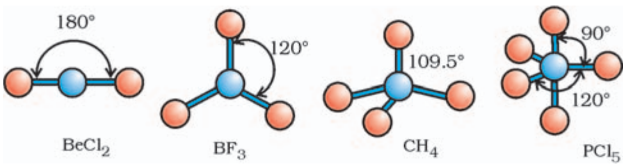
અબંધકારક યુગ્મ (lp) – અબંધકારક યુગ્મ (lp) > અબંધકારક યુગ્મ (lp) – બંધકારક યુગ્મ (bp) > બંધકારક યુગ્મ (bp) – બંધકારક યુગ્મ (bp)

નાયહોલ્મ અને ગિલેસ્પીએ (1957) VSEPR નમૂનાને પુનઃવ્યાખ્યાયિત કર્યો અને ઈલેક્ટ્રૉનના અબંધકારક યુગ્મ અને બંધકારક યુગ્મ વચ્ચેનો અગત્યનો ભેદ સમજાવ્યો. જ્યારે અબંધકારક યુગ્મ મધ્યસ્થ પરમાણુ પર સ્થાનીકૃત હોય ત્યારે દરેક બંધકારક યુગ્મ બન્ને પરમાણુઓ વચ્ચે ભાગીદાર બને છે. આને પરિણામે અણુમાં અબંધકારક ઈલેક્ટ્રૉન યુગ્મ બંધકારકયુક્ત ઈલેક્ટ્રૉન યુગ્મ કરતાં વધારે જગ્યા રોકે છે. આને પરિણામે અબંધકારક ઈલેક્ટ્રૉનના યુગ્મો વચ્ચે અબંધકારક યુગ્મ - બંધકારક યુગ્મ અને બંધકારક યુગ્મ - બંધકારક યુગ્મની સરખામણીમાં વધારે અપાકર્ષણ પરિણમે છે. આ અપાકર્ષણ અસરથી આદર્શ આકાર અને અણુમાં બંધકોણના ફેરફારો (alteration) વિચલનમાં પરિણમે છે.

VSEPR સિદ્ધાંતની મદદથી ભૌમિતિક આકારનું પ્રાક્કથન કરવા માટે અણુઓને બે વિભાગમાં વહેંચી દેવાનું અનુકૂળ બને છે. **(i) અણુઓ કે જેમાં મધ્યસ્થ પરમાણુને અબંધકારક ઈલેક્ટ્રૉન યુગ્મ હોતું નથી. (ii) અણુઓ કે જેમાં મધ્યસ્થ પરમાણુના એક અથવા વધારે અબંધકારક યુગ્મ હોય છે.**

કોષ્ટક 4.6 મધ્યસ્થ પરમાણુ Aના આસપાસ ઈલેક્ટ્રૉન યુગ્મ (અબંધકારક યુગ્મ સિવાય) ગોઠવણી અને AB પ્રકારના કેટલાક અણુઓ/આયનોની ભૂમિતિ દર્શાવે છે. કોષ્ટક 4.7 કેટલાક અણુઓ અને આયનોના આકાર દર્શાવે છે, જેમાં મધ્યસ્થ પરમાણુને એક અથવા વધારે અબંધકારક યુગ્મ છે. કોષ્ટક 4.8 અણુઓની ભૂમિતિમાં વિકૃતિ (distortion) માટેના કારણો દર્શાવે છે.

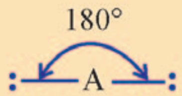
કોષ્ટક 4.6માં દર્શાવ્યા પ્રમાણે AB_2, AB_3, AB_4, AB_5 અને AB_6 સંયોજનોમાં ઈલેક્ટ્રૉન યુગ્મની ગોઠવણીમાં અને મધ્યસ્થ પરમાણુની આસપાસ B પરમાણુઓ અનુક્રમે **રેખીય, સમતલીય સમત્રિકોણીય, ચતુષ્ફલકીય, ત્રિકોણીય દ્વિપિરામિડલ** અને **અષ્ટફલકીય** રીતે હોય છે. આવી ગોઠવણી BF_3 (AB_3), CH_4 (AB_4), PCl_5 (AB_5) જેવા અણુઓમાં નીચે દર્શાવ્યા પ્રમાણે તેમના દડા અને સળી (stick) નમૂનામાં દર્શાવેલ છે.

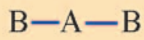


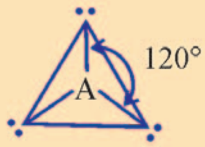
આકૃતિ 4.6 મધ્યસ્થ પરમાણુને અબંધકારક યુગ્મ નથી તેવા અણુઓના પ્રકાર

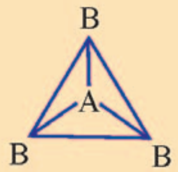
VSEPR સિદ્ધાંત ખાસ કરીને *p*-વિભાગ તત્ત્વોના સંયોજનોના મોટા ભાગના અણુઓની ભૂમિતિનું પ્રાક્કથન કરી શકે છે. બે શક્ય રચનાઓ વચ્ચે ઊર્જા ફેરફાર ઓછો હોય ત્યારે પણ ખૂબ જ ચોકસાઈથી ભૂમિતિ નક્કી કરવામાં ઘણો સફળ રહ્યો છે. VSEPR સિદ્ધાંતનો સૈદ્ધાંતિક પાયો ઈલેક્ટ્રૉન યુગ્મ અપાકર્ષણની આણ્વીય આકાર પર અસરને સમજાવવામાં સ્પષ્ટ નથી અને તે શંકા અને ચર્ચાના વિષય તરીકે ચાલુ રહે છે.

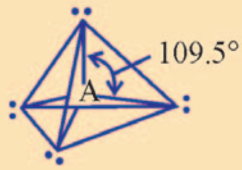
કોષ્ટક 4.6 અણુઓની ભૂમિતિ જેમાં મધ્યસ્થ પરમાણુને અબંધકારક ઈલેક્ટ્રૉન યુગ્મ હોતું નથી

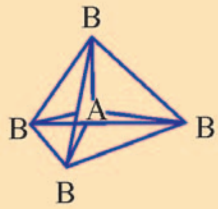
<table>
<tr><th>ઈલેક્ટ્રૉન યુગ્મની સંખ્યા</th><th>ઈલેક્ટ્રૉન યુગ્મની ગોઠવણી</th><th>આણ્વીય ભૂમિતિ</th><th>ઉદાહરણો</th></tr>
<tr><td>2</td><td>

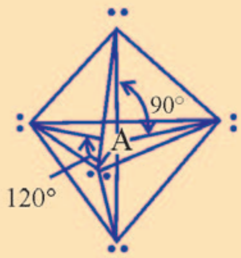
રેખીય</td><td>

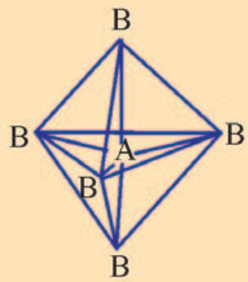
રેખીય</td><td>$BeCl_2$, $HgCl_2$</td></tr>
<tr><td>3</td><td>

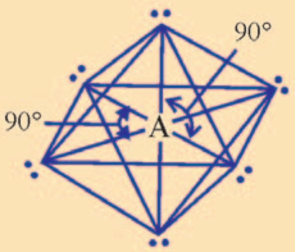
સમતલીય સમત્રિકોણીય</td><td>

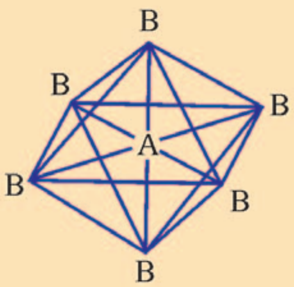
સમતલીય સમત્રિકોણીય</td><td>BF_3</td></tr>
<tr><td>4</td><td>

સમચતુષ્ફલકીય</td><td>

સમચતુષ્ફલકીય</td><td>CH_4, NH_4^+</td></tr>
<tr><td>5</td><td>

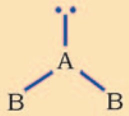
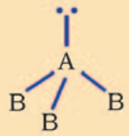
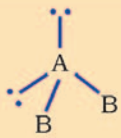
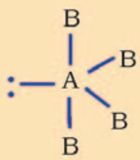
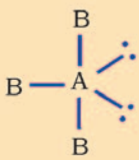
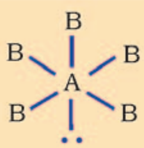
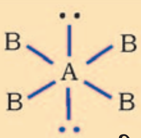
ત્રિકોણીય દ્વિપિરામિડલ</td><td>

ત્રિકોણીય દ્વિપિરામિડલ</td><td>PCl_5</td></tr>
<tr><td>6</td><td>

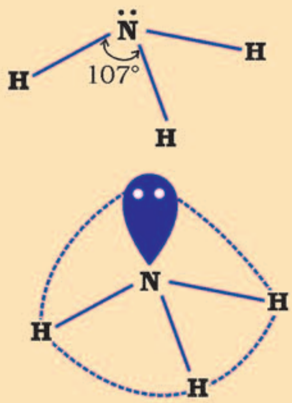
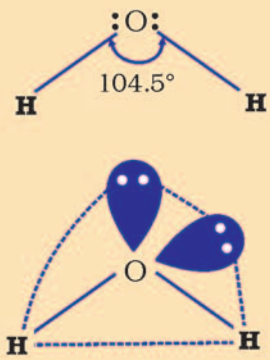
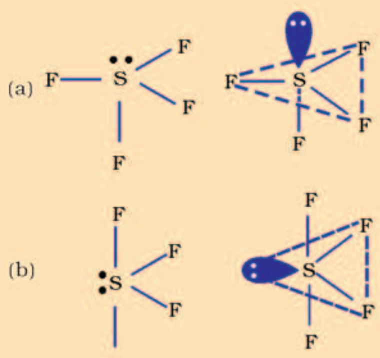
અષ્ટફલકીય</td><td>

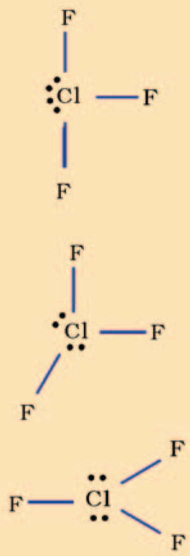
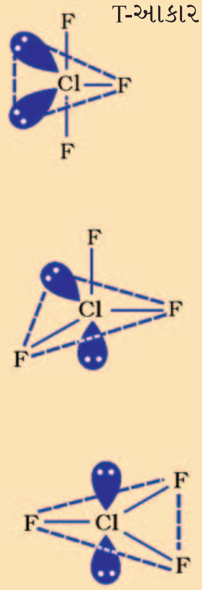
અષ્ટફલકીય</td><td>SF_6</td></tr>
</table>

કોષ્ટક 4.7 સાદા અણુ/આયનો જેમાં મધ્યસ્થ આયનને એક અથવા વધારે અબંધકારક ઈલેક્ટ્રૉન યુગ્મ હોય તેમના આકાર (ભૂમિતિ)

અણુ પ્રકાર	બંધકારક યુગ્મની સંખ્યા	અબંધકારક યુગ્મની સંખ્યા	ઈલેક્ટ્રૉન યુગ્મની ગોઠવણી	આકાર	ઉદાહરણ
AB_2E	2	1	 ત્રિકોણીય સમતલ	વળેલો (bent)	SO_2, O_3
AB_3E	3	1	 સમચતુષ્ફલકીય	ત્રિકોણીય પિરામિડલ	NH_3
AB_2E_2	2	2	 સમચતુષ્ફલકીય	વળેલો	H_2O
AB_4E	4	1	 ત્રિકોણીય દ્વિપિરામિડલ	ચીંચવો (see saw)	SF_4
AB_3E_2	3	2	 ત્રિકોણીય દ્વિપિરામિડલ	T-આકાર	ClF_3
AB_5E	5	1	 અષ્ટફલકીય	સમચોરસ પિરામિડ	BrF_5
AB_4E_2	4	2	 અષ્ટફલકીય	સમતલીય ચોરસ	XeF_4

કોષ્ટક 4.8 બંધકારક યુગ્મ અને અબંધકારક યુગ્મ ધરાવતા અણુઓના આકાર

અણુ પ્રકાર	બંધકારક યુગ્મની સંખ્યા	અબંધકારક યુગ્મની સંખ્યા	ઈલેક્ટ્રૉનની ગોઠવણી	આકાર	મેળવેલા આકાર માટે કારણ
AB_2E	4	1		વળેલો	સૈદ્ધાંતિક રીતે આકાર ત્રિકોણીય સમતલ હોવો જોઈએ, પરંતુ તે વળેલો અથવા V-આકારનો હોય છે. આનું કારણ એ છે કે અબંધકારક યુગ્મ અને બંધકારક યુગ્મ વચ્ચે અપાકર્ષણ. બંધકારક યુગ્મની સરખામણીમાં અપાકર્ષણ વધારે હોય છે. તેથી ખૂણો 120°થી ઘટીને 119.5° થાય છે.
AB_3E	3	1		ત્રિકોણીય પિરામિડલ	lp ના સ્થાને bp હોત તો આકાર સમચતુષ્ફલકીય હોત પણ એક અબંધકારક યુગ્મ હાજર છે. તેથી lp-bp વચ્ચેનું અપાકર્ષણ bp-bp વચ્ચેના અપાકર્ષણ કરતાં વધારે છે તેથી બંધકારક યુગ્મ વચ્ચેનો ખૂણો 109.5°થી ઘટીને 107° થાય છે.
AB_2E_2	2	2		વળેલો	જો બધા જ bp હોત તો આકાર સમચતુષ્ફલકીય હોત પણ બે lp હાજર છે. તેથી આકાર વિકૃત સમચતુષ્ફલક અથવા કોણીય બને છે. કારણ એ છે કે lp-lp અપાકર્ષણ bp-bp અપાકર્ષણ કરતાં વધારે છે તેથી ખૂણો 109.5°થી ઘટીને 104.5° થાય છે.
AB_4E	4	1	 (વધારે સ્થાયી)	ચીંચવો	(a)માં lp અક્ષીય છે તેથી 90°ને ખૂણે ત્રણ lp-bp અપાકર્ષણ (b)માં lp વિષુવવૃત્તીય સ્થિતિમાં બે lp-bp અપાકર્ષણ છે. આથી (b) ગોઠવણી વધુ સ્થાયી છે. ગોઠવણી (b)માં દર્શાવેલ આકાર વિકૃત સમચતુષ્ફલક એક ગડી (fold) વાળેલા ચોરસ અથવા ચીંચવો તરીકે રજૂ કરી શકાય.

અણુ પ્રકાર	બંધકારક યુગ્મની સંખ્યા	અબંધકારક યુગ્મની સંખ્યા	ઈલેક્ટ્રૉનની ગોઠવણી	આકાર	મેળવેલા આકાર માટે કારણ
AB_3E_2	3	2	(a) (b) (c) 	 T-આકાર	T આકાર (a)માં lp વિષુવવૃત્તીય સ્થાનમાં છે. તેથી lp-bp અપાકર્ષણ બીજામાં જેમાં lp અક્ષીય સ્થાનમાં હોય છે તેના કરતાં ઓછા હોય છે તેથી રચના (a) સૌથી વધુ સ્થાયી છે. (T-આકાર)

4.5 સંયોજકતા બંધનવાદ (Valence Bond Theory)

આપણે જાણીએ છીએ કે લુઈસ અભિગમ અણુના આકાર લખવામાં મદદરૂપ થાય છે, પરંતુ રાસાયણિક બંધની રચનાને સમજાવવામાં નિષ્ફળ નીવડે છે. અને આ ઉપરાંત તે બંધ વિયોજન એન્થાલ્પી, બંધ લંબાઈમાં તફાવત વિશે નીચેના કેટલાક અણુઓ માટે કારણ દર્શાવી શકતો નથી. વળી તે કેટલાક અણુઓ જેવાં કે H_2 (435.8 kJ mol^{-1}; 74 pm) અને F_2 (155 kJ mol^{-1}; 144 pm) માટે બંધ વિયોજન ઊર્જામાં અને બંધ લંબાઈમાં તફાવત માટે કોઈ કારણ દર્શાવતો નથી. જો કે આ બન્ને કિસ્સામાં સહસંયોજક બંધ અનુરૂપ પરમાણુ વચ્ચે ઈલેક્ટ્રૉન ભાગીદારીથી રચાયેલો છે. તે બહુપરમાણ્વીય અણુના આકાર માટે કોઈ માહિતી આપતો નથી.

એ જ પ્રમાણે VSEPR સિદ્ધાંત સાદા અણુઓની ભૂમિતિ આપે છે, પરંતુ સૈદ્ધાંતિક રીતે તેમને સમજાવી શકતો નથી અને તેના મર્યાદિત અનુપ્રયોગો (applications) છે. આ મર્યાદાને પાર કરવા માટે બે અગત્યના સિદ્ધાંત જે ક્વૉન્ટમ યાંત્રિકીય સિદ્ધાંતના પાયા પર રચાયેલ છે તે દાખલ થયાં. આ છે - સંયોજકતા બંધન (VB) વાદ અને આણ્વીય કક્ષક (MO) વાદ.

સંયોજકતા બંધનવાદ 1927માં હિટલર (Heitler) અને લંડને (London) દાખલ કરેલો જેનો પાઉલિંગ અને અન્યોએ બહુ વિકસાવ્યો. સંયોજકતા બંધન વાદ પરની ચર્ચાનો આધાર પરમાણ્વીય કક્ષકો, તત્ત્વોની ઈલેક્ટ્રૉનીય રચના (એકમ 2), પરમાણ્વીય કક્ષકોનું અતિવ્યાપન (overlapping) અથવા સંમિશ્રણ, પરમાણ્વીય કક્ષકોના સંકરણ અને વિચરણ (variation) તથા અધ્યારોપણ (superposition) ઉપર આધારિત છે. આ બાબતોના આધાર પર VB વાદનું ખરેખર વિવેચન આ પુસ્તકની તાકાત બહારનું છે. આ માટે અનુકૂળતા ખાતર સંયોજકતા બંધન વાદ માત્ર ગુણાત્મક અને બિનગાણિતીય રીતે જ ચર્ચવામાં આવેલ છે. આની શરૂઆત આપણે હાઈડ્રોજન અણુની રચનાથી કરીએ જે બધા અણુઓમાં સૌથી સરળ છે.

બે હાઈડ્રોજન પરમાણુઓ A અને B તેમના કેન્દ્ર N_A અને N_B તરફ એકબીજાની નજીક હોય છે અને તેમના ઈલેક્ટ્રૉન અનુક્રમે e_A અને e_B છે, જ્યારે આ બે પરમાણુઓ એકબીજાથી ઘણે જ દૂર હોય તો તેમની વચ્ચે પારસ્પરિક ક્રિયા નહિ થાય. આ બન્ને પરમાણુઓ જેમ જેમ એકબીજાની નજીક આવે છે તેમ તેમ નવા આકર્ષણ અપાકર્ષણ બળો ક્રિયામાં આવે છે. આકર્ષણ બળો નીચેની બાબતો વચ્ચે ઉદ્ભવે છે :

(i) એક પરમાણુનું કેન્દ્ર અને પોતાનો ઈલેક્ટ્રૉન એટલે કે $N_A - e_A$ અને $N_B - e_B$.

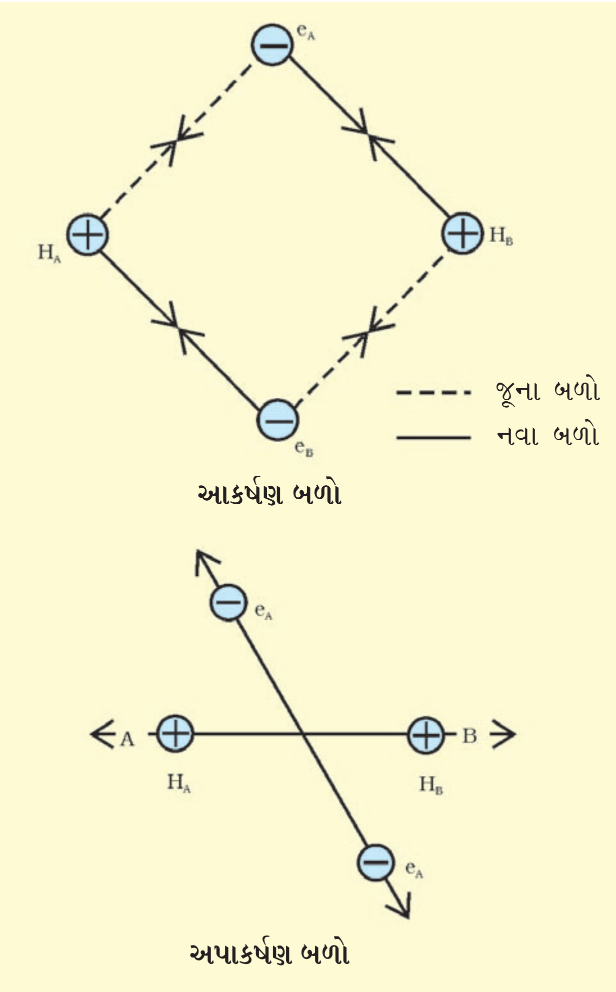
(ii) એક પરમાણુનું કેન્દ્ર અને બીજા પરમાણુનો ઇલેક્ટ્રૉન એટલે કે $N_A - e_B$ અને $N_B - e_A$.

આ જ પ્રમાણે અપાકર્ષણ બળો નીચેની બાબતો વચ્ચે ઉદ્‌ભવે છે :

(i) બન્ને પરમાણુઓના ઇલેક્ટ્રૉન $e_A - e_B$.

(ii) બન્ને પરમાણુના કેન્દ્ર $N_A - N_B$.

આકર્ષણ બળો બન્ને પરમાણુઓને નજીક લાવવા પ્રયત્ન કરે છે, જ્યારે અપાકર્ષણ બળો એકબીજાને દૂર ધકેલે છે. (આકૃતિ 4.7)

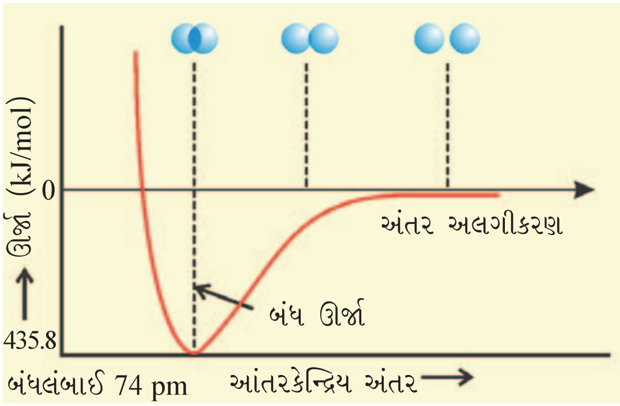


આકૃતિ 4.7 H_2 અણુની રચના દરમિયાનના આકર્ષણ અને અપાકર્ષણ બળો

પ્રાયોગિક રીતે એ જણાયું છે કે નવા આકર્ષણ બળોની માત્રા નવા અપાકર્ષણ બળોની માત્રા કરતાં વધારે છે. આને પરિણામે બન્ને પરમાણુઓ એકબીજાની નજીક આવે છે અને સ્થિતિજ ઊર્જા ઘટે છે. છેવટે એક એવા તબક્કે પહોંચે છે કે જ્યાં ચોખ્ખું (net) આકર્ષણ બળ અપાકર્ષણ બળ એકબીજાને સમતુલિત કરે છે અને પ્રણાલી નિમ્નતમ ઊર્જા પ્રાપ્ત કરે છે. આ તબક્કે હાઇડ્રોજન પરમાણુઓ એકબીજા સાથે બંધન પામે છે અને સ્થાયી અણુની રચના કરે છે. જેની બંધલંબાઈ 74 pm છે.

જ્યારે બન્ને હાઇડ્રોજન પરમાણુઓ વચ્ચે બંધ રચાય છે ત્યારે ઊર્જા છૂટી પડે છે અને તેથી હાઇડ્રોજન અણુ અલગ હાઇડ્રોજન પરમાણુ કરતાં વધુ સ્થાયી હોય છે. છૂટી પડેલી ઊર્જાને **બંધ એન્થાલ્પી** કહે છે. આકૃતિ 4.8માં દર્શાવ્યા પ્રમાણે નિમ્નતમ સ્થિતિને અનુરૂપ હોય છે. વિપરીત રીતે કહીએ તો 435.8 kJ ઊર્જાની એક મોલ અણુને વિયોજિત કરવા માટે જરૂર પડશે.

$$H_2(g) + 435.8 \text{ kJ mol}^{-1} \rightarrow H(g) + H(g)$$



આકૃતિ 4.8 H પરમાણુઓના આંતરકેન્દ્રિય અંતર અને H_2 અણુ બનવા માટેનો સ્થિતિજ ઊર્જાનો વક્ર. વક્રમાં નિમ્નતમ અવસ્થા H_2ની વધુ સ્થાયી અવસ્થાને અનુરૂપ છે.

4.5.1 કક્ષકીય સંમિશ્રણ ખ્યાલ (Orbital Overlap Concept)

હાઇડ્રોજન અણુની રચનામાં જ્યારે બન્ને હાઇડ્રોજન પરમાણુ એટલા નજીક હોય છે એટલે કે નિમ્નતમ ઊર્જા હોય છે. આથી તેમની કક્ષકો કંઈક અંશે આંતરભેદન (interpenetration) દર્શાવે છે. આ આંશિક આંતરભેદનને પરમાણ્વીય કક્ષકોનું સંમિશ્રણ કહે છે. જે ઇલેક્ટ્રૉનનું યુગ્મ છે. સંમિશ્રણની માત્રા સહસંયોજક બળનું સામર્થ્ય નક્કી કરે છે. સામાન્ય રીતે જેમ વધારે સંમિશ્રણ તેમ બન્ને પરમાણુઓ વચ્ચે રહેલા બંધનું સામર્થ્ય વધારે. આથી કક્ષકીય સંમિશ્રણ ખ્યાલથી બે પરમાણુઓ વચ્ચે સહસંયોજક બંધની રચના વિરુદ્ધ ભ્રમણ ધરાવતા સંયોજકતા ઇલેક્ટ્રૉન યુગ્મને કારણે પરિણમે છે.

4.5.2 બંધના દિશાત્મક ગુણધર્મો (Directional Properties of Bonds)

આપણે જોયું તેમ સહસંયોજક બંધ પરમાણ્વીય કક્ષકોના સંમિશ્રણથી રચાય છે. બે H પરમાણુની 1s-કક્ષકોના સંમિશ્રણથી H_2નો અણુ બને છે.

CH_4, NH_3 અને H_2O જેવા બહુપરમાણ્વીય અણુઓની ભૂમિતિ, બંધ રચના ઉપરાંત પણ અગત્યની છે. ઉદાહરણ તરીકે CH_4 અણુ શા માટે ચતુષ્ફલકીય અણુ છે અને HCH ખૂણો 109.5^o છે ? NH_3 અણુનો આકાર શા માટે પિરામિડલ છે ?

સંયોજકતા બંધન વાદ CH_4, NH_3 અને H_2O વગેરે જેવા અણુઓમાં બંધની રચના અને દિશાત્મક ગુણધર્મો પરમાણ્વીય કક્ષકોના સંમિશ્રણ અને સંકરણના પર્યાય(સંદર્ભ)માં સમજાવી શકે છે.

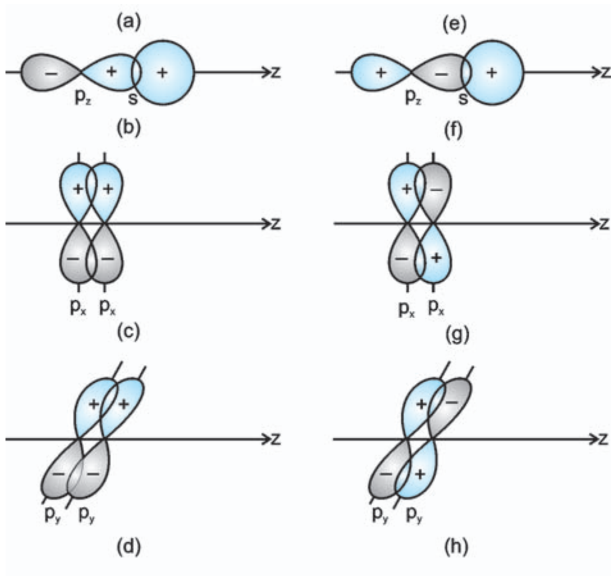
4.5.3 પરમાણ્વીય કક્ષકોનું સંમિશ્રણ (Overlapping of Atomic Orbitals)

જ્યારે બે પરમાણુઓની કક્ષકો નજીક આવીને બંધ બનાવે છે ત્યારે તેમનું સંમિશ્રણ ધન, ઋણ અથવા શૂન્ય હોઈ શકે છે જેનો આધાર અવકાશમાં કક્ષકીય તરંગ વિધેય સંજ્ઞા (કલા-phase) અને દિક્‌વિન્યાસની દિશા પર હોય છે (આકૃતિ 4.9). સીમા સપાટી આકૃતિઓમાં કક્ષકીય તરંગ વિધેયની ધન કે ઋણ સંજ્ઞા ભાર સાથે સંબંધિત નથી. બંધ રચતી કક્ષકોની સંજ્ઞા (કલા) અને દિક્‌વિન્યાસ સમાન હોવા જોઈએ. આને ધન સંમિશ્રણ કહે છે. *s* અને *p* કક્ષકોનાં જુદા જુદા મિશ્રણ આકૃતિ 4.9માં દર્શાવેલ છે.

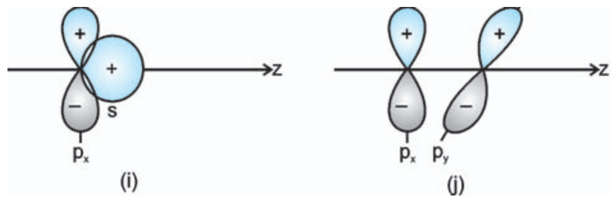
સહસંયોજક બંધની રચનામાં અગત્યના અવયવ તરીકે સંમિશ્રણનો ખ્યાલ એકસરખી રીતે સમકેન્દ્રીય અને વિષમકેન્દ્રીય દ્વિપરમાણ્વીય અણુને અને બહુપરમાણ્વીય અણુઓને લાગુ પડે છે. આપણે જાણીએ છીએ કે CH_4, NH_3 અને H_2O અણુ અનુક્રમે સમચતુષ્ફલક, પિરામિડલ અને વળેલા છે. આથી એ રસપ્રદ થશે કે સંયોજકતા બંધન વાદના ઉપયોગથી આ ભૂમિતિઓ કક્ષકીય સંમિશ્રણના અર્થમાં સમજાવી શકાશે.

આપણે પ્રથમ CH_4 (મિથેન) અણુ લઈએ. કાર્બનની ધરા અવસ્થામાં ઇલેક્ટ્રૉનીય રચના $[He]2s^22p^2$ છે. જે ઉત્તેજિત અવસ્થામાં $[He]2s^12p_x^12p_y^12p_z^1$ બને છે. આ ઉત્તેજન માટે જરૂરી ઊર્જા કાર્બન અને હાઇડ્રોજનની કક્ષકો વચ્ચેના

ધન અથવા કલામાં સંમિશ્રણ   ઋણ અથવા કલાની બહાર સંમિશ્રણ



શૂન્ય સંમિશ્રણ (કલાની બહાર કારણ કે દિશાઓને નજીક જવું.)



આકૃતિ 4.9 *s* અને *p* પરમાણ્વીય કક્ષકોનું ધન, ઋણ અને શૂન્ય સંમિશ્રણ

સંમિશ્રણને લીધે મુક્ત થતી ઊર્જા સાથે સરભર (compensate) થાય છે.

કાર્બનની ચાર પરમાણ્વીય કક્ષકોમાંની દરેક જેની પાસે એક અયુગ્મિત ઇલેક્ટ્રૉન છે તે ચાર હાઇડ્રોજન પરમાણુની 1s કક્ષકો જે એક જ ઇલેક્ટ્રૉનથી ભરાયેલી છે. તેની સાથે સંમિશ્રણ કરશે. આને પરિણામે ચાર C-H બંધ રચાશે. એ નોંધવામાં આવશે કે કાર્બનની ત્રણ *p*-કક્ષકો એકબીજાને 90^oના ખૂણે છે તેથી HCH ખૂણો 90^o થશે. એટલે કે ત્રણ C-H બંધ એકબીજાને 90^oના ખૂણે દિક્‌વિન્યાસ દર્શાવશે. કાર્બનની 2s-કક્ષક અને Hની 1s-કક્ષક વર્તુળાકાર રીતે સંમિશ્ર છે અને તેઓ ગમે તે દિશામાં સંમિશ્રણ થઈ શકે છે તેથી ચોથા C-H બંધની ખાત્રી થઈ શકશે નહિ. આ વર્ણન સમચતુષ્ફલક HCHના 109.5^o ખૂણા સાથે બંધબેસશે નહિ. એમ થાય છે કે સરળ પરમાણ્વીય કક્ષકોનું સંમિશ્રણ CH_4ના બંધની દિશાત્મક લાક્ષણિકતાનો હિસાબ આપતી નથી. સમાન પદ્ધતિ અને દલીલોનો ઉપયોગ કરીને એ જોઈ

શકાશે કે NH_3 અને H_2O અણુઓમાં HNH અને HOH ખૂણા 90^oના હોવા જોઈએ. આ ખરેખર બંધકોણ 107^o NH_3માં અને 104.5^o પાણીમાં સાથે સુસંગત નથી.

4.5.4 સંમિશ્રણના પ્રકાર અને સહસંયોજક બંધનો સ્વભાવ (પ્રકૃતિ) (Types of Overlapping and Nature of Covalent Bonds)

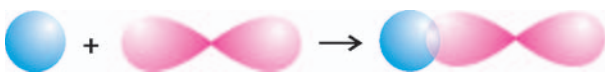
સહસંયોજક બંધ સંમિશ્રણના પ્રકાર પ્રમાણે બે પ્રકારમાં વર્ગીકૃત કરી શકાય : (i) સિગ્મા (σ) બંધ (ii) પાઈ (π) બંધ.

(i) સિગ્મા (σ) બંધ : આ પ્રકારનો સહસંયોજક બંધ આંતરકેન્દ્રિય અક્ષ પર બંધન પામતી કક્ષકોના છેડાથી છેડા (શીર્ષ ઉપર)ના સંમિશ્રણથી રચાય છે. આને શીર્ષ ઉપર અથવા અક્ષીય સંમિશ્રણ કહે છે. આની રચના પરમાણ્વીય કક્ષકોના નીચે દર્શાવ્યા પ્રમાણેના જોડાણના કોઈ એક પ્રકારથી રચાય છે.

- ***s-s* સંમિશ્રણ :** આમાં બે અર્ધપૂર્ણ *s*-કક્ષકોનું આંતરકેન્દ્રિય અક્ષ પરનું સંમિશ્રણ હોય છે જે નીચે પ્રમાણે દર્શાવેલ છે :

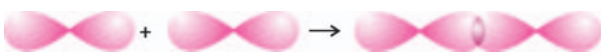
s-કક્ષક *s*-કક્ષક *s-s* સંમિશ્રણ

- ***s-p* સંમિશ્રણ :** આ પ્રકારનું સંમિશ્રણ એક પરમાણુની અર્ધપૂર્ણ *s*-કક્ષકો અને બીજા પરમાણુની અર્ધપૂર્ણ *p*-કક્ષકો વચ્ચે હોય છે.



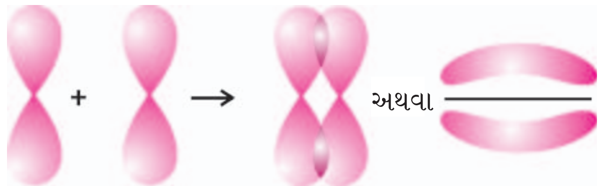
s-કક્ષક *p*-કક્ષક *s-p* સંમિશ્રણ

- ***p-p* સંમિશ્રણ :** આ પ્રકારનું સંમિશ્રણ એકબીજાની નજીક જતાં પરમાણુઓની અર્ધપૂર્ણ *p*-કક્ષકો વચ્ચે રચાય છે.



p-કક્ષક *p*-કક્ષક *p-p* સંમિશ્રણ

(ii) પાઈ (π) બંધ : π બંધની રચનામાં પરમાણ્વીય કક્ષકો એવી રીતે સંમિશ્ર થાય છે કે તેમની અક્ષ એકબીજાને સમાંતર રહે છે અને આંતરકેન્દ્રિય અક્ષ લંબ હોય છે. આમ બાજુમાંના મિશ્રણને લીધે રચાતી કક્ષકો, રચનામાં ભાગ લેતા પરમાણુઓના તલની ઉપર અને નીચે રકાબી જેવા આકારના બે ભારિત વાદળ રચે છે.



p-કક્ષક *p*-કક્ષક *p-p* સંમિશ્રણ

4.5.5 σ અને π બંધની પ્રબળતા (Strength of σ and π Bonds)

મૂળ રીતે ગણીએ તો બંધની પ્રબળતા સંમિશ્રણની માત્રા પર આધાર રાખે છે. સિગ્મા બંધની બાબતમાં, કક્ષકોનું સંમિશ્રણ વધારે પ્રમાણમાં થાય છે. તેથી તેની પ્રબળતા π બંધ કરતાં વધારે હોય છે. π બંધમાં સંમિશ્રણ ઓછું હોય છે. આ ઉપરાંત એ નોંધવું અગત્યનું છે કે અણુના બે પરમાણુ વચ્ચે રચાતા બહુ બંધમાં સિગ્મા (σ) બંધ ઉપરાંત π બંધ રચાય છે.

4.6 સંકરણ (Hybridisation)

CH_4, NH_3 અને H_2O જેવા બહુપરમાણ્વીય અણુના લાક્ષણિક ભૌમિતિક આકાર સમજાવવા માટે પાઉલિંગે સંકરણનો ખ્યાલ દાખલ કર્યો. તેમના મત પ્રમાણે પરમાણ્વીય કક્ષકો જોડાય છે અને સમતુલ્ય કક્ષકોનો એક સેટ બનાવે છે. જે **સંકર કક્ષકો** તરીકે ઓળખાય છે. શુદ્ધ કક્ષકોને બદલે આવી સંકર કક્ષકોનો ઉપયોગ બંધ રચનામાં થાય છે. આ ઘટનાને **સંકરણ** કહે છે. જેની વ્યાખ્યા આપી શકાય કે તેમાં થોડી જુદી જુદી ઊર્જાવાળી કક્ષકોનું આંતરમિશ્રણ થાય છે, જેથી તેમની ઊર્જાનું પુનઃવિતરણ કરે છે જેને પરિણામે સમાન ઊર્જા અને આકારવાળી નવી કક્ષકોનો સેટ રચાય છે. ઉદાહરણ તરીકે જ્યારે કાર્બનની એક 2*s* અને ત્રણ 2*p* કક્ષકો સંકરણ પામે છે ત્યારે ચાર નવી sp^3 સંકર કક્ષકોની રચના થાય છે.

સંકરણની વિશિષ્ટ ખાસિયતો : સંકરણની મુખ્ય ખાસિયતો નીચે પ્રમાણે છે :

(1) સંકૃત કક્ષકોની સંખ્યા સંકરણ પામતી પરમાણ્વીય કક્ષકોની સંખ્યા બરાબર હોય છે.

(2) સંકૃત કક્ષકો હંમેશાં સમતુલ્ય ઊર્જાવાળી અને આકારની હોય છે.

(3) શુદ્ધ પરમાણ્વીય કક્ષકો કરતાં સંકર કક્ષકો સ્થાયી બંધની રચનામાં વધુ અસરકારક હોય છે.

(4) સંકૃત કક્ષકો અવકાશમાં એવી રીતે અમુક પસંદ કરેલ દિશામાં દિશાત્મક હોય છે જેથી સ્થાયી ગોઠવણી અને ઇલેક્ટ્રૉન યુગ્મ વચ્ચે નિમ્નતમ અપાકર્ષણ હોય. આથી સંકરણનો પ્રકાર અણુની ભૂમિતિ સૂચવે છે.

સંકરણ માટે અગત્યની શરતો :

(i) પરમાણુની સંયોજકતા કોશમાં રહેલી કક્ષકો જ સંકરણ પામે છે.

(ii) સંકરણ અનુભવતી કક્ષકોને લગભગ સમાન ઊર્જા હોવી જોઈએ.

(iii) સંકરણ અગાઉ ઇલેક્ટ્રૉનની બઢતી (promotion) અનિવાર્ય શરત નથી.

(iv) એવું જરૂરી નથી કે અર્ધપૂર્ણ કક્ષકો જ સંકરણમાં ભાગ લે. કેટલીક બાબતોમાં સંયોજકતા કોશની પૂર્ણ ભરાયેલી કક્ષકો પણ સંકરણમાં ભાગ લે છે.

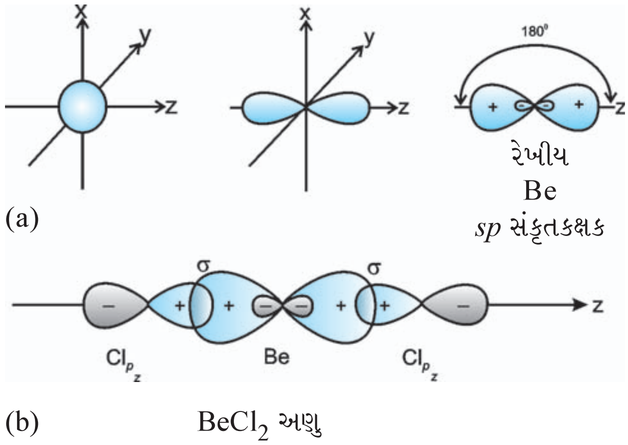
4.6.1 સંકરણના પ્રકાર (Types of Hybridisation)

s, *p* અને *d* કક્ષકોને સમાવી લેતા ઘણા પ્રકારના સંકરણ છે. જુદા જુદા પ્રકારના સંકરણ નીચે પ્રમાણે છે :

(I) *sp* સંકરણ : આ પ્રકારના સંકરણમાં એક *s* અને એક *p* કક્ષકો મિશ્ર થાય છે અને બે સમાન *sp* કક્ષકો રચે છે. *sp* સંકરણ માટે યોગ્ય કક્ષકોમાં *s* અને p_z કક્ષકો પણ છે. જો સંકર કક્ષકો *z*-ધરી પર હોય તો દરેક *sp* સંકર કક્ષકને 50 % *s*-લાક્ષણિકતા અને 50 % *p*-લાક્ષણિકતા હોય છે. આવો અણુ જેમાં મધ્યસ્થ પરમાણુ *sp* સંકૃત કક્ષકો ધરાવે છે અને તે સીધી જ બીજા બે મધ્યસ્થ પરમાણુ સાથે સંયોજાય છે અને રેખીય ભૂમિતિ ધરાવે છે. આ પ્રકારનું સંકરણ વિકર્ણીય સંકરણ તરીકે પણ ઓળખાય છે.

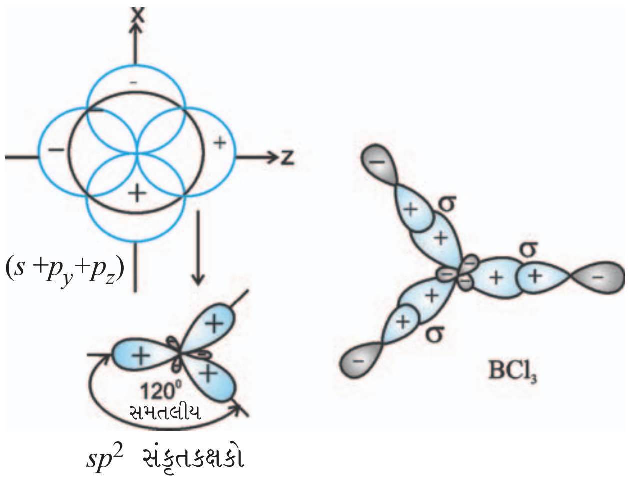
બન્ને *sp*-સંકૃત કક્ષકો *z*-ધરી પર એકબીજાની વિરુદ્ધ પ્રક્ષેપી ધન અને ઘણો નાના ઋણ પિંડક (lobe) તરીકે ગોઠવાય છે. આને પરિણામે વધુ મજબૂત બંધ રચાય છે.

***sp*-સંકરણ ધરાવતા અણુનું ઉદાહરણ : $BeCl_2$:** Beની ધરાઅવસ્થામાં ઇલેક્ટ્રૉનીય રચના $1s^22s^2$ છે. ઉત્તેજિત અવસ્થામાં તેની દ્વિસંયોજકતાને લીધે એક 2*s* ઇલેક્ટ્રૉન બઢતી પામી ખાલી 2*p*-કક્ષકમાં ગોઠવાય છે. એક 2*s* અને એક 2*p* કક્ષકો સંકરણ પામે છે. તેથી *sp* સંકૃત કક્ષકો મળે છે. આ બંને સંકૃત કક્ષકો એકબીજાની વિરુદ્ધ દિશામાં દિક્‌વિન્યાસ દર્શાવે છે અને 180^oનો ખૂણો રચે છે. દરેક *sp* સંકૃત કક્ષક ક્લોરિનની 2*p*-કક્ષક કક્ષકો સાથે અક્ષીય રીતે જોડાય છે અને બે Be-Cl σ બંધ રચે છે. આ આકૃતિ 4.10માં દર્શાવેલ છે.



આકૃતિ 4.10 (a) *s* અને *p* કક્ષકોમાંથી *sp* સંકૃતકક્ષકની રચના (b) રેખીય અણુ $BeCl_2$ની રચના

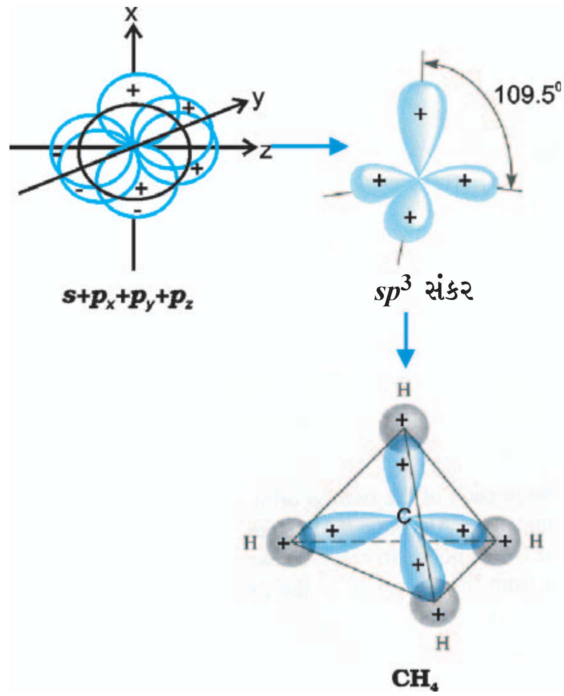
(II) sp^2 સંકરણ : આ સંકરણમાં એક *s* અને બે *p*-કક્ષકોનો સમાવેશ થાય છે અને ત્રણ સમાન sp^2 સંકૃત કક્ષકો રચે છે. ઉદાહરણ તરીકે BCl_3 અણુમાં મધ્યસ્થ પરમાણુ બોરોનની ધરા અવસ્થામાં ઇલેક્ટ્રૉનીય રચના $1s^22s^22p^1$ છે. ઉત્તેજિત અવસ્થામાં 2*s* માંનો એક ઇલેક્ટ્રૉન બઢતી પામીને ખાલી 2*p*-કક્ષકમાં ગોઠવાય છે, જેને પરિણામે બોરોન પાસે



આકૃતિ 4.11 sp^2 સંકૃતકક્ષકોની રચના અને BCl_3 અણુ

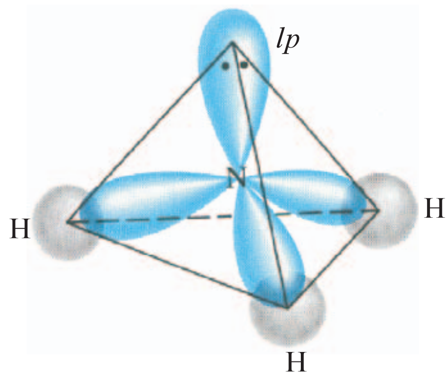
ત્રણ અયુગ્મિત ઇલેક્ટ્રૉન થાય છે. આ ત્રણેય કક્ષકો (એક $2s$ અને બે $2p$) સંકરણ પામી ત્રણ sp^2 સંકૃત કક્ષકો રચે છે. આ પ્રમાણે રચાયેલી ત્રણેય સંકૃત કક્ષકો સમતલીય ત્રિકોણીય દિક્‌વિન્યાસમાં ગોઠવાય છે અને ક્લોરિનની $2p$-કક્ષક સાથે મિશ્રણ કરે છે અને ત્રણ B-Cl બંધ રચે છે. આથી BCl_3ની (આકૃતિ 4.11) ભૂમિતિ સમતલીય ત્રિકોણ છે અને ClBCl બંધકોણ 120^oનો હોય છે.

(III) sp^3 સંકરણ : આ પ્રકારના સંકરણને CH_4નું ઉદાહરણ લઈ સમજાવી શકીએ. જેમાં સંયોજકતા કોશની એક s અને ત્રણ p-કક્ષકોનું મિશ્રણ થાય છે અને ચાર sp^3 સંકૃત કક્ષકો જે સમાન ઊર્જા અને આકાર ધરાવે છે. તે દરેકમાં sp^3 કક્ષકના 25 % s-લાક્ષણિકતા અને 75 % p-લાક્ષણિકતા હોય છે. ચારેય sp^3 સંકૃત કક્ષકો સમચતુષ્ફલકના ચાર ખૂણા તરફ દિશાત્મક બને છે (દિક્‌વિન્યાસ રચે છે.). sp^3 સંકૃત કક્ષકો વચ્ચે 109.5^oનો ખૂણો હોય છે. જે આકૃતિ 4.12માં દર્શાવેલ છે.



આકૃતિ 4.12 કાર્બનની s, p_x, p_y, p_z પરમાણ્વીય કક્ષકોના સંમિશ્રણથી sp^3 સંકૃત કક્ષકોની રચના અને CH_4 અણુની રચના

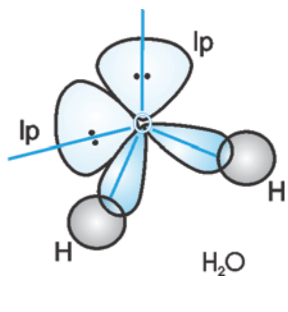
NH_3 અને H_2O અણુઓની રચનાને sp^3 સંકરણની મદદ વડે પણ સમજાવી શકાય છે. NH_3માં સંયોજકતા કોશ(બાહ્ય)માં નાઈટ્રોજનની ઇલેક્ટ્રૉનીય રચના ધરા અવસ્થામાં $2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$ છે. જેમાં ત્રણ અયુગ્મિત ઇલેક્ટ્રૉન sp^3 સંકૃત કક્ષકમાં છે અને ચોથામાં અબંધકારક ઇલેક્ટ્રૉનની જોડ છે. આ ત્રણ સંકૃત કક્ષકો હાઇડ્રોજન પરમાણુની $1s$ કક્ષકો સાથે સંમિશ્ર થાય છે અને ત્રણ N-H સિગ્મા બંધ રચે છે. આપણે જાણીએ છીએ કે અબંધકારક યુગ્મ અને બંધકારક યુગ્મ વચ્ચેનું અપાકર્ષણ બળ ઇલેક્ટ્રૉનના બે બંધકારક યુગ્મો કરતાં વધારે છે. આને લીધે અણુમાં વિકૃતિ ઉદ્‌ભવે છે અને ખૂણો 109.5^oથી ઘટીને 107^o થાય છે. આવા અણુની ભૂમિતિ આકૃતિ 4.13માં દર્શાવ્યા પ્રમાણે પિરામિડલ હોય છે.



એમોનિયા NH_3

આકૃતિ 4.13 NH_3 અણુની રચના

H_2O અણુમાં ચાર ઑક્સિજનની કક્ષકો (એક $2s$ અને ત્રણ $2p$) sp^3 સંકરણ પામે છે અને ચાર સંકૃત sp^3 કક્ષકો પ્રાપ્ત થાય છે. જેમાંથી બે એક-એક ઇલેક્ટ્રૉન ધરાવે છે અને બે ઇલેક્ટ્રૉન યુગ્મ ધરાવે છે. આ ચાર sp^3 સંકૃત કક્ષકો સમચતુષ્ફલકીય રચના પ્રાપ્ત કરે છે. જેમાંની બે ખૂણાના હાઇડ્રોજન વડે પ્રાપ્ત કરાય છે. જ્યારે બાકીની બે અબંધકારક ઇલેક્ટ્રૉન ધરાવે છે. આ ઉદાહરણમાં બંધ કોણ 109.5^oથી ઘટીને 104.5^o બને છે અને અણુ V-આકારમાં અથવા કોણીય ભૂમિતિ પ્રાપ્ત કરે છે.



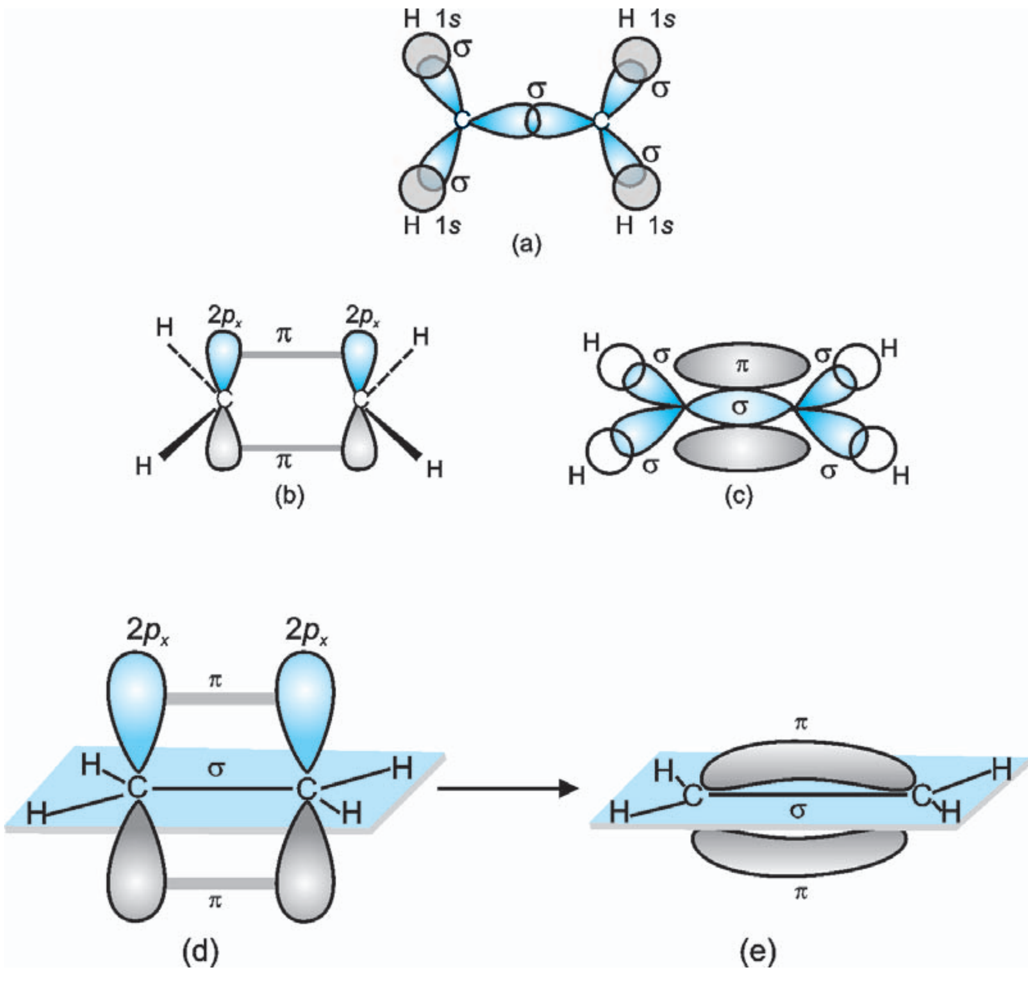
આકૃતિ 4.14 H_2O અણુની રચના

4.6.2 sp^3, sp^2 અને sp સંકરણના અન્ય ઉદાહરણો (Other Examples of sp^3, sp^2 and sp Hybridisation)

C_2H_6 અણુમાં sp^3 સંકરણ : ઈથેન અણુમાં બન્ને કાર્બન પરમાણુઓ sp^3 સંકૃત અવસ્થા ધરાવે છે. ચાર sp^3 સંકૃત કક્ષકોમાંની એક બીજા કાર્બન પરમાણુની એક sp^3 સંકૃત કક્ષક સાથે અક્ષીય સંમિશ્રણ પામે છે અને sp^3-sp^3 સિગ્મા બંધ રચે છે. અને દરેકની બાકીની સંકૃત કક્ષકો આગળ મુદ્દા નં. 4.6.1 (iii)માં ચર્ચા કર્યા પ્રમાણે sp^3-s સિગ્મા બંધ રચે છે. આથી ઈથેનમાં C-C બંધ લંબાઈ 154 pm અને દરેક C–H બંધની લંબાઈ 109 pm છે.

C_2H_4 અણુમાં sp^2 સંકરણ : ઈથીન અણુની રચનામાં કાર્બનની sp^2 સંકૃત કક્ષકોમાંની એક અક્ષીય રીતે બીજા કાર્બનની sp^2 સંકૃત કક્ષક સાથે સંમિશ્ર થાય છે અને C-C σ બંધ રચે છે; જ્યારે દરેક કાર્બનની બીજી બે સંકૃત કક્ષકો બે હાઈડ્રોજન પરમાણુ સાથે sp^2-s સિગ્મા બંધ રચે છે. એક કાર્બનની સંકૃત ન થયેલી ($2p_y$ અને $2p_z$) કક્ષકો બાજુએથી બીજી કાર્બનની સંકૃત ન થયેલી કક્ષક સાથે સંમિશ્ર થઈને નિર્બળ π-બંધ રચે છે. આ કાર્બન અને હાઈડ્રોજનની સમતલને ઉપર અને નીચે બે સમાન ઈલેક્ટ્રૉન વાદળ ધરાવે છે.

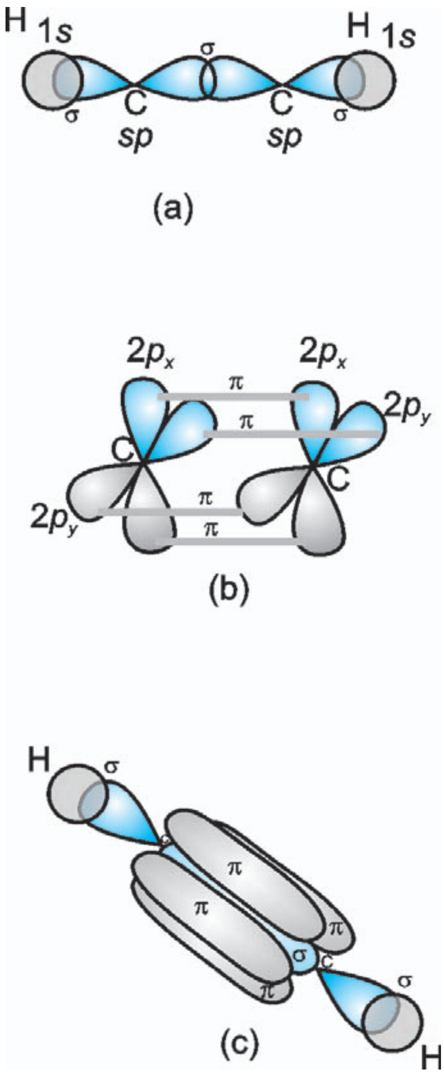
આમ ઈથીન અણુમાં કાર્બન-કાર્બન બંધ એક sp^2-sp^2 સિગ્મા બંધ અને એક પાઈ (π) બંધ સંકૃત ન થયેલી p-કક્ષકો વચ્ચે રચાય છે. સંકરણમાં ન વપરાયેલી p-કક્ષકો અણુના સમતલને લંબ હોય છે. બંધ લંબાઈ 134 pm હોય છે. C–H બંધ sp^2-s સિગ્મા બંધની લંબાઈ 108 pm છે. H–C–H બંધ કોણ 117.6° હોય છે, જ્યારે H–C–C ખૂણો 121° છે. ઈથીનમાં સિગ્મા અને પાઈ બંધની રચના આકૃતિ 4.15માં દર્શાવેલ છે.



આકૃતિ 4.15 ઈથીનમાં સિગ્મા અને પાઈ બંધની રચના

C_2H_2 અણુમાં *sp* સંકરણ : ઈથાઈન અણુની રચનામાં બન્ને કાર્બન પરમાણુઓના *sp*-સંકરણનો સમાવેશ થાય છે અને બે સંકૃત ન થયેલી કક્ષકો એટલે કે $2p_y$ અને $2p_x$ હોય છે.

એક કાર્બન પરમાણુની એક *sp*-સંકૃત કક્ષક બીજા કાર્બન પરમાણુની એક સંકૃત કક્ષક સાથે સંમિશ્ર થાય છે અને C–C સિગ્મા બંધ રચે છે, જ્યારે દરેક કાર્બનની બીજી સંકૃત કક્ષક હાઇડ્રોજન પરમાણુની અર્ધપૂર્ણ *s*-કક્ષકો સાથે σ બંધ રચે છે. બન્ને કાર્બન પરમાણુઓની સંકૃત ન થયેલી બે *p*-કક્ષકો બાજુએથી સંમિશ્ર થાય છે અને બે π-બંધ બે કાર્બન વચ્ચે રચે છે. આથી બે કાર્બન વચ્ચેનો ત્રિબંધ એક સિગ્મા બંધ અને બે પાઈ બંધનો બનેલો હોય છે. આ આકૃતિ 4.16માં દર્શાવેલ છે.



આકૃતિ 4.16 ઈથાઈનમાં સિગ્મા અને પાઈ બંધની રચના

4.6.3 *d*-કક્ષકોનો સમાવેશ કરતા તત્ત્વોનું સંકરણ (Hybridisation of Elements Involving *d*-Orbitals)

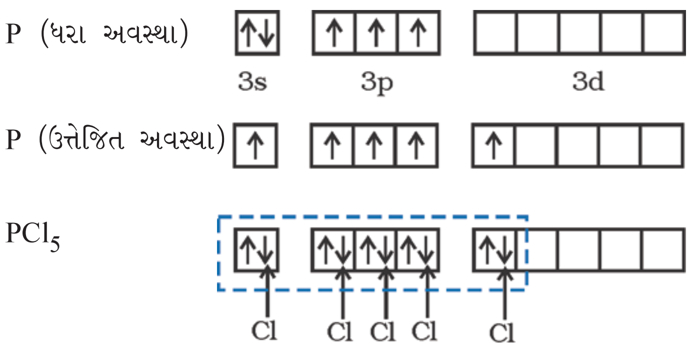
ત્રીજા આવર્તમાં આવેલ તત્ત્વો *s* અને *p*-કક્ષકો ઉપરાંત *d*-કક્ષકો ધરાવે છે. 3*d*-કક્ષકોની ઊર્જા 3*s* અને 3*p* કક્ષકોની સાથે સરખાવી શકાય તેવી છે. 3*d*-કક્ષકોની ઊર્જા 4*s* અને 4*p* કક્ષકો સાથે સરખાવી શકાય તેવી છે. આને પરિણામે 3*s*, 3*p* અને 3*d* અથવા 3*d*, 4*s* અને 4*p* કક્ષકોને સમાવતું સંકરણ શક્ય છે. 3*p* અને 4*s* કક્ષકો વચ્ચેનો તફાવત અર્થસૂચક (સાર્થક) છે. તેથી 3*p*, 3*d* અને 4*s* કક્ષકો સમાવતું સંકરણ શક્ય નથી.

s, *p* અને *d* કક્ષકોને સમાવી લેતા સંકરણોનો નીચે પ્રમાણે ઉપસંહાર કરી શકાય :

અણુ/આયનનો આકાર	સંકરણનો પ્રકાર	પરમાણ્વીય કક્ષકો	ઉદાહરણ
સમતલીય ચોરસ	dsp^2	$d+s+p(2)$	$[Ni(CN)_4]^{2-}$, $[Pt(Cl)_4]^{2-}$
ત્રિકોણીય પિરામિડલ	sp^3d	$s+p(3)+d$	PF_5, PCl_5
ચોરસ પિરામિડલ	sp^3d^2	$s+p(3)+d(2)$	BrF_5
અષ્ટફલકીય	sp^3d^2 d^2sp^3	$s+p(3)+d(2)$ $d(2)+s+p(3)$	SF_6, $[CrF_6]^{3-}$ $[Co(NH_3)_6]^{3+}$

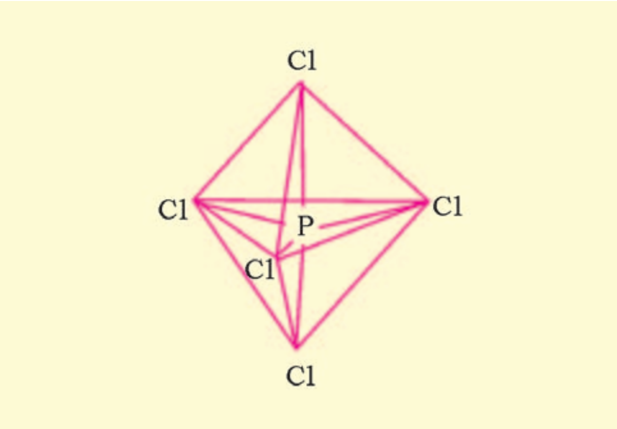
(i) PCl_5ની રચના (sp^3d સંકરણ) :

ફોસ્ફરસ (Z = 15)ની ધરા અવસ્થા અને ઉત્તેજિત અવસ્થામાં બાહ્ય ઇલેક્ટ્રોનીય રચના નીચે દર્શાવી છે :



પાંચ ક્લોરિન પરમાણુ વડે દાન કરાયેલ ઇલેક્ટ્રૉન યુગ્મથી ભરાયેલી sp^3d સંકર કક્ષકો

હવે પાંચેય કક્ષકો (એટલે કે એક *s*, ત્રણ *p* અને એક *d* કક્ષકો) સંકરણ માટે ઉપલબ્ધ છે. જેથી આપણને પાંચ sp^3d સંકર કક્ષકોનો સેટ મળશે. જે ત્રિકોણીય દ્વિપિરામીડના પાંચ ખૂણાઓ તરફ દિશાત્મક હશે. જે આકૃતિ 4.17માં દર્શાવેલ છે.

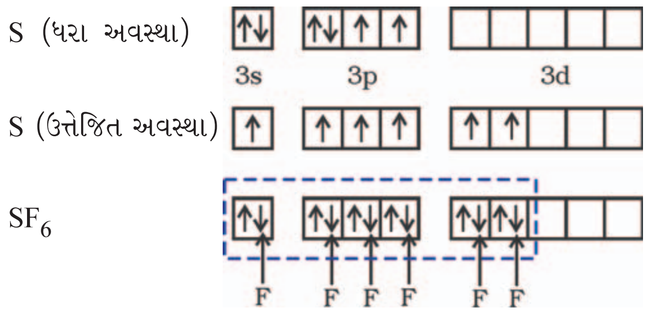


આકૃતિ 4.17 PCl_5 અણુની ત્રિકોણીય દ્વિપિરામિડલ ભૂમિતિ

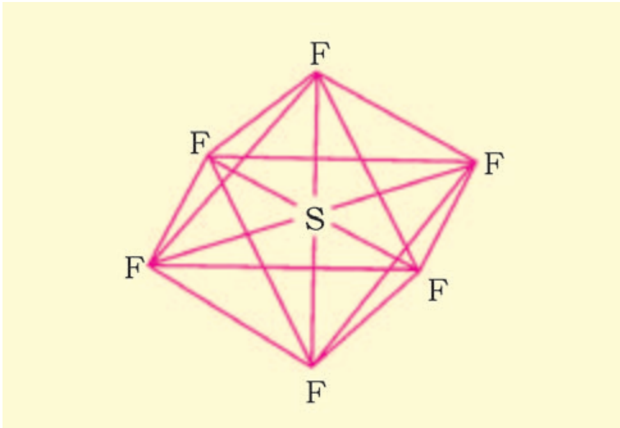
એ નોંધવું જોઈશે કે ત્રિકોણીય દ્વિપિરામિડલ ભૂમિતિના બધા ખૂણા સરખા નહિ હોય. PCl_5માં ફોસ્ફરસની પાંચ sp^3d કક્ષકો ક્લોરિનની એકાકી ઇલેક્ટ્રૉન ધરાવતી *p*-કક્ષકો સાથે સંમિશ્ર થશે અને પાંચ P-Cl સિગ્મા બંધ રચશે. ત્રણ P-Cl બંધ એક સમતલમાં હશે. અને એકબીજા વચ્ચે 120^oનો ખૂણો બનાવશે. આ બંધોને વિષુવવૃત્તીય (equatorial) બંધ કહે છે. બાકી રહેલા બે P-Cl બંધમાંનો એક મધ્યવર્તી સમતલની ઉપર અને બીજો મધ્યવર્તી સમતલની નીચે ગોઠવાય છે. જે સમતલ સાથે 90^o ખૂણો રચે છે. આ બંધને અક્ષીય (axial) બંધ કહે છે. અક્ષીય બંધ યુગ્મો વિષુવવૃત્તીય બંધ યુગ્મો કરતાં વધારે અપાકર્ષણ પારસ્પરિક ક્રિયા અનુભવે છે માટે અક્ષીય બંધ પ્રમાણમાં થોડા વધારે લાંબા જણાય છે. તેથી વિષુવવૃત્તીય બંધો કરતાં વધુ નબળા હોય છે. જે PCl_5 અણુને વધુ સક્રિય બનાવે છે.

(ii) SF_6 (sp^3d^2 સંકરણ)ની રચના :

SF_6માં મધ્યસ્થ સલ્ફર પરમાણુને ધરા અવસ્થામાં બાહ્ય ઇલેક્ટ્રૉનીય રચના $3s^23p^4$ હોય છે. ઉત્તેજિત અવસ્થામાં પ્રાપ્ય છ કક્ષકો એટલે કે એક *s*, ત્રણ *p* અને બે *d* કક્ષકો એક જ ઇલેક્ટ્રૉનથી ભરાયેલી હોય છે. આ કક્ષકો સંકરણ પામે છે અને છ નવી sp^3d^2 સંકૃત કક્ષકો રચે છે. જે નિયમિત અષ્ટફલકના છ ખૂણાઓ તરફ પ્રક્ષેપિત હોય છે. આ છ sp^3d^2 સંકૃત કક્ષકો ફ્લોરિન પરમાણુની એક ઇલેક્ટ્રૉન ધરાવતી કક્ષક સાથે સંમિશ્રણ કરે છે અને છ S-F સિગ્મા બંધ રચે છે. આથી SF_6 અણુને નિયમિત અષ્ટફલકીય ભૂમિતિ આકૃતિ 4.18માં દર્શાવ્યા પ્રમાણે હોય છે.



sp^3d^2 સંકરણ



આકૃતિ 4.18 SF_6 અણુની અષ્ટફલકીય ભૂમિતિ

4.7 આણ્વીયકક્ષકવાદ (Molecular Orbital Theory)

આણ્વીય કક્ષક (MO) વાદ 1932માં એફ. હુન્ડ (F. Hund) અને આર. એસ. મુલિકેને (R. S. Mulliken) વિકસાવેલો. આ વાદની વિશિષ્ટ બાબતો આ પ્રમાણે છે :

(i) પરમાણુઓના ઇલેક્ટ્રૉન જેમ જુદી જુદી પરમાણ્વીય કક્ષકોમાં રહેલા હોય છે તેમ અણુમાં રહેલા ઇલેક્ટ્રૉન જુદી જુદી આણ્વીય કક્ષકોમાં રહેલા હોય છે.

(ii) તુલનાત્મક (લગભગ સરખી) ઊર્જા અને યોગ્ય સમમિતિ ધરાવતી પરમાણ્વીય કક્ષકો સંયોજાય છે અને આણ્વીય કક્ષકો રચે છે.

(iii) જ્યારે પરમાણ્વીય કક્ષકમાંનો ઇલેક્ટ્રૉન એક કેન્દ્રથી અસર પામે છે તેમ આણ્વીય કક્ષક બે કે વધારે કેન્દ્રો જે અણુમાંના પરમાણુઓની સંખ્યા પર આધાર

રાખે છે તેનાથી અસર પામે છે. આમ પરમાણ્વીય કક્ષક એકકેન્દ્રી હોય છે, જ્યારે આણ્વીય કક્ષક બહુકેન્દ્રી હોય છે.

(iv) રચાયેલી આણ્વીય કક્ષકોની સંખ્યા અને સંયોજાતી પરમાણ્વીય કક્ષકોની સંખ્યા સરખી હોય છે. જ્યારે બે પરમાણ્વીય કક્ષકો સંયોજાય છે ત્યારે બે આણ્વીય કક્ષકો રચાય છે. એકને **બંધકારક આણ્વીય કક્ષક** અને બીજીને **બંધપ્રતિકારક આણ્વીય કક્ષક** કહે છે.

(v) બંધકારક આણ્વીય કક્ષકની ઊર્જા હંમેશાં બંધપ્રતિકારક આણ્વીય કક્ષક કરતાં ઓછી હોય છે. તેથી તેની સ્થાયીતા વધારે હોય છે.

(vi) જેમ પરમાણુમાં કેન્દ્રની આસપાસ ઇલેક્ટ્રૉન સંભાવ્યતા વહેંચણી પરમાણ્વીય કક્ષક વડે દર્શાવાય છે. તેમ આણ્વીય કક્ષક પાસે અણુમાંના કેન્દ્રના સમૂહની આસપાસ ઇલેક્ટ્રૉન સંભાવ્યતા વહેંચણી આણ્વીય કક્ષક વડે દર્શાવાય છે.

(vii) પરમાણ્વીય કક્ષકોની જેમ આણ્વીય કક્ષકો પણ આઉફબાઉ સિદ્ધાંત અને પૌલીનો નિષેધ સિદ્ધાંત તથા હુન્ડના નિયમને પાળે છે.

4.7.1 આણ્વીય કક્ષકોની રચના : પરમાણ્વીય કક્ષકોનું રૈખિક સંગઠન (Formation of Molecular Orbitals : Linear Combination of Atomic Orbitals : LCAO)

તરંગ યંત્રશાસ્ત્ર પ્રમાણે પરમાણ્વીય કક્ષકોને તરંગ વિધેય (ψ) તરીકે દર્શાવી શકાય. જે ઇલેક્ટ્રૉન તરંગનો કંપવિસ્તાર (amplitude) રજૂ કરે છે. શ્રોડિંજરના તરંગ સમીકરણના ઉકેલ પરથી આ મેળવી શકાય છે. શ્રોડિંજર સમીકરણ એક કરતાં વધારે ઇલેક્ટ્રૉન ધરાવતી પ્રણાલી માટે ઉકેલી શકાતું નથી. આણ્વીય કક્ષકો જેઓ અણુઓ માટે એક ઇલેક્ટ્રૉન આણ્વીય કક્ષકો છે તેમને શ્રોડિંજરના સમીકરણના સીધા ઉકેલથી મેળવવું મુશ્કેલ છે. આ સમસ્યાને ઉપરવટ થવા માટે લગભગ (આશરા પડતી) (approximate) પદ્ધતિ હોય છે. જે **પરમાણ્વીય કક્ષકોનું રૈખિક સંગઠન** (LCAO) તરીકે ઓળખાય છે.

આપણે સમકેન્દ્રીય દ્વિપરમાણ્વીય હાઇડ્રોજન અણુને આ પદ્ધતિ લાગુ પાડીએ. હાઇડ્રોજન અણુને બે A અને B પરમાણુઓ ધરાવતો અણુ ગણીએ. દરેક હાઇડ્રોજન પરમાણુને તેની ધરા અવસ્થામાં એક ઇલેક્ટ્રૉન હોય છે. આ પરમાણુઓની પરમાણ્વીય કક્ષકોને તરંગ વિધેય ψ_A અને ψ_B તરીકે દર્શાવીએ. ગાણિતીય રીતે આણ્વીય કક્ષકોની રચના પરમાણ્વીય કક્ષકોના રૈખિક સંગઠનથી રચાતી વર્ણવી શકાય, જે વ્યક્તિગત પરમાણ્વીય કક્ષકોના તરંગ વિધેયના સરવાળા કે બાદબાકી દ્વારા વર્ણવી શકાય. આ નીચે દર્શાવેલ છે :

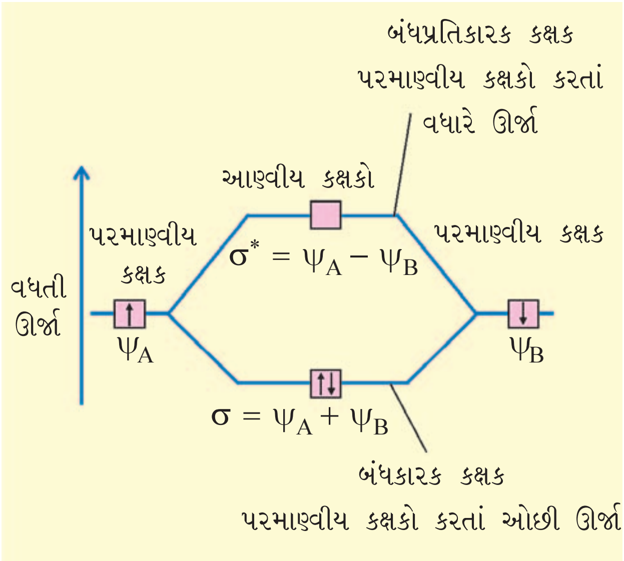
$$\psi_{MO} = \psi_A \pm \psi_B$$

આથી બે આણ્વીય કક્ષકો σ અને σ^* રચાશે.

$$\sigma = \psi_A + \psi_B$$

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

પરમાણ્વીય કક્ષકોના સરવાળાથી મળેલી આણ્વીય કક્ષકો σને **બંધકારક આણ્વીય કક્ષકો** કહે છે, જ્યારે પરમાણ્વીય કક્ષકોની બાદબાકીથી મળેલી આણ્વીય કક્ષકો σ^*ને **બંધપ્રતિકારક આણ્વીય કક્ષકો** કહે છે. આકૃતિ 4.19માં દર્શાવેલ છે.



આકૃતિ 4.19 બે પરમાણુ A અને B પર અનુક્રમે કેન્દ્રિત થયેલી પરમાણ્વીય કક્ષકો ψ_A અને ψ_Bના રૈખિક સંગઠનથી રચાતી બંધકારક (σ) અને બંધપ્રતિકારક (σ^*) આણ્વીય કક્ષકોની રચના

ગુણાત્મક રીતે, આણ્વીય કક્ષકોની રચના સંયોજાતા પરમાણુઓના ઇલેક્ટ્રૉનના રચનાત્મક (constructive) અને વિભંજક (destructive) વ્યતિકરણના પર્યાયમાં સમજી શકાય છે. બંધકારક આણ્વીય કક્ષકોની રચનામાં સંયોજાતા પરમાણુના બન્ને ઇલેક્ટ્રૉનના તરંગ એકબીજાને પ્રબલક (reinforce) બને છે.

વ્યતિકરણને લીધે રચાયેલ બંધપ્રતિકારક આણ્વીય કક્ષકોની રચનામાં ઇલેક્ટ્રૉન તરંગ એકબીજાને વિભંજક વ્યતિકરણને લીધે રદ કરે છે. આને પરિણામે બંધકારક આણ્વીય કક્ષકમાં ઇલેક્ટ્રૉન ઘનતા બંધન પામેલા પરમાણુઓના કેન્દ્રની વચ્ચે સ્થાન પામે છે. કારણ કે કેન્દ્રો વચ્ચે અપાકર્ષણ ઘણું ઓછું હોય છે. બંધપ્રતિકારક આણ્વીય કક્ષકોમાં બન્ને કેન્દ્રોની વચ્ચેની જગ્યાએથી મુખ્યત્વે ઇલેક્ટ્રૉન ઘનતા દૂર સ્થાન પામે છે. હકીકતમાં નોડલ સમતલ જેના પર ઇલેક્ટ્રૉન ઘનતા શૂન્ય છે, બન્ને કેન્દ્રોની વચ્ચે હોય છે. આથી કેન્દ્રો વચ્ચે અપાકર્ષણ વધારે હોય છે. બંધકારક આણ્વીય કક્ષકમાં ગોઠવાયેલા ઇલેક્ટ્રૉન કેન્દ્રમાં એકબીજાની સાથે ગોઠવાયેલા રહે છે અને અણુને સ્થાયી બનાવે છે. આથી જ બંધકારક આણ્વીય કક્ષક હંમેશાં તેમની રચનામાં જોડાયેલી પરમાણ્વીય કક્ષકો કરતાં ઓછી ઊર્જા ધરાવે છે. આના વિરુદ્ધમાં બંધ પ્રતિકારક આણ્વીય કક્ષકો અણુને અસ્થાયી બનાવે છે. આનું કારણ આ કક્ષકોમાં ઇલેક્ટ્રૉનનું પરસ્પર અપાકર્ષણ કેન્દ્ર અને ઇલેક્ટ્રૉન વચ્ચેના આકર્ષણ કરતાં વધારે હોય છે જે ઊર્જામાં વધારો કરે છે.

એ નોંધવું જોઈએ કે બંધપ્રતિકારક કક્ષકોની ઊર્જા મૂળ પરમાણ્વીય કક્ષકો કરતાં વધુ હોય છે, જ્યારે બંધકારક આણ્વીય કક્ષકોમાં મૂળ પરમાણ્વીય કક્ષકો કરતાં ઓછી હોય છે. બન્ને આણ્વીય કક્ષકોની કુલ ઊર્જા બે મૂળ પરમાણ્વીય કક્ષકોની કુલ ઊર્જા જેટલી સરખી રહે છે.

4.7.2 પરમાણ્વીય કક્ષકોના સંગઠન માટેની શરતો (Conditions for the Combination of Atomic Orbitals)

પરમાણ્વીય કક્ષકોનું આણ્વીય કક્ષકોની રચનામાં રૈખિક સંગઠન નીચેની શરતો સંતોષાય તો જ શક્ય બને છે.

(1) સંયોજાતી પરમાણ્વીય કક્ષકોની સરખી અથવા લગભગ સરખી ઊર્જા હોવી જોઈએ. આનો અર્થ એમ છે કે $1s$ કક્ષક બીજી $1s$ કક્ષક સાથે સંયાજાશે અને $2s$ કક્ષક સાથે નહિ કારણ કે $2s$ કક્ષકની ઊર્જા $1s$ કક્ષકની ઊર્જા કરતાં નોંધપાત્ર રીતે વધારે છે. જો પરમાણુઓ જુદા-જુદા હોય તો આ સાચું નથી.

(2) સંયોજાતી પરમાણ્વીય કક્ષકો આણ્વીય અક્ષ પર સરખી રીતે સમમિત હોવી જોઈએ. પ્રણાલિકા પ્રમાણે Z-અક્ષને આણ્વીય અક્ષ તરીકે લેવાય છે. એ નોંધવું જરૂરી છે કે પરમાણ્વીય કક્ષકો જેમની ઊર્જા તથા તેમની સમમિતિ સરખી નહિ હોય તો તેઓ સંયોજાઈ શકશે નહિ. ઉદાહરણ તરીકે, એક પરમાણુની $2p_z$ કક્ષક બીજા પરમાણુની $2p_z$ કક્ષક સાથે સંયોજાશે. પણ $2p_x$ અથવા $2p_y$ કક્ષક સાથે નહિ કારણ કે વધુમાં વધુ સંમિશ્રણ થવું જોઈએ.

(3) સંયોજાતી પરમાણ્વીય કક્ષકોનું મહત્તમ માત્રામાં સંમિશ્રણ થવું જોઈએ : સંમિશ્રણની માત્રા વધારે તો આણ્વીય કક્ષકોના કેન્દ્રો વચ્ચે ઇલેક્ટ્રૉન ઘનતા વધારે થશે.

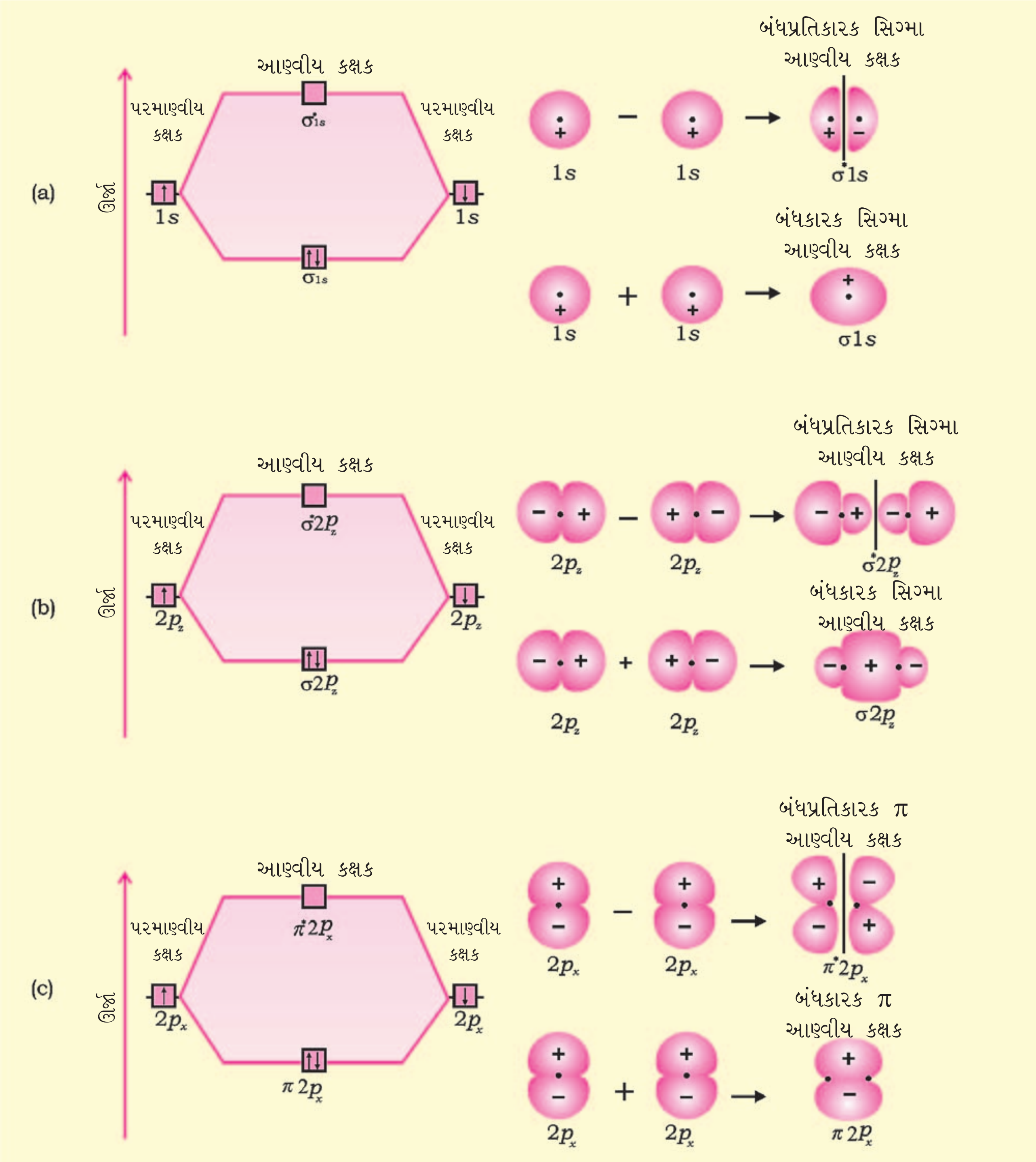
4.7.3 આણ્વીય કક્ષકોના પ્રકાર (Types of Molecular Orbitals)

દ્વિપરમાણ્વીય અણુની આણ્વીય કક્ષકો σ (સિગ્મા), π (પાઈ), δ (ડેલ્ટા) તરીકે ચિહ્નિત કરવામાં આવે છે. **આ નામકરણમાં સિગ્મા (σ) આણ્વીય કક્ષકો બંધ અક્ષની આસપાસ સમમિત હોય છે. જ્યારે પાઈ (π) કક્ષકો સમમિત હોતી નથી.** ઉદાહરણ તરીકે, $1s$ કક્ષકો બે કેન્દ્રો પર કેન્દ્રિત થયેલી હોય તેમનું રૈખિક સંગઠન બે આણ્વીય કક્ષકો રચે છે, જે બંધ અક્ષની આસપાસ સમમિત હોય છે. આવી આણ્વીય કક્ષકો σ પ્રકારની છે અને તેમને $\sigma 1s$ અને $\sigma^* 1s$ તરીકે ચિહ્નિત કરવામાં આવે છે (આકૃતિ 4.20(a)). **જો આંતરકેન્દ્રિય ધરી Z-દિશામાં લેવામાં આવે તો તે બે પરમાણુની $2p_z$ કક્ષકો સાથે રૈખિક સંગઠનથી બે સિગ્મા આણ્વીય કક્ષકો ઉદ્ભવશે જેમને $\sigma 2p_z$ અને $\sigma^* 2p_z$ તરીકે ચિહ્નિત કરવામાં આવે છે.**

$2p_x$ અને $2p_y$ કક્ષકોમાંથી મળેલ આણ્વીય કક્ષકો બંધ અક્ષને સમમિત હોતી નથી. કારણ કે આણ્વીય સમતલને ઉપર ધન પિંડક અને નીચે ઋણ પિંડક હોય છે. આવી આણ્વીય કક્ષકોને π અને π^* તરીકે ચિહ્નિત કરવામાં આવે છે. બંધકારક π આણ્વીય કક્ષકો આંતરકેન્દ્રિય અક્ષને ઉપર અને નીચે વધારે ઇલેક્ટ્રૉન ઘનતા હોય છે. π^* બંધપ્રતિકારક આણ્વીય કક્ષકને કેન્દ્રો વચ્ચે નોડ હોય છે.

4.7.4 આણ્વીય કક્ષકોના શક્તિસ્તર આલેખ (Energy Level Diagram for Molecular Orbitals)

આપણે જોયું કે બે પરમાણુઓની $1s$ પરમાણ્વીય કક્ષકો બે આણ્વીય કક્ષકો રચે છે. જેમને $\sigma 1s$ અને $\sigma^* 1s$ તરીકે ચિહ્નિત કરાય છે. આ જ પ્રમાણે $2s$ અને $2p$ પરમાણ્વીય



આકૃતિ 4.20 (a) પરમાણ્વીય કક્ષકો (b) $2p_z$ પરમાણ્વીય કક્ષકો અને (c) $2p_x$ પરમાણ્વીય કક્ષકોના સંગઠનથી રચાયેલી બંધકારક અને બંધપ્રતિકારક આણ્વીય કક્ષકોની રૂપરેખા (contour) અને ઊર્જા

કક્ષકો (બન્ને પરમાણુ પરની આઠ પરમાણ્વીય કક્ષકો) નીચેની આઠ આણ્વીય કક્ષકો રચે છે :

બંધપ્રતિકારક આણ્વીય કક્ષકો : σ^*2s σ^*2p_z π^*2p_x π^*2p_y

બંધકારક આણ્વીય કક્ષકો : $\sigma2s$ $\sigma2p_z$ $\pi2p_x$ $\pi2p_y$

આવર્ત કોષ્ટકના બીજા આવર્તના તત્ત્વોના સમકેન્દ્રીય દ્વિઅણુઓ માટે વર્ણપટદર્શકીય માહિતીની મદદથી પ્રાયોગિક રીતે આણ્વીય કક્ષકોના ઊર્જાસ્તર નક્કી થયેલા છે. O_2 અને F_2 માટે જુદી જુદી આણ્વીય કક્ષકોની શક્તિનો વધતો ક્રમ નીચે આપેલ છે.

$\sigma 1s < \sigma^* 1s < \sigma 2s < \sigma^* 2s < \sigma 2p_z < (\pi 2p_x = \pi 2p_y)$
$< (\pi^* 2p_x = \pi^* 2p_y) < \sigma^* 2p_z$

આમ છતાં, આણ્વીય કક્ષકોમાં ઊર્જા-સ્તરોનો આ ક્રમ બાકીના અણુઓ Li_2, Be_2, B_2, C_2, N_2 વગેરે માટે સાચો નથી. ઉદાહરણ તરીકે એ પ્રાયોગિક રીતે નક્કી કરવામાં આવ્યું છે કે B_2, C_2, N_2 વગેરે જેવા અણુઓ માટે જુદી જુદી આણ્વીય કક્ષકોની શક્તિનો ક્રમ નીચે પ્રમાણે છે :

$\sigma 1s < \sigma^* 1s < \sigma 2s < \sigma^* 2s < (\pi 2p_x = \pi 2p_y) < \sigma 2p_z$
$< (\pi^* 2p_x = \pi^* 2p_y) < \sigma^* 2p_z$

આ ક્રમની અગત્યની લાક્ષણિકતા એ છે કે **$\sigma 2p_z$ આણ્વીય કક્ષકની ઊર્જા $\pi 2p_x$ અને $\pi 2p_y$ આણ્વીય કક્ષકો કરતાં વધારે છે.**

4.7.5 ઇલેક્ટ્રૉનીય રચના અને આણ્વીય વર્તણૂક (Electronic Configuration and Molecular Behaviour)

જુદી જુદી આણ્વીય કક્ષકોમાં ઇલેક્ટ્રૉનની વહેંચણીને **અણુની ઇલેક્ટ્રૉનીય રચના** કહે છે. અણુની ઇલેક્ટ્રૉનીય રચના પરથી અણુ વિશેની અગત્યની માહિતી મેળવી શકાય છે. જેની ચર્ચા નીચે કરી છે.

અણુની સ્થાયીતા : જો N_b બંધકારક કક્ષકોમાં રહેલા ઇલેક્ટ્રૉનની સંખ્યા હોય અને N_a બંધપ્રતિકારક કક્ષકોમાં રહેલા ઇલેક્ટ્રૉનની સંખ્યા હોય તો

(i) જો N_b સંખ્યા N_a સંખ્યા કરતાં વધારે હોય તો અણુ સ્થાયી હોય છે.

(ii) જો N_b સંખ્યા N_a સંખ્યા કરતાં ઓછી હોય તો અણુ અસ્થાયી હોય છે.

જો (i) વધારે બંધકારક કક્ષકો ભરાયેલી હોય અને તેથી બંધન અસર વધારે પ્રબળ હોય છે અને સ્થાયી અણુ પરિણમે છે. (ii)માં બંધપ્રતિકારક કક્ષકોની અસર વધારે પ્રબળ હોય છે અને તેથી અણુ અસ્થાયી હોય છે.

બંધક્રમાંક :

બંધકારક અને બંધપ્રતિકારક કક્ષકોમાં હાજર ઇલેક્ટ્રૉનની સંખ્યાના તફાવતના અડધાને બંધક્રમાંક (b.o.) તરીકે વ્યાખ્યાયિત કરેલ છે.

બંધક્રમાંક (b.o.) $= \frac{1}{2}(N_b - N_a)$

અણુની સ્થાયીતા માટે ઉપર ચર્ચા કરી તે નિયમોને બંધક્રમાંકના પર્યાયમાં ફરીથી નિવેદિત કરી શકાય.

ધન બંધક્રમાંક (એટલે કે $N_b > N_a$)નો અર્થ કે અણુ સ્થાયી છે અને ઋણ બંધક્રમાંક ($N_b < N_a$)નો અર્થ કે અણુ અસ્થાયી છે. આ ઉપરાંત તફાવત શૂન્ય ($N_b = N_a$) થાય તો બંધક્રમાંક શૂન્ય થશે. જેનો અર્થ છે કે અણુ અસ્થાયી છે.

બંધનો સ્વભાવ (પ્રકૃતિ) :

સંકલિત બંધક્રમાંકના મૂલ્યો 1, 2 અથવા 3 ચિરસંમત ખ્યાલમાં શીખ્યા તે પ્રમાણે એકલ બંધ, દ્વિબંધ અથવા ત્રિબંધને અનુરૂપ હોય છે.

બંધલંબાઈ :

બે પરમાણુઓ વચ્ચેનો અણુમાંનો બંધક્રમાંક, બંધલંબાઈનું આશરે માપ લઈ શકાય. બંધક્રમાંક જેમ વધે તેમ બંધલંબાઈ ઘટે.

ચુંબકીય સ્વભાવ (પ્રકૃતિ) :

જો અણુમાંની બધી જ આણ્વીય કક્ષકો દ્વિભરાયેલ (doubly occupied) (એટલે કે બધી જ કક્ષકોમાં બે ઇલેક્ટ્રૉન) હોય તો પદાર્થ પ્રતિચુંબકીય હશે (ચુંબકીય ક્ષેત્ર વડે અપાકર્ષિત થશે). જો એક અથવા વધારે આણ્વીય કક્ષક એકાકી-ભરાયેલ (singly occupied) (એટલે કે એક એક ઇલેક્ટ્રૉન હોય) તે અનુચુંબકીય (ચુંબકીય ક્ષેત્રથી આકર્ષિત હોય છે). દા.ત., O_2 અણુ.

4.8 કેટલાક સમકેન્દ્રીય દ્વિપરમાણ્વીય અણુઓમાં બંધન (Bonding in Some Homo-nuclear Diatomic Molecules)

(1) હાઇડ્રોજન અણુ (H_2) : તે હાઇડ્રોજનના બે પરમાણુના સંગઠનથી રચાય છે. દરેક હાઇડ્રોજન પરમાણુને $1s$ કક્ષકમાં એક ઇલેક્ટ્રૉન હોય છે. આથી હાઇડ્રોજન અણુમાં બે ઇલેક્ટ્રૉન હોય છે. જે $\sigma 1s$ આણ્વીય કક્ષકમાં હાજર હોય છે. આથી હાઇડ્રોજન અણુની ઇલેક્ટ્રૉનીય રચના

$H_2 : (\sigma 1s)^2$

H_2 અણુનો બંધક્રમાંક નીચે આપ્યા પ્રમાણે ગણી શકાય.

બંધક્રમાંક $= \frac{N_b - N_a}{2} = \frac{2-0}{2} = 1$

આનો અર્થ એમ થાય કે બે હાઇડ્રોજન પરમાણુ એકબીજા સાથે એકલબંધથી જોડાયેલ છે. હાઇડ્રોજન અણુની બંધ વિયોજન ઊર્જા 438 kJ mol^{-1} પ્રાપ્ત થઈ છે અને બંધલંબાઈ 74 pm છે. હાઇડ્રોજન અણુમાં એક પણ ઇલેક્ટ્રૉન અયુગ્મિત નથી માટે તે પ્રતિચુંબકીય છે.

(2) હિલિયમ અણુ (He_2) : હિલિયમ પરમાણુની ઈલેક્ટ્રૉનીય રચના $1s^2$ છે. દરેક હિલિયમ પરમાણુ બે ઈલેક્ટ્રૉન ધરાવે છે. આથી He_2 માં કુલ ચાર ઈલેક્ટ્રૉન હશે. આ ઈલેક્ટ્રૉન $\sigma 1s$ અને $\sigma^* 1s$ આણ્વીય કક્ષકોમાં ગોઠવાશે. જેને લીધે ઈલેક્ટ્રૉનીય રચના થશે.

$He_2 : (\sigma 1s)^2(\sigma^* 1s)^2$

He_2નો બંધક્રમાંક છે $\frac{2-2}{2} = 0$

આથી He_2 અણુ અસ્થાયી છે અને તે અસ્તિત્વ ધરાવી શકશે નહિ.

આ જ પ્રમાણે દર્શાવી શકાય કે Be_2 અણુ $(\sigma 1s)^2(\sigma^* 1s)^2 (\sigma 2s)^2(\sigma^* 2s)^2$ પણ અસ્તિત્વ ધરાવશે નહિ.

(3) લિથિયમ અણુ (Li_2) : લિથિયમની ઈલેક્ટ્રૉનીય રચના છે $1s^2 2s^1$. આથી Li_2 માં છ ઈલેક્ટ્રૉન છે. Li_2ની ઈલેક્ટ્રૉનીય રચના આથી લખી શકાય કે,

$Li_2 : (\sigma 1s)^2(\sigma^* 1s)^2(\sigma 2s)^2$

ઉપરની રચના $KK(\sigma 2s)^2$ તરીકે લખી શકાય. જ્યાં KK બંધ (closed) કોશ દર્શાવે છે, જેની રચના છે $(\sigma 1s)^2(\sigma^* 1s)^2$.

Li_2ની ઈલેક્ટ્રૉનીય રચના પરથી સ્પષ્ટ થાય છે કે ચાર ઈલેક્ટ્રૉન બંધકારક કક્ષકોમાં ગોઠવાયેલ છે અને બે ઈલેક્ટ્રૉન બંધ પ્રતિકારક કક્ષકમાં ગોઠવાયેલા છે.

તેનો બંધક્રમાંક $\frac{4-2}{2} = 1$ છે.

આનો અર્થ એમ થાય છે કે Li_2 અણુ સ્થાયી છે. તેની પાસે અયુગ્મિત ઈલેક્ટ્રૉન નથી માટે તે પ્રતિચુંબકીય છે. Li_2 અણુઓ બાષ્પ અવસ્થામાં અસ્તિત્વ ધરાવે છે તેવી જાણકારી છે.

(4) કાર્બન અણુ (C_2) : કાર્બન પરમાણુની ઈલેક્ટ્રૉનીય રચના છે $1s^2 2s^2 2p^2$. તેથી C_2 અણુમાં બાર ઈલેક્ટ્રૉન છે. C_2 અણુની ઈલેક્ટ્રૉનીય રચના થશે :

$C_2 : (\sigma 1s)^2(\sigma^* 1s)^2(\sigma 2s)^2(\sigma^* 2s)^2(\pi 2p_x^2 = \pi 2p_y^2)$

અથવા $KK(\sigma 2s)^2(\sigma^* 2s)^2(\pi 2p_x^2 = \pi 2p_y^2)$

C_2 અણુનો બંધક્રમાંક $\frac{8-4}{2} = 2$ થશે અને

C_2 પ્રતિચુંબકીય હોવો જોઈએ. પ્રતિચુંબકીય C_2 અણુની ખરેખર બાષ્પ અવસ્થામાં પરખ થયેલ છે. એ નોંધવું અગત્યનું છે કે C_2માં બંને દ્વિબંધ π બંધ છે કારણ કે ચાર ઈલેક્ટ્રૉન બે π આણ્વીય કક્ષકોમાં રહેલા છે. બીજા ઘણા અણુઓના દ્વિબંધ સિગ્મા બંધ અને પાઈ બંધનો બનેલો હોય છે. આ જ રીતે N_2 અણુની ઈલેક્ટ્રૉનીય રચના ચર્ચી શકાય.

(5) ઑક્સિજન અણુ (O_2) : ઑક્સિજન પરમાણુની ઈલેક્ટ્રૉનીય રચના $1s^2 2s^2 2p^4$ છે. દરેક ઑક્સિજન પરમાણુ પાસે આઠ ઈલેક્ટ્રૉન છે. માટે O_2 અણુમાં સોળ (16) ઈલેક્ટ્રૉન હાજર હશે. આથી O_2 અણુની ઈલેક્ટ્રૉનીય રચના લખી શકાય :

$$O_2 : (\sigma 1s)^2(\sigma^* 1s)^2(\sigma 2s)^2(\sigma^* 2s)^2(\sigma^* 2p_z)^2$$
$$(\pi 2p_x^2 \equiv \pi 2p_y^2)(\pi^* 2p_x^1 \equiv \pi^* 2p_y^1) \text{ અથવા}$$

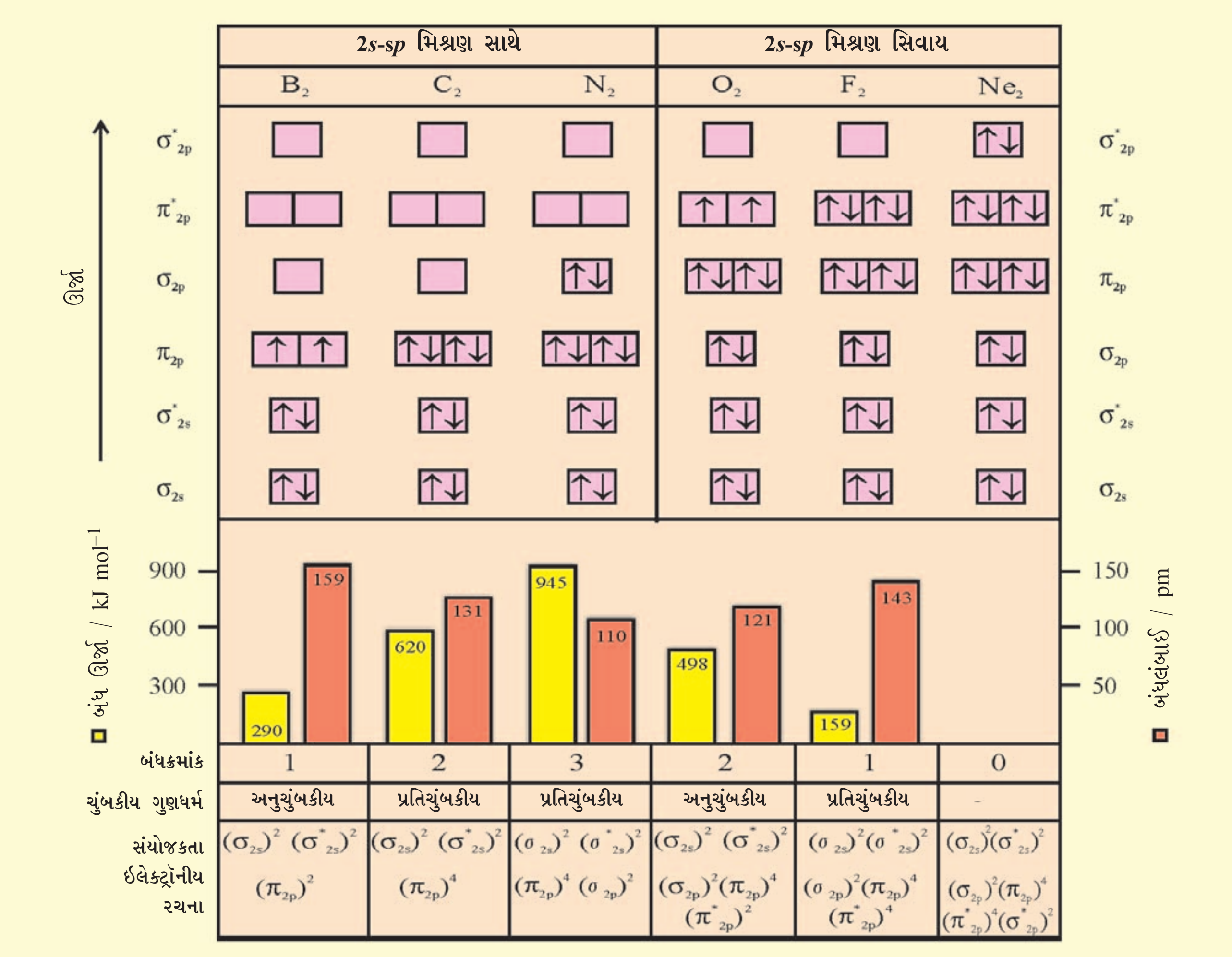
$$O_2 : \begin{bmatrix} KK(\sigma 2s)^2(\sigma^* 2s)^2(\sigma^* 2p_z)^2 \\ (\pi 2p_x^2 \equiv \pi 2p_y^2),\ (\pi^* 2p_x^1 \equiv \pi^* 2p_y^1) \end{bmatrix}$$

O_2ની ઈલેક્ટ્રૉનીય રચનામાંથી એ સ્પષ્ટ થાય છે કે દસ ઈલેક્ટ્રૉન બંધકારક આણ્વીય કક્ષકોમાં અને છ ઈલેક્ટ્રૉન બંધપ્રતિકારક આણ્વીય કક્ષકોમાં છે માટે તેનો બંધક્રમાંક થશે :

$$\text{બંધક્રમાંક} = \frac{1}{2}[N_b - N_a] = \frac{1}{2}[10 - 6] = 2$$

તેથી ઑક્સિજન અણુમાં બે ઑક્સિજન પરમાણુઓ દ્વિબંધથી સંયોજાયેલા છે. તે ઉપરાંત એ પણ નોંધી શકાય કે બે અયુગ્મિત ઈલેક્ટ્રૉન $\pi^* 2p_x$ અને $\pi^* 2p_y$ આણ્વીય કક્ષકોમાં છે. આથી **O_2 અણુ અનુચુંબકીય હોવો જોઈએ. આ પ્રાક્કથન પ્રાયોગિક અવલોકનોને અનુરૂપ છે.** આ પ્રમાણે આણ્વીય કક્ષક વાદ ઑક્સિજન અણુનો અનુચુંબકીય સ્વભાવ સફળતાપૂર્વક સમજાવે છે.

આ જ પ્રમાણે આવર્તકોષ્ટકના બીજા આવર્તના બાકીના તત્ત્વોના સમકેન્દ્રીય દ્વિપરમાણ્વીય અણુઓની ઈલેક્ટ્રૉનીય રચના દર્શાવી શકાય. આકૃતિ 4.21માં B_2થી Ne_2 સુધીના અણુઓની આણ્વીય કક્ષકોમાં ઈલેક્ટ્રૉનની ગોઠવણી અને આણ્વીય ગુણધર્મો આપવામાં આવ્યા છે. આણ્વીય કક્ષકોનો ક્રમ અને તેમની ઈલેક્ટ્રૉન સમષ્ટિ (population) દર્શાવેલ છે. આણ્વીય કક્ષક આરેખની નીચે બંધ ઊર્જા, બંધલંબાઈ, ચુંબકીય ગુણધર્મ અને સંયોજકતા ઈલેક્ટ્રૉનીય રચના દર્શાવેલ છે.



આકૃતિ 4.21 B_2થી Ne_2 સુધીના અણુઓની આણ્વીય કક્ષકો (MO) ગોઠવણી અને આણ્વીય ગુણધર્મો

4.9 હાઇડ્રોજન બંધન (Hydrogen Bonding)

નાઇટ્રોજન, ઑક્સિજન અને ફ્લોરિન ઊંચા વિદ્યુત-ઋણમય તત્ત્વો છે. જ્યારે તેઓ હાઇડ્રૉજન પરમાણુ સાથે સહસંયોજક બંધ રચે છે ત્યારે સહસંયોજક બંધના ઇલેક્ટ્રૉન વધુ વિદ્યુતઋણમય પરમાણુ તરફ ખસે છે. અંશતઃ ધનભારિત હાઇડ્રોજન પરમાણુ બીજા વધુ વિદ્યુતઋણમય તત્ત્વ સાથે બંધ રચે છે. આ બંધને હાઇડ્રોજન બંધ કહે છે અને તે સહસંયોજક બંધ કરતાં વધુ નિર્બળ હોય છે. ઉદાહરણ તરીકે HF અણુમાં હાઇડ્રોજન બંધ એક અણુના હાઇડ્રોજન પરમાણુ અને બીજા અણુનો ફ્લોરિન પરમાણુ વચ્ચે અસ્તિત્વ ધરાવે છે, જે નીચે પ્રમાણે દર્શાવી શકાય :

$$---H^{\delta+}-F^{\delta-}---H^{\delta+}-F^{\delta-}---H^{\delta+}-F^{\delta-}$$

અહીંયા હાઇડ્રોજન બંધ બે પરમાણુ વચ્ચે એક સેતુ તરીકે વર્તે છે જે સહસંયોજક બંધનો એક પરમાણુ અને બીજો પરમાણુ હાઇડ્રોજન બંધ ધરાવે છે. હાઇડ્રોજન બંધ ટપકાં ટપકાંવાળી (– – –) ત્રૂટક રેખા વડે દર્શાવાય છે, જ્યારે સળંગ રેખા સહસંયોજક બંધ દર્શાવે છે. **હાઇડ્રોજન બંધની વ્યાખ્યા આપી શકાય કે તે એ આકર્ષણ બળો છે જે એક અણુના હાઇડ્રોજન પરમાણુને વિદ્યુતઋણમય પરમાણુ (F, O અથવા N)ની સાથે બાંધી રાખે છે.**

4.9.1 હાઇડ્રોજન બંધની રચનાનું કારણ (Cause of Formation of Hydrogen Bond)

જ્યારે હાઇડ્રોજન પ્રબળ વિદ્યુતઋણમય તત્ત્વ 'X' સાથે બંધન પામે છે ત્યારે બે પરમાણુઓ વચ્ચે ભાગીદાર થયેલ ઇલેક્ટ્રૉન યુગ્મ હાઇડ્રોજનથી દૂર ખસે છે. આને પરિણામે હાઇડ્રોજન પરમાણુ બીજા 'X'ની સરખામણીમાં વધુ વિદ્યુતધનમય બને છે. ઇલેક્ટ્રૉન યુગ્મનું X તરફનું વિસ્થાપન (displacement) થતું હોવાથી તે આંશિક ધન ભાર (δ^+) પ્રાપ્ત કરે છે, જ્યારે X આંશિક ઋણભાર પ્રાપ્ત કરે છે (δ^-). આને

પરિણામે સ્થિર વિદ્યુતીય આકર્ષણ બળ ધરાવતા ધ્રુવીય અણુ રચાય છે જેને આ રીતે રજૂ કરી શકાય.

$$H^{\delta+} - X^{\delta-} --- H^{\delta+} - X^{\delta-} --- H^{\delta+} - X^{\delta-}$$

હાઇડ્રોજન બંધની માત્રા સંયોજનની ભૌતિક અવસ્થા પર આધાર રાખે છે. ઘન અવસ્થામાં તે મહત્તમ હોય છે અને વાયુમય અવસ્થામાં નિમ્નતમ હોય છે. આમ હાઇડ્રોજન બંધની સંયોજનની રચના અને ગુણધર્મો પર પ્રબળ અસર હોય છે.

4.9.2 H-બંધના પ્રકારો (Types of H-bonds)

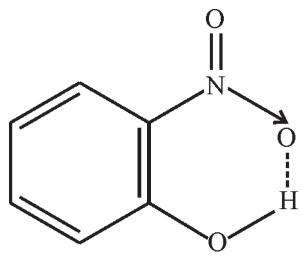
બે પ્રકારના H-બંધ હોય છે :

(i) આંતરઆણ્વીય હાઇડ્રોજન બંધ

(ii) આંતઃઆણ્વીય હાઇડ્રોજન બંધ

(i) આંતરઆણ્વીય હાઇડ્રોજન બંધ : એક જ અથવા અલગ અલગ સંયોજનોના બે જુદા જુદા અણુઓ વચ્ચે આ બંધ રચાય છે. ઉદાહરણ તરીકે HF, આલ્કોહોલ કે પાણીના અણુના કિસ્સામાંનો બંધ.

(ii) આંતઃઆણ્વીય હાઇડ્રોજન બંધ : તે એક જ અણુમાં રહેલા બે વધુ વિદ્યુતઋણમય (F, O, N) પરમાણુઓ વચ્ચે રચાયેલો હાઇડ્રોજન બંધ છે. ઉદાહરણ તરીકે o-નાઇટ્રોફિનોલમાં હાઇડ્રોજન બંધ બે ઑક્સિજન પરમાણુઓ વચ્ચે હોય છે.



આકૃતિ 4.22 o-નાઇટ્રોફિનોલ અણુમાં આંતઃઆણ્વીય હાઇડ્રોજન બંધ

સારાંશ

કોસેલે સૌપ્રથમ વિદ્યુતધનમય અને વિદ્યુતઋણમય આયનો જે અનુક્રમે પાછળ આવતા ઉમદા વાયુની રચના પ્રાપ્ત કરવા માટે રચાય છે તેની સમજણ આપી. આયનો વચ્ચે સ્થિર વિદ્યુતીય આકર્ષણ તેમની સ્થાયીતાનું કારણ છે તેમ જણાવ્યું. આ **વિદ્યુતસંયોજકતા**નો ખ્યાલ આપે છે.

સહસંયોજક બંધનનું પ્રથમ વર્ણન લુઇસે કરેલું, જેમાં તેમણે પરમાણુઓ વચ્ચે ઇલેક્ટ્રૉન યુગ્મની ભાગીદારીના અર્થમાં સમજાવી. ઉમદા વાયુની ઇલેક્ટ્રૉનીય રચનાની પ્રાપ્તિ વિશે પણ જણાવ્યું. લુઇસની બિંદુ સંજ્ઞા આપેલ તત્ત્વમાંના પરમાણુઓના સંયોજકતા ઇલેક્ટ્રૉન દર્શાવે છે અને લુઇસ બિંદુ રચના અણુઓના બંધનની ચિત્રાત્મક રજૂઆત છે.

આયનીય સંયોજનને ધન અને ઋણ આયનોના ત્રિપરિમાણીય સમૂહો તરીકે ચિત્રિત કર્યા, જેને સ્ફટિક લેટિસ કહેવામાં આવી. સ્ફટિકમય ઘનમાં ધન અને ઋણ આયનો વચ્ચે ભારનું સમતોલન હોય છે. સ્ફટિક લેટિસ, **લેટિસ રચનાની એન્થાલ્પી** વડે સ્થાયી થાય છે.

બે પરમાણુઓ વચ્ચે એક ઇલેક્ટ્રૉન યુગ્મની ભાગીદારીથી એકલ બંધ રચે છે. બહુ બંધ બે કે વધારે ઇલેક્ટ્રૉન યુગ્મની ભાગીદારીથી પરિણમે છે. કેટલાક બંધન પામેલા પરમાણુઓ પાસે બંધનમાં ભાગ ન લીધો હોય તેવા વધારાના ઇલેક્ટ્રૉન પણ હોય છે. આને ઇલેક્ટ્રૉનના અબંધકારક યુગ્મ (lone pair) કહે છે. લુઇસ બિંદુ રચના અણુમાં બંધકારક યુગ્મો અને અબંધકારક યુગ્મોના દરેક પરમાણુની આસપાસ રચના દર્શાવે છે. **રાસાયણિક બંધ સાથે સંકળાયેલા અગત્યના પ્રાચલ (parameters) જેવાં કે બંધ લંબાઈ, બંધ કોણ, બંધ એન્થાલ્પી, બંધક્રમાંક અને બંધ ધ્રુવીયતાની સંયોજનોના ગુણધર્મો પર નોંધપાત્ર અસર હોય છે.**

ઘણા બધા અણુઓ અને બહુપરમાણ્વીય અણુઓને એક જ લુઇસ રચનાથી ચોકસાઈપૂર્વક વર્ણવી શકાય નહિ અને તેથી સમાન માળખાંકીય (skeleton) રચના પર આધારિત ઘણા વર્ણનો (રજૂઆતો) લખવામાં આવે છે અને આ બધાને સાથે લેતાં અણુ કે આયનોને રજૂ કરી શકાય છે. એક ઘણો અગત્યનો અને ખૂબ જ ઉપયોગી ખ્યાલ છે જેને સસ્પંદન કહે છે. ફાળો આપતી રચનાઓ અથવા વિહિત (canonical) સ્વરૂપો એક સાથે લેતાં **સસ્પંદન** સંકર રચના બને છે. જે અણુ અથવા આયનની રજૂઆત કરે છે.

અણુઓના ભૌમિતિક આકારોના પ્રાક્કથન માટે વપરાતો **VSEPR નમૂનો** એ ધારણા પર રચાયેલો છે કે ઈલેક્ટ્રૉન યુગ્મ એકબીજાને અપાકર્ષે છે અને તેને પરિણામે એકબીજાથી શક્ય તેટલો દૂર રહેવા પ્રયત્ન કરે છે. આ નમૂના પ્રમાણે આણ્વીય ભૂમિતિ, આયન યુગ્મ અને અબંધકારક યુગ્મ, અબંધકારક યુગ્મ અને બંધકારક યુગ્મો, બંધકારક યુગ્મો અને બંધકારક યુગ્મોના અપાકર્ષણ બળો પરથી નક્કી કરાય છે. આ અપાકષર્ણનો ક્રમ છે lp-lp > lp-bp > bp-bp.

સહસંયોજક બંધન અંગેનો **સંયોજકતા બંધન (VB) અભિગમ** સહસંયોજક બંધની રચનામાં સંકળાયેલ ઊર્જાને પાયારૂપ ગણવામાં આવી છે. આ બાબતમાં લુઈસ અને VSEPR નમૂનાઓ મૂક (silent) છે. VB વાદના પાયામાં કક્ષકોનાં સંમિશ્રણને બંધ રચનામાં સાંકળે છે. ઉદાહરણ તરીકે બે હાઈડ્રોજન પરમાણુમાંથી એક હાઈડ્રોજન અણુની રચના બન્ને H પરમાણુઓની 1*s* કક્ષકો(જે માત્ર એક જ ઈલેક્ટ્રૉન ધરાવે છે)નું સંમિશ્રણ થાય છે.

એ જણાયું છે કે જ્યારે બંને હાઈડ્રોજન પરમાણુ એકબીજાની નજીક આવતા જાય છે ત્યારે પ્રણાલીની સ્થિતિજ ઊર્જા ઘટતી જાય છે. સમતોલન આંતરકેન્દ્રીય અંતરના બિંદુએ (બંધ અંતર) ઊર્જા ન્યૂનતમને પહોંચે છે. હજુ પણ બંને કેન્દ્રોને વધારે નજીક લાવવાનો પ્રયત્ન કરવામાં આવે તો ઊર્જામાં એકદમ વધારો થાય છે અને પરિણામે કેન્દ્રની અસ્થાયીતા વધે છે. કક્ષકીય મિશ્રણને લીધે કેન્દ્રો વચ્ચેની ઈલેક્ટ્રૉન ઘનતા વધે છે જે તેમને નજીક લાવવામાં મદદ કરે છે. એમ પણ જણાયું છે કે ખરેખર બંધ એન્થાલ્પી અને બંધ લંબાઈના મૂલ્યો સંમિશ્રણ એકલાથી મેળવી શકાતા નથી. બીજા ચલો(variables)ને ધ્યાનમાં લેવા પડે છે.

બહુપરમાણ્વીય અણુઓના લાક્ષણિક આકાર સમજાવવા માટે પાઉલિંગે **પરમાણ્વીય કક્ષકોના સંકરણનો** ખ્યાલ રજૂ કર્યો. $BeCl_2$, BCl_3, CH_4, NH_3 અને H_2O જેવા અણુઓના ભૌમિતિક આકારો અને તેમની રચનાઓને સમજાવવા માટે Be, B, C, N અને Oની પરમાણ્વીય કક્ષકોની sp, sp^2, sp^3 સંકરણનો ઉપયોગ કર્યો. C_2H_2 અને C_2H_4 જેવા અણુમાં બહુ બંધની રચના સમજાવે છે.

આણ્વીય કક્ષક (MO) વાદ પરમાણ્વીય કક્ષકોનું સંગઠન અને ગોઠવણીના લીધે આણ્વીય કક્ષકોની રચના જે એકંદરે અણુમાંનું બંધન વર્ણવે છે. આણ્વીય કક્ષકોની સંખ્યા હંમેશાં પરમાણ્વીય કક્ષકોની સંખ્યા બરાબર હોય છે. બંધકારક કક્ષકોમાં કેન્દ્રો વચ્ચે ઈલેક્ટ્રૉન ઘનતા વધારે છે. વ્યક્તિગત પરમાણ્વીય કક્ષકોની ઊર્જાના સંદર્ભમાં ઘટાડો કરે છે. બંધપ્રતિકારક કક્ષકોમાં કેન્દ્રો વચ્ચે શૂન્ય ઈલેક્ટ્રૉન ઘનતાનો વિસ્તાર (region) હોય છે અને તેથી વ્યક્તિગત પરમાણ્વીય કક્ષકો કરતાં ઊર્જા વધારે ધરાવે છે.

અણુઓની ઈલેક્ટ્રૉનીય રચના વધતી જતી ઊર્જાના ક્રમમાં આવતી આણ્વીય કક્ષકોમાં ઈલેક્ટ્રૉનની ગોઠવણીથી દર્શાવાય છે. પરમાણુઓની બાબતમાં છે તે પ્રમાણે પૌલીનો નિષેધ નિયમ, હુન્ડનો નિયમ આણ્વીય કક્ષકોમાં ઈલેક્ટ્રૉન ભરાય ત્યારે લાગુ પડે છે. જો બંધકારક આણ્વીય કક્ષકોમાંના ઈલેક્ટ્રૉનની સંખ્યા બંધપ્રતિકારક આણ્વીય કક્ષકોમાંની સંખ્યા કરતાં વધારે હોય તો અણુ સ્થાયી બને છે.

જ્યારે હાઈડ્રોજન પરમાણુઓ પોતે બે ઊંચા વિદ્યુતઋણમય પરમાણુઓ જેવાં કે F, O અને Nની વચ્ચે હોય છે ત્યારે **હાઈડ્રોજન બંધ** રચાય છે. આંતરઆણ્વીય હાઈડ્રોજન બંધ એક જ અથવા જુદા જુદા પદાર્થોના એક કે વધુ અણુઓ વચ્ચે રચાય છે, જ્યારે એક જ અણુમાં જ હાઈડ્રોજન બંધ રચાય ત્યારે તેને આંતઃઆણ્વીય હાઈડ્રોજન બંધ કહે છે. ઘણા સંયોજનોના ગુણધર્મો અને રચનાઓ પર હાઈડ્રોજન બંધની શક્તિશાળી અસર હોય છે.

સ્વાધ્યાય

4.1 રાસાયણિક બંધની રચના સમજાવો.

4.2 નીચેના તત્ત્વોના પરમાણુઓ માટે લુઈસ બિંદુ સંજ્ઞા લખો :
Mg, Na, B, O, N, Br

4.3 નીચેના પરમાણુઓ અને આયનો માટે લુઈસ સંજ્ઞા લખો :
S અને S^{2-}, Al અને Al^{3+}, H અને H^-

4.4 નીચેના અણુઓ અને આયનોની લુઈસ રચના દોરો :
H_2S, $SiCl_4$, BeF_2, CO_3^{2-}, HCOOH

4.5 અષ્ટક નિયમને વ્યાખ્યાયિત કરો. તેની અગત્ય અને મર્યાદાઓ લખો.

4.6 આયનીય બંધની રચના માટે સાનુકૂળ પરિબળો લખો.

4.7 VSEPR નમૂનાનો ઉપયોગ કરીને નીચેના અણુઓના આકારની ચર્ચા કરો.
$BeCl_2$, BCl_3, $SiCl_4$, AsF_5, H_2S, PH_3

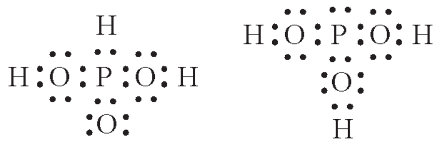
4.8 NH_3 અને H_2O અણુઓની ભૂમિતિ વિકૃત (distorted) સમચતુષ્ફલક છે. તેમ છતાં પાણીમાંનો બંધકોણ એમોનિયાના બંધકોણ કરતાં ઓછો છે. ચર્ચો.

4.9 બંધક્રમાંકના પર્યાયમાં તમે બંધ પ્રબળતા કેવી રીતે રજૂ કરો છો ?

4.10 બંધલંબાઈને વ્યાખ્યાયિત કરો.

4.11 CO_3^{2-} આયનના સંદર્ભમાં સસ્પંદનની અગત્યની બાબતો સમજાવો.

4.12 નીચે દર્શાવ્યા પ્રમાણે H_3PO_3ને રચના 1 અને રચના 2 વડે રજૂ કરી શકાય. આ બે રચનાઓને H_3PO_3ને રજૂ કરતાં સસ્પંદન સંકરના વિહિત સ્વરૂપો તરીકે લઈ શકાય ? જો ના હોય તો તેના માટેના કારણો આપો.



(1) (2)

4.13 SO_3, NO_2 અને NO_3^- ની સસ્પંદન રચનાઓ લખો.

4.14 લુઇસ સંજ્ઞાનો ઉપયોગ કરીને નીચેના પરમાણુઓ વચ્ચે ઇલેક્ટ્રૉન હેરફેર દર્શાવી ધનાયન અને ઋણાયનની રચના સમજાવો : (a) K અને S (b) Ca અને O (c) Al અને N.

4.15 CO_2 અને H_2O બન્ને ત્રિપરમાણ્વીય અણુઓ છે છતાં H_2O અણુનો આકાર વળેલો છે, જ્યારે CO_2નો આકાર રેખીય છે. દ્વિધ્રુવ ચાકમાત્રાના આધારે સમજાવો.

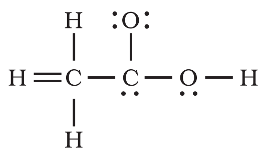
4.16 દ્વિધ્રુવ ચાકમાત્રાની અગત્ય/અનુપ્રયોગો લખો.

4.17 વિદ્યુતઋણમયતાને વ્યાખ્યાયિત કરો. તે ઇલેક્ટ્રૉન પ્રાપ્તિ એન્થાલ્પીથી કેવી રીતે અલગ પડે છે ?

4.18 યોગ્ય ઉદાહરણની મદદથી ધ્રુવીય સહસંયોજક બંધ - સમજાવો.

4.19 LiF, K_2O, N_2, SO_2 અને ClF_3 અણુઓમાં તેમના વધતી આયનીય લાક્ષણિકતાને ચઢતા (વધતા) ક્રમમાં ગોઠવો.

4.20 CH_3COOH માટે માળખાંકીય રચના નીચે દર્શાવ્યા પ્રમાણે સાચી છે, પરંતુ કેટલાક બંધ ખોટી રીતે દર્શાવ્યા છે. એસિટિક ઍસિડ માટે સાચી લુઇસ રચના લખો :



4.21 CH_4 અણુ માટે સમચતુષ્ફલક રચના ઉપરાંત બીજી સમતલીય ચોરસ રચના શક્ય છે, જેમાં ચાર H પરમાણુઓ ચોરસના ખૂણાઓ પર છે અને C પરમાણુ કેન્દ્રમાં છે. CH_4 શા માટે સમતલીય ચોરસ નથી ?

4.22 Be–H બંધ ધ્રુવીય છે તેમ છતાં BeH_2 અણુની દ્વિધ્રુવ ચાકમાત્રા શૂન્ય શા માટે છે ? સમજાવો.

4.23 NH_3 અને NF_3 માંથી કોની દ્વિધ્રુવ ચાકમાત્રા વધારે છે અને શા માટે ?

4.24 પરમાણ્વીય કક્ષકોના સંકરણનો અર્થ શું થાય છે ? sp, sp^2 અને sp^3 સંકૃત કક્ષકોના આકાર વર્ણવો.

4.25 નીચેની પ્રક્રિયામાં Al પરમાણુના સંકરણમાં (જો કોઈ હોય તો) થતો ફેરફાર વર્ણવો :
$AlCl_3 + Cl^- \rightarrow AlCl_4^-$

4.26 નીચેની પ્રક્રિયાને કારણે B અને N પરમાણુઓના સંકરણમાં કોઈ ફેરફાર છે ?
$BF_3 + NH_3 \rightarrow F_3B \cdot NH_3$

4.27 C_2H_4 અને C_2H_2 અણુઓમાં કાર્બન પરમાણુઓ વચ્ચે રચાતા દ્વિબંધ અને ત્રિબંધની આકૃતિ દોરો.

4.28 નીચેના અણુઓમાં કુલ કેટલા સિગ્મા અને પાઈ બંધ છે ?
(a) C_2H_2 (b) C_2H_4

4.29 X-અક્ષને આંતરકેન્દ્રીય અક્ષ તરીકે ગણો અને નીચેનામાંથી કોણ સિગ્મા બંધ રચશે નહિ અને શા માટે ?
(a) 1s અને 1s (b) 1s અને 2p_x (c) 2p_y અને 2p_y (d) 1s અને 2s.

4.30 નીચેના અણુઓમાં કાર્બન પરમાણુઓ વડે કઈ સંકૃત કક્ષકો ઉપયોગમાં લેવાય છે ?
(a) CH_3–CH_3 (b) CH_3–CH=CH_2 (c) CH_3-CH_2-OH; (d) CH_3-CHO (e) CH_3COOH

4.31 ઈલેક્ટ્રૉનના બંધકારક યુગ્મ અને અબંધકારક યુગ્મ એટલે શું ? સમજાવો. દરેક પ્રકારનું એક ઉદાહરણ આપી સમજાવો.

4.32 સિગ્મા અને પાઈ બંધ વચ્ચે ભેદ દર્શાવો.

4.33 સંયોજકતા બંધન વાદના આધારે H_2 અણુની રચના સમજાવો.

4.34 આણ્વીય કક્ષકોની રચના માટે પરમાણ્વીય કક્ષકોના રૈખિક સંગઠન માટે અગત્યની શરતો લખો.

4.35 આણ્વીય કક્ષક વાદનો ઉપયોગ કરીને સમજાવો કે Be_2 અણુ અસ્તિત્વ ધરાવતો નથી.

4.36 નીચેની સ્પીસિઝની સાપેક્ષ સ્થાયીતા સરખાવો અને તેમના ચુંબકીય ગુણધર્મો સૂચવો :
O_2, O_2^+, O_2^- (સુપર-ઑક્સાઇડ); O_2^{2-} (પેરોક્સાઇડ)

4.37 કક્ષકોને રજૂ કરવામાં ધન અને ઋણ સંજ્ઞાની અગત્ય લખો.

4.38 PCl_5ની બાબતમાં સંકરણ વર્ણવો. શા માટે અક્ષીય બંધો વિષુવવૃત્તીય બંધો (equatorial) કરતાં વધારે લાંબા હોય છે ?

4.39 હાઇડ્રોજન બંધને વ્યાખ્યાયિત કરો. તે વાન્ ડર વાલ્સ બળો કરતાં નબળા છે કે પ્રબળ છે ?

4.40 બંધક્રમાંક પર્યાય વડે શું સમજવામાં આવે છે ?
N_2, O_2, O_2^+ અને O_2^- ના બંધક્રમાંક ગણો.