அலகு 2

அணுவின் குவாண்டம் இயக்கவியல் மாதிரி

எர்வின் ஷ்ரோடிங்கர்
(1887 - 1961)

அணு பற்றிய புதிய பயன் தரும் கொள்கையை உருவாக்கியமைக்காக, 1933 ஆம்ஆண்டின் இயற்பியலுக்கான நோபல்பரிசு எர்வின் ஷ்ரோடிங்கருக்கு வழங்கப்பட்டது. இவர் கணிதம், இயற்பியல், வேதியியல், தாவரவியல் ஆகிய பாடங்களில் ஈடுபாடு கொண்டிருந்தார். குவாண்டம் கட்டுப்பாட்டின் அடிப்படையிலான போரின் ஆர்பிட் கொள்கையானது இவருக்கு திருப்தியளிப்பதாக இல்லை. அணுநிறமாலையானது ஐகன் மதிப்பு தீர்வு காண்பது போன்ற ஒரு செயலின் மூலம் தீர்மானிக்கப்பட வேண்டியது என இவர் நம்பினார். அதனடிப்படையில் ஒரு அலைச் சமன்பாட்டினை முன்மொழிந்தார். தற்போது அச்சமன்பாடு அவரது பெயரால் ஷ்ரோடிங்கர் அலைச்சமன்பாடு என அழைக்கப்படுகிறது.

கற்றலின் நோக்கங்கள்

இப்பாடப் பகுதியைக் கற்றறிந்த பின்னர்

- பல்வேறு அணுமாதிரிகளை மீட்டறிதல்
- பருப்பொருட்களின் ஈரியல்புத் தன்மையினை விளக்குதல்.
- டிபிராக்ளியின் சமன்பாட்டினை வருவித்தல் மற்றும் தொடர்புடைய எண்ணியல் கணக்குகளைத் தீர்த்தல்.
- ஹெய்சன்பர்க் நிச்சயமற்றதன்மை கோட்பாட்டை விளக்குதல் மற்றும் கணக்குகளை தீர்த்தல்.
- குவாண்டம் எண்களின் முக்கியத்துவத்தினை உணர்ந்து கொள்ளுதல்.
- குவாண்டம் இயக்கவியலின் அடிப்படையிலான அணுமாதிரியின் முக்கியக் கூறுகளைத் தொகுத்துரைத்தல்.
- பல்வேறு அணு ஆர்பிட்டால்களின் வடிவமைப்பினை வரைதல்.
- ஆஃபா தத்துவத்தினை விளக்குதல்.
- ஹூண்ட்விதி மற்றும் பௌலி தவிர்க்கைத் தத்துவத்தினை விவரித்தல்.
- அணுக்களில் எலக்ட்ரான்கள் நிரப்பப்படுவதற்கு தொடர்புடைய விதிகளைப் பயன்படுத்துதல் மற்றும் பல்வேறு அணுக்களுக்கு எலக்ட்ரான் அமைப்பினை எழுதுதல்.

ஆகிய திறன்களை மாணவர்கள் பெற இயலும்.

Unit 2.indd 40 23-12-2021 16:18:39

2.1 அணு மாதிரிகளைப் பற்றிய அறிமுகம்

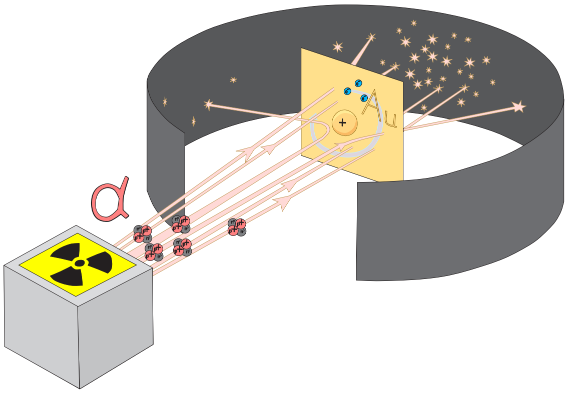
முந்தைய வகுப்புகளில் கற்றறிந்த, பல்வேறு அணுமாதிரி கோட்பாடுகளை நாம் நினைவுகூர்வோம்.அனைத்துப்பொருட்களும் பருப்பொருளால் ஆக்கப்பட்டுள்ளன என்பதனை நாம் அறிவோம். அனைத்து பருப்பொருட்களுக்கும் அடிப்படை அலகாக இருப்பது அணுவாகும். கிரேக்கச் சொல்லான 'a–tomio' என்ற வார்த்தைக்கு பிரிக்க முடியாது என்பது பொருள். இவ்வார்த்தையிலிருந்து அணு (atom) என்ற சொல் உருவானது. அணுத்துகள்களான புரோட்டான், எலக்ட்ரான் மற்றும் நியூட்ரான் ஆகியவை கண்டறியப்படும் வரை அணுவானது மேலும் பிரிக்க முடியாத துகள் என கருதப்பட்டு வந்தது. J.J தாம்சனின் கேதோடுகதிர் சோதனை மூலம் அணுவில் எதிர்மின் தன்மையுடைய எலக்ட்ரான் உள்ளது எனக் கண்டறியப்பட்டது. அணுவானது நேர்மின்சுமையுடைய கோளம் போன்ற அமைப்பில் உள்ளது எனவும், அக்கோளத்தில் எதிர்மின்சுமையுடைய எலக்ட்ரான்கள், தர்பூசணியில் விதைகள் பொதிந்திருப்பதைப் போல, பொதித்து வைக்கப்பட்டுள்ளது என J.J.தாம்சன் தனது அணுமாதிரியினை முன்மொழிந்தார். பின்னாளில், ரூதர்ஃபோர்டின் α– கதிர் சிதறல் ஆய்வின் முடிவுகள் தாம்சனின் அணு மாதிரி தவறானது என நிரூபித்தது.

ரூதர்போர்டு ஒரு மெல்லிய தங்கத் தகட்டின் மீது α –கதிர்களை விழுமாறுச் செய்தார்.

இச்சோதனையில்

i) பெரும்பாலான α – கதிர்கள் தங்கத் தகட்டின் வழியே ஊடுருவி சென்றன.

ii) சில α – கதிர்கள் சிறிய கோணத்தில் விலகல் அடைந்தன



படம். 2.1 ரூதர் போர்டின் α-கதிர் சிதறல் ஆய்வு

iii) மிகச் சில α – கதிர்கள் 180^{0} கோணத்தில் மீள் விலகலடைந்தன.

மேற்கண்டுள்ள இச்சோதனையின் உற்றுநோக்கலின் அடிப்படையில், ரூதர்போர்டு பின்வரும் அணுமாதிரியினை முன்மொழிந்தார். அணுவானது ஒரு மிகச்சிறிய நேர்மின் தன்மையுடைய அணுக்கருவினைக் கொண்டுள்ளது. இந்த அணுக்கருவினைச் சுற்றி எலக்ட்ரான்கள் அதிகவேகத்தில் சுற்றி வருகின்றன.

மின்காந்த அலைக்கோட்பாட்டின் அடிப்படையில், இயங்கும் மின்சுமையுடைய துகளானது தொடர்ச்சியாக ஆற்றலை இழந்து இறுதியில் அணுக்கருவுடன் மோதவேண்டும். இதன் விளைவாக அணுவானது அழியும் நிலைக்கு உட்படும். ஆனால் நடைமுறையில் இவ்வாறு நிகழாமல், அணுக்கள் நிலைப்புத்தன்மை பெற்று விளங்குகின்றன. மேலும் அணுக்கருவினைச் சுற்றி எலக்ட்ரான்கள் எவ்வாறு விரவியுள்ளது. என்பதனையும் எலக்ட்ரானின் ஆற்றலையும் இம்மாதிரி விளக்கவில்லை.

2.1.1 போர் அணுமாதிரி:

பிளாங்க் மற்றும் ஐன்ஸ்டீனின் ஆய்வுகளின் மூலம் மின்காந்த அலையின் ஆற்றலானது $h\nu$ என்ற அலகில்

Unit 2.indd 41 23-12-2021 16:18:40

வரையறுக்கப்பட்ட மதிப்புகளை மட்டும் கொண்டுள்ளது என கண்டறியப்பட்டது. (இங்கு ν என்பது கதிர்வீச்சின் அதிர்வெண், h என்பது பிளாங் மாறிலி. இதன் மதிப்பு 6.626×10^{-34} Js) பிளாங்கின் குவாண்டம் கருதுகோளினை அணுக்களின் ஆற்றலுக்கு விரிவுபடுத்தி நீல்ஸ்போர் ஹைட்ரஜன் அணுவிற்கான ஒரு புதிய அணு மாதிரியினை முன்மொழிந்தார். இந்த அணு மாதிரி பின்வரும் கருது கோள்களின் அடிப்படையில் அமைந்தது.

1. எலக்ட்ரானின் ஆற்றல் வரையறுக்கப்பட்ட மதிப்புகளைப் பெற்றிருக்கும்.

2. எலக்ட்ரான்கள் அணுக்கருவினைச் சுற்றி சில குறிப்பிட்ட ஆற்றலுடைய ஆர்பிட் எனும் வட்டப்பாதையில் மட்டும் சுற்றி வருகின்றன. இவ்வட்டப்பாதைகள் நிலை வட்டப்பாதைகள் (Stationary orbits)என அழைக்கப்படுகின்றன.

3. ஒரு குறிப்பிட்ட வட்டப்பாதையில் சுற்றி வரும் எலக்ட்ரானின் கோண உந்தமதிப்பு (mvr)ஆனது, $h/2\pi$ன் முழு எண் மடங்காக இருக்கும் அதாவது

$mvr = nh/2\pi$------------------- (2.1)

இங்கு n = 1, 2, 3. . . . முதலியன

4. எலக்ட்ரானானது ஒரு குறிப்பிட்ட நிலை வட்டப் பாதையில் சுற்றி வரும் வரையில் அதன் ஆற்றலை இழப்பதில்லை. ஆனால், ஒரு எலக்ட்ரான் உயர் ஆற்றலுடைய (E_2) வட்டப் பாதையிலிருந்து, தாழ்ந்த ஆற்றலுடைய (E_1) வட்டப் பாதைக்குத் தாவும் போது, அதிகப்படியான ஆற்றல் கதிர் வீச்சாக வெளியிடப்படுகிறது வெளியிடப்பட்ட கதிர்வீச்சின் அதிர்வெண்

$$E_2 - E_1 = h\nu$$

மற்றும்

$$\nu = \frac{(E_2 - E_1)}{h} \text{ -------- } (2.2)$$

மாறாக, தகுந்த ஆற்றல் ஒரு எலக்ட்ரானுக்குத் தரப்படும் போது, அது தாழ்ந்த ஆற்றலுடைய வட்டப் பாதையிலிருந்து, அதிக ஆற்றலுடைய வட்டப் பாதைக்குத் தாவுகின்றது. ஹைட்ரஜன் மற்றும் ஹைட்ரஜனை ஒத்த (ஒரு எலக்ட்ரானைக் கொண்ட H, He^+ மற்றும் Li^{2+} போன்றவை) அணுக்களுக்கு போர் கருதுகோளை பயன்படுத்தி, 'n' ஆவது வட்டப் பாதையில் சுற்றி வரும் எலக்ட்ரானின் ஆற்றல் மற்றும் அவ்வட்டப்பாதையின் ஆரம் ஆகியவற்றை வருவித்ததன் முடிவுகள் பின்வருமாறு

$$r_n = \frac{(0.529)n^2}{Z} \text{Å} \text{ --------------- } (2.3)$$

$$E_n = \frac{(-13.6)\,Z^2}{n^2} \text{eV atom}^{-1} \text{ --------} (2.4)$$

(அல்லது)

$$E_n = \frac{(-1312.8)\,Z^2}{n^2} \text{kJ mol}^{-1} \text{ --------} (2.5)$$

r_n மற்றும் E_n மதிப்புகளை வருவிக்கும் முறையினை, 12ஆம் வகுப்பில் அணு இயற்பியல் பாடத்தில் விரிவாக கற்கலாம்.

2.1.2. போர் அணு மாதிரியின் வரம்புகள்

(i) ஹைட்ரஜன், Li^{2+} போன்ற ஒற்றை எலக்ட்ரான்களைக் கொண்ட இனங்களுக்கு மட்டுமே இக்கொள்கையினைப் பயன்படுத்த இயலும். பல எலக்ட்ரான்களைக் கொண்ட அணுக்களுக்கு இக்கொள்கையினைப் பயன்படுத்த இயலாது.

காந்தப்புலத்தில் நிறமாலைக் கோடுகள் பிரிகையடைதல் (சீமன் விளைவு)

Unit 2.indd 42 23-12-2021 16:18:41

மற்றும் மின்புலத்தில் நிறமாலைக்கோடுகள் பிரிகையடைதல் (ஸ்டார்க் விளைவு) ஆகியவற்றை இக்கொள்கை விளக்கவில்லை.

அணுக்கருவினைச் சுற்றி எலக்ட்ரான்கள் அவற்றின் கோண உந்தத்தின் (mvr) மதிப்பு nh/2πக்கு சமமாக இருக்குமாறு உள்ள சில குறிப்பிட்ட வட்டப்பாதைகளில் மட்டுமே சுழல்வதற்கு அடிப்படையாக அமையும் காரணத்தினை போர் கொள்கையால் விளக்க இயலவில்லை. லூயிஸ் டீபிராக்ளி என்பவர் இதற்கான தர்க்கரீதியான விளக்கத்தினை அளித்தார்.

2.2. பருப்பொருட்களின் ஈரியல்புத் தன்மை துகள் மற்றும் அலைத் தன்மை

ஒளியானது ஈரியல்புத் தன்மையினைப் பெற்றுள்ளது என ஐன்ஸ்டீன் முன்மொழிந்தார். அதாவது ஒளி போட்டான்களானவை, துகள் மற்றும் அலை ஆகிய இரண்டின் தன்மையினையும் கொண்டுள்ளது. லூயிஸ் டீபிராக்ளி மேற்கண்டுள்ள கருத்தினை விரிவுபடுத்தி, அனைத்து பருப் பொருட்களும் ஈரியல்புத் தன்மையினைப் பெற்றுள்ளன என முன்மொழிந்தார். இத்தொடர்பினை அளவிட, பருப்பொருள் அலையின், அலை நீளத்தைக் கண்டறிவதற்கான சமன்பாட்டினை டிபிராக்ளி வருவித்தார். ஆற்றலின் துகள் வடிவத்தை குறிப்பிடும் (mc^2) மற்றும் அலை வடிவத்தைக் குறிப்பிடும் ($h\nu$) ஆகிய பின்வரும் இருசமன்பாடுகளையும் இணைத்தார்.

(i) பிளாங்கின் குவாண்டம் கருது கோளின்படி,

$$E = h\nu \qquad \text{--------} \ (2.6)$$

(ii) ஐன்ஸ்டீனின் நிறை ஆற்றல் சமன்பாட்டின்படி

$$E = mc^2 \qquad \text{---------}(2.7)$$

(2.6) மற்றும் (2.7) லிருந்து

$$h\nu = mc^2$$

$$hc/\lambda = mc^2$$

$$\lambda = h / mc \ \text{------------}(2.8)$$

சமன்பாடு (2.8), ஆனது mc என்ற உந்த மதிப்பை பெற்றுள்ள போட்டானின் அலை நீளத்தைக் குறிப்பிடுகிறது.

'm' நிறையுடைய, 'v' திசைவேகத்தில், இயங்கும், பருப்பொருள் துகள் ஒன்றிற்கு சமன்பாடு (2.8) ஐ பின்வருமாறு எழுதலாம்.

$$\lambda = h / mv \ \text{------------} \ (2.9)$$

இச் சமன்பாடு, ஒளியின் திசைவேகத்தைக் காட்டிலும் மிககுறைவான வேகத்தில் இயங்கும் துகள்களுக்கு மட்டுமே பொருந்தும். மேற்கண்டுள்ள சமன்பாட்டிலிருந்து, இயங்கும் துகள் ஒன்றினை அலையாக கருத முடியும் எனவும், அந்த அலையானது துகளுக்குரிய பண்பினை (அதாவது உந்தம்) பெற்றுள்ளது என்பதையும் அறியலாம். அதிக நேர்கோட்டு உந்த (mv) மதிப்பைப் பெற்றுள்ள துகள் ஒன்றின் அலைநீளம் மிகக்குறைவான மதிப்பினையுடையது என்பதால் அதனை கண்டுணர இயலாது. எலக்ட்ரானைப் போன்ற நுண்துகளுக்கு, அதன் நிறை 10^{-31} kg என்ற அளவில் அமைவதால், அதன் உருவளவைக் காட்டிலும் அலை நீளம், மிக அதிக மதிப்புடையது எனவே இத்தகைய நேர்வுகளில் அலைப் பண்பு முக்கியத்துவம் பெறுகிறது.

பின்வரும் இரு நேர்வுகளில் டிபிராக்ளி அலை நீளத்தினை கணக்கிடுவதன் மூலம் இதனை நாம் புரிந்து கொள்ளலாம்.

Unit 2.indd 43 23-12-2021 16:18:41

(i) 10 ms^{-1} திசைவேகத்தில் இயங்கும் 6.626 kg நிறையுடைய இரும்புபந்து

(ii) 72.73 ms^{-1} வேகத்தில் இயங்கும் ஒரு எலக்ட்ரான்

$\lambda_{\text{இரும்புப் பந்து}} = h/mv$

$= \dfrac{6.626 \times 10^{-34}\,kgm^2s^{-1}}{6.626\,kg \times 10\,ms^{-1}} = 1 \times 10^{-35}\ m$

$\lambda_{\text{எலக்ட்ரான்}} = h/mv$

$= \dfrac{6.626 \times 10^{-34}\,kgm^2s^{-1}}{9.11 \times 10^{-31}\,kg \times 72.73\,ms^{-1}}$

$= \dfrac{6.626}{662.6} \times 10^{-3}\ m = 1 \times 10^{-5} m$

எலக்ட்ரானுக்கு டி–பிராக்ளி அலைநீளம் முக்கியத்துவம் உடையது, மேலும் அளவிடக்கூடியது ஆனால் இரும்பு பந்திற்கு இம்மதிப்பு மிகக்குறைவாக இருப்பதால் புறக்கணிக்கத்தக்கது.

தன்மதிப்பீடு

1 keV அழுத்த வேறுபாட்டால் அமைதி நிலையிலிருந்து முடுக்குவிக்கப்பட்ட ஒரு எலக்ட்ரானின் டி–பிராக்ளி அலை நீளத்தினைக் கணக்கிடுக.

2.2.1. கோண உந்தத்தை குவாண்டமாக்கல் மற்றும் டி பிராக்ளி கொள்கை

டி பிராக்ளி கொள்கைப்படி, அணுக்கருவினை சுற்றி வரும் எலக்ட்ரானானது, துகள் மற்றும் அலை ஆகிய இரண்டின் பண்புகளையும் பெற்றுள்ளது. எலக்ட்ரான் அலையானது தொடர்ச்சியாக அமைய வேண்டுமெனில், எலக்ட்ரான் சுற்றி வரும் வட்டப்பாதையின் சுற்றளவானது, அதன் அலை நீளத்தின் முழுஎண் மடங்காக இருக்க வேண்டும். அவ்வாறு இல்லாத நிலையில் எலக்ட்ரான் அலையானது தொடர்ச்சியற்றதாக இருக்கும்.

வட்டப்பாதையின் (orbit) சுற்றளவு $= n\lambda$

$2\pi r \quad = n\lambda$ ------------(2.10)

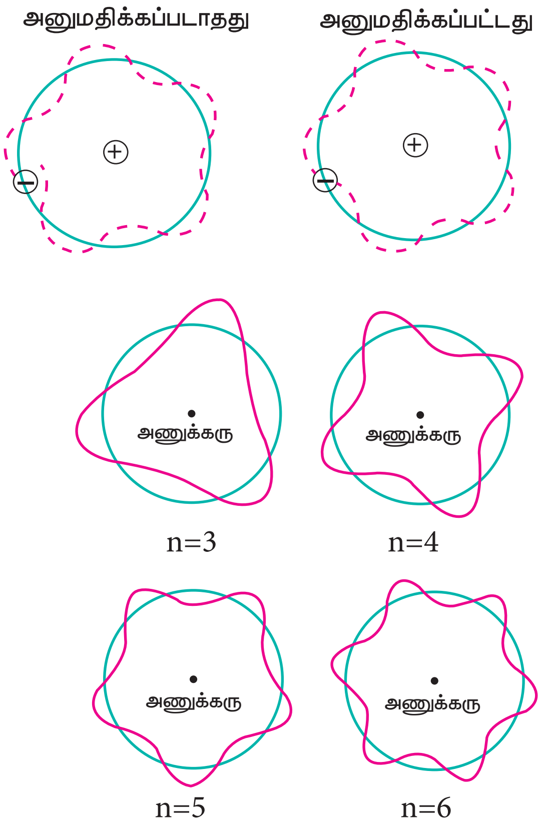
$2\pi r \quad = nh/mv$

மாற்றியமைக்க,

$mvr \quad = nh/2\pi$ ----------(2.11)

கோணஉந்தம் $= nh/2\pi$

மேற்கண்டுள்ள சமன்பாடு போர் என்பவரால் ஏற்கெனவே யூகித்தறியப்பட்ட ஒன்றாகும். எனவே போர் கொள்கையும், டிபிராக்ளி கொள்கையும் ஒன்றுக்கொன்று உடன்படுகின்றன.



படம் 2.2 – அனுமதிக்கப்பட்ட போரின் வட்டப்பாதையில் எலக்ட்ரானின் அலைத்தன்மை.

டேவிசன் மற்றும் ஜெர்மரின்சோதனை

எலக்ட்ரானின்அலைத்தன்மையானது, டேவிசன் மற்றும் ஜெர்மரால் சோதனை

Unit 2.indd 44 23-12-2021 16:18:41

மூலம் உறுதிபடுத்தப்பட்டது. இவர்கள், **நிக்கல்** படிகத்தின் மீது முடுக்குவிக்கப்பட்ட எலக்ட்ரான்களை விழச்செய்து விளிம்பு விளைவினை பதிவு செய்தனர். இவ்வாறு பதிவு செய்யப்பட்ட விளிம்பு விளைவு அமைப்பானது X–கதிரின் விளிம்புவிளைவு அமைப்பினை ஒத்திருந்தது.

எலக்ட்ரான் அலைத்தன்மை உடையது என்ற கண்டுபிடிப்பானது, எலக்ட்ரான் நுண்ணோக்கி, குறைந்த ஆற்றல் எலக்ட்ரான் விளிம்புவிளைவு உள்ளிட்ட பல்வேறு சோதனை நுட்பங்களை உருவாக்குவதற்கு காரணமாக அமைந்தது.

2.3 ஹெய்சன்பர்க்கின் நிச்சயமற்றத் தன்மை கோட்பாடு

பருப்பொருட்களின் ஈரியல்புத் தன்மையானது, நுண்துகள் ஒன்றின் நிலை மற்றும் உந்தத்தை ஒரே நேரத்தில் கண்டறிவதில் வரம்பினை ஏற்படுத்துகிறது. இதனடிப்படையில், ஹெய்சன்பர்க் தனது நிச்சயமற்றத் தன்மைக் கோட்பாட்டினை உருவாக்கினார். இக்கோட்பாட்டின் படி நுண்துகள் ஒன்றின் நிலை மற்றும் உந்தம் ஆகிய இரண்டினையும் ஒரே நேரத்தில், மிகத் துல்லியமாகக் கண்டறிய இயலாது. அவைகளை அளவிடுவதில் ஏற்படும் நிச்சயமற்றத் தன்மையின் (பிழை) பெருக்குத் தொகையினை பின்வருமாறு குறிப்பிடலாம்.

$$\Delta x.\Delta p \geq h/4\pi \text{ -------- } (2.11)$$

இங்கு Δx மற்றும் Δp ஆகியவை முறையே நிலை மற்றும் உந்தம் ஆகியவற்றினை அளவிடுவதில் உள்ள நிச்சயமற்றத் தன்மைகளாகும்.

எலக்ட்ரானைப் போன்ற நுண்துகளிற்கு, நிச்சயமற்றக் கொள்கை முக்கியத்துவம் வாய்ந்ததாகும். அதிக நிறையுடைய பெரிய துகளிற்கு இதன் விளைவு புறக்கணிக்கத் தக்கதாகும்.

ஹைட்ரஜன் அணுவில் உள்ள எலக்ட்ரான் ஒன்றின் திசைவேகத்தினை அளவிடுவதில் ஏற்படும் நிச்சயமற்றத் தன்மையினை கணக்கிடுவதன் மூலம் இதனை நாம் புரிந்து கொள்ளலாம். முதல் வட்டப்பாதையில் போர் அணு ஆரம் 0.529 Å. இந்த வட்டப் பாதையில் உள்ள எலக்ட்ரானின் நிலையினை அவ்வட்டப்பாதை ஆரத்தில் 0.5% துல்லியமாக, கண்டறிய இயலும் எனக் கருது**வோம்**.

நிலையை அளவிடுவதில் உள்ள நிச்சயமற்றத் தன்மை

$$= \frac{0.5\,\%}{100\,\%} \text{ x } 0.529 \text{ A}$$

$$= \frac{0.5}{100} \text{ x } 0.529 \text{ x } 10^{-10} \text{ m}$$

$$\Delta x = 2.645 \text{ x } 10^{-13} \text{ m}$$

ஹெய்சன்பர்க்கின் நிச்சயமற்றத் தன்மை கோட்பாட்டின் படி

$$\Delta x.\Delta p \geq \frac{h}{4\pi}$$

$$\Delta x.(m.\Delta v) \geq \frac{h}{4\pi}$$

$$\Delta x.\Delta p \geq \frac{h}{4\pi}$$

$$\Delta x.(m.\Delta v) \geq \frac{h}{4\pi}$$

$$\Delta v \geq \frac{h}{4\pi.m.\Delta x}$$

$$\Delta v \geq \frac{6.626 \text{ x } 10^{-34} \text{ kg m}^2\text{s}^{-1}}{4\text{x } 3.14 \text{ x } 9.11 \text{ x}10^{-31} \text{ kg x } 2.645 \text{ x } 10^{-13} \text{ m}}$$

$$\Delta v \geq 2.189 \text{ x } 10^8 \text{ ms}^{-1}$$

எனவே, திசைவேகத்தில் ஏற்படும் நிச்சயமற்றத் தன்மை, ஒளியின் திசைவேகத்தோடு ஒப்பிடத்தக்க வகையில் உள்ளது. இவ்வாறு நிச்சயமற்றத் தன்மை அதிகமாக உள்ள நிலையில் அதன் மிகச்சரியான திசைவேகத்தினை கண்டறிவது கடினமாகும்.

தன் மதிப்பீடு

2. ஒரு எலக்ட்ரானின் திசை வேகத்தை அளவிடுவதில் நிச்சயமற்றத் தன்மை 5.7×10^5 ms^{-1}. எனில் அதன் நிலையில் காணப்படும் நிச்சயமற்றத் தன்மையைக் கணக்கிடுக.

Unit 2.indd 45 23-12-2021 16:18:42

2.4 அணுவின் குவாண்டம் இயக்கவியல் மாதிரி – ஷ்ரோடிங்கர் சமன்பாடு

நமது அன்றாட வாழ்வில் நாம் எதிர்கொள்ளும் பொருட்களின் இயக்கத்தினை, நியூட்டனின் விதிகளின் அடிப்படையில் அமைந்த மரபு இயக்கவியற் கொள்கையின் அடிப்படையில் நன்கு விளக்கலாம். இக் கொள்கையின்படி, ஒரு துகளின் இயற்நிலையானது அத்துகளின் நிலை மற்றும் உந்தம் ஆகியவற்றால் வரையறுக்கப்படுகின்றது. ஒரு அமைப்பின் இவ்விரு பண்புகளும் நமக்குத் தெரித்திருக்குமேயானால், அந்த அமைப்பின் மீது செயல்படும் விசையின் அடிப்படையில், மரபு இயக்கவியற் கொள்கையினைப் பயன்படுத்தி அந்த அமைப்பின் எதிர்கால நிலையினை நாம் ஊகித்து அறிய முடியும். எனினும், ஹெய்சன் பர்க்கின் நிச்சயமற்றக் கோட்பாட்டின்படி, எலக்ட்ரானைப் போன்ற நுண்துகளுக்கு நிலை மற்றும் உந்தம் ஆகிய இரு பண்புகளையும் ஒரேநேரத்தில், துல்லியமாகக் கண்டறிய இயலாது. மேலும் மரபு இயக்கவியற் கொள்கையானது பருப்பொருட்களின் ஈரியல்புத் தன்மையினைக் கருத்திற் கொள்ளவில்லை. ஆனால் நுண்துகளுக்கு ஈரியல்புத் தன்மை முக்கியத்துவம் வாய்ந்ததாகும். எனவே மேற்கண்டுள்ள காரணங்களால் மரபு இயக்கவியற் கொள்கையால் நுண்துகள்களின் இயக்கத்தினை சரிவர விளக்க இயலவில்லை.

ஹெய்சன்பர்க்கின் நிச்சயமற்றக் கொள்கை மற்றும் நுண்துகளின் ஈரியல்புத் தன்மை ஆகியவற்றை அடிப்படையாகக் கொண்டு, குவாண்டம் இயக்கவியல் என்ற ஒரு புதிய இயக்கவியல் உருவாக்கப்பட்டது.

எர்வின் ஷ்ரோடிங்கர் எலக்ட்ரானின் அலைப்பண்பினை, ஒரு வகைக்கெழுச் சமன்பாட்டின் அடிப்படையில் குறிப்பிட்டார். எலக்ட்ரான் இயங்கக்கூடிய விசையின் புலத்தினை பொறுத்து புறவெளியில் அலைச் சார்பில் ஏற்படும் மாறுபாட்டினை இச்சமன்பாடு தீர்மானிக்கிறது. காலத்தினை சார்ந்து அமையாத ஷ்ரோடிங்கர் அலைச் சமன்பாட்டினை பின்வருமாறு குறிப்பிடலாம்.

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \;-------\; (2.12)$$

இங்கு $\hat{H}$ என்பது ஹாமில்டோனியன் செயலி. Ψ என்பது அலைச்சார்பு. இது துகளின் நிலை அச்சுகளின் சார்பாகும். இது ψ (x, y, z) எனகுறிப்பிடப்படுகிறது. E என்பது அமைப்பின் ஆற்றலாகும்.

$$\hat{H} = \left[\frac{-h^2}{8\pi^2 m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+V\right]$$

(2.12) ஐ பின்வருமாறு எழுதலாம்

$$\left[\frac{-h^2}{8\pi^2 m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)+V\psi\right] = E\psi$$

$\frac{-8\pi^2 m}{h^2}$ ஆல் பெருக்கி, மாற்றியமைக்க

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}+\frac{8\pi^2 m}{h^2}(E-V)\psi = 0 \;------\; (2.13)$$

மேற்கண்டுள்ள ஷ்ரோடிங்கர் அலைச்சமன்பாட்டில், காலம்(t) ஒரு சார்பாக இடம் பெறவில்லை. மேலும் இச்சமன்பாடு காலத்தைப் பொருத்து அமையாத ஷ்ரோடிங்கரின் அலைச்சமன்பாடு என அழைக்கப்படுகிறது. மொத்த ஆற்றலின்(E) குறிப்பிட்ட மதிப்புகளுக்கு மட்டுமே இச்சமன்பாட்டிற்கு தீர்வுகாண இயலும். அதாவது அமைப்பின் ஆற்றலானது வரையறுக்கப்பட்ட மதிப்புகளை மட்டும் பெற்றிருக்கும். அனுமதிக்கப்பட்ட மொத்த ஆற்றலின் (E) மதிப்புகள் ஐகன் மதிப்புகள் என அழைக்கப்படுகின்றன. ஐகன் மதிப்புகளுக்கு இணையான அலைச்சார்புகள் (ψ), அணு ஆர்பிட்டால்களைக் குறிப்பிடுகின்றன.

Unit 2.indd 46 23-12-2021 16:18:42

2.4.1. அணுவின் குவாண்டம் இயக்கவியல் மாதிரியின் முக்கியக்கூறுகள்

1. அணுவில் உள்ள எலக்ட்ரான்களின் ஆற்றல் குறிப்பிட்ட வரையறுக்கப்பட்ட மதிப்புகளை மட்டுமே பெற்றிருக்கும்.
2. எலக்ட்ரான்களின் அலையினை ஒத்த பண்பின் ஒரு நேரடியான விளைவாக, வரையறுக்கப்பட்ட எலக்ட்ரான் ஆற்றல் மட்டங்கள் காணப்படுகின்றன. ஷ்ரோடிங்கர் அலைச் சமன்பாட்டின் தீர்வுகள், அனுமதிக்கப்பட்ட ஆற்றல் மட்டங்களைத் (Orbits) தருகிறது.
3. ஹெய்சன்பர்க்கின் நிச்சயமற்றக் கோட்பாட்டின் படி, எலக்ட்ரான் ஒன்றின் துல்லியமான நிலை மற்றும் உந்தத்தினை மிகதுல்லியமாகக் கண்டறிய இயலாது. இதன் விளைவாக, ஆர்பிட்டால் கொள்கையினை குவாண்டம் இயக்கவியல் அறிமுகப்படுத்தியது. **ஆர்பிட்டால் என்பது எலக்ட்ரான்களை காண்பதற்கு அதிகப்பட்ச நிகழ்தகவினைப் பெற்றுள்ள ஒரு முப்பரிமான வெளி ஆகும்**.
4. ஒரு அணுவின் அனுமதிக்கப்பட்ட ஆற்றல் மதிப்புகளுக்கான ஷ்ரோடிங்கர் அலைச் சமன்பாட்டின் தீர்வானது அலைச்சார்பு ψ, ஐத் தருகிறது. இது அணு ஆர்பிட்டாலைக் குறிப்பிடுகிறது. அலைச் சார்பு ψ, ஐப் பயன்படுத்தி ஒரு ஆர்பிட்டாலில் காணப்படும் எலக்ட்ரானின் அலைப் பண்பினை நன்கு வரையறுக்க இயலும்.
5. அலைச்சார்பு ψ, க்கு என இயற் முக்கியத்துவம் ஏதும் இல்லை. எனினும் (x,y,z) புள்ளியைச் சுற்றி அமைந்துள்ள ஒரு சிறு கனஅளவு dxdydzல் எலக்ட்ரானைக் காண்பதற்கான நிகழ்தகவானது, $|\psi(x,y,z)|^2 dxdydz$ க்கு நேர்விகிதத்தில் இருக்கும். $|\psi(x,y,z)|^2$ என்பது நிகழ் தகவு அடர்த்தி என அறியப்படுகிறது. இது எப்போதும் நேர் குறி மதிப்பினைப் பெற்றிருக்கும்.

2.5. குவாண்டம் எண்கள்

அணுவில் உள்ள ஒரு எலக்ட்ரானை நான்கு குவாண்டம் எண்கள் அடங்கிய தொகுப்பின் மூலம் வரையறுக்க இயலும். அவையாவன முதன்மைக் குவாண்டம் எண் (n), கோண உந்த குவாண்டம் எண் (l), காந்த குவாண்டம் எண் (m) மற்றும் தற்சுழற்சி குவாண்டம் எண் (s). அலைச்சார்பு ψ-க்கு ஷ்ரோடிங்கர் அலைச் சமன்பாட்டிற்கு தீர்வு காணும் போது பெறப்படும் தீர்வானது முதல் மூன்று குவாண்டம் எண்களைக் (n,l மற்றும் m) கொண்டிருக்கும். நான்காவது குவாண்டம் எண்ணானது எலக்ட்ரானின் தற்சுழற்சியின் காரணமாக அமைகிறது. எனினும், ஒரு பொருள் தனக்குத் தானே சுழல்வது என்பது மரபு இயக்கவியல் கொள்கைப்படி சரியானது அல்ல.

முதன்மைக் குவாண்டம் எண் (n)

அணுக்கருவினைச் சுற்றி எலக்ட்ரான்கள் சுழன்று வரும் ஆற்றல் மட்டத்தினை இக்குவாண்டம் எண் குறிப்பிடப்படுகிறது. இது 'n' என்ற எழுத்தால் குறிப்பிடப்படுகிறது.

1.) முதன்மைக் குவாண்டம்எண் (n) ன் மதிப்புகள் 1, 2, 3 . . . .

n=1 என்பது K கூட்டினையும் (Shell) n=2 என்பது L கூட்டினையும் n= 3, 4, 5 என்பன முறையே M, N, O ஆகிய கூடுகளையும் குறிப்பிடுகின்றன.

2.) ஒரு குறிப்பிட்ட கூட்டில் இடம் பெறும் அதிகபட்ச எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கையினை $2n^2$ என்ற வாய்பாட்டின் மூலம் பெறலாம்.

3.) 'n' ஆனது எலக்ட்ரானின் ஆற்றல் மதிப்பினைத் தருகிறது. $E_n = \frac{(-1312.8)\, Z^2}{n^2}\ kJ\ mol^{-1}$

மேலும் அணுக்கருவிலிருந்து எலக்ட்ரான் அமைந்துள்ள தூரமானது $r_n = \frac{(0.529)n^2}{Z}\ Å$ என்ற சமன்பாட்டால் தரப்படுகிறது.

கோண உந்தக் குவாண்டம்எண் (l)

1) இது 'l' என்ற எழுத்தால் குறிப்பிடப்படுகிறது. இது பூஜ்யம் முதல் (n–1) வரையிலான மதிப்புகளைப் பெறுகிறது. இங்கு n என்பது முதன்மைக் குவாண்டம் எண்ணைக் குறிப்பிடுகிறது.

2) ஒவ்வொரு l மதிப்பும் ஒரு துணைக்கூட்டினைக் (sub– shell or orbital) குறிப்பிடுகிறது. l = 0, 1, 2, 3 மற்றும் 4 ஆகியன முறையே s, p, d, f மற்றும் g ஆர்பிட்டால்களைக் குறிப்பிடுகின்றன.

3) ஒரு துணைக் கூட்டில் (ஆர்பிட்டாலில்) இடம் பெறும் அதிகபட்ச எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கையினை 2(2l+1) என்ற வாய்பாட்டினைப் பயன்படுத்திக் கணக்கிடலாம்.

4) ஆர்பிட்டால் கோண உந்தத்தினை கணக்கிட இக்குவாண்டம் எண் பயன்படுகிறது.

ஆர்பிட்டால் கோண உந்தம் = $\sqrt{l(l+1)}\,\frac{h}{2\pi} ----(2.14)$

காந்தக் குவாண்டம் எண் (m_l)

1) இது 'm_l' என்ற குறியீட்டால் குறிக்கப்படுகிறது. இக்குவாண்டம் எண் $-l$ முதல் பூஜ்ஜியத்தினை உள்ளடக்கி $+l$ வரையிலான முழுக்களின் மதிப்பினைப் பெறுகிறது. l=1 எனில் m = -1, 0, +1

2) ஒருகுறிப்பிட்ட 'l' மதிப்பிற்கு உரிய 'm'–ன் வெவ்வேறு மதிப்புகளானது, முப்பரிமாண வெளியில் ஆர்பிட்டால்களின் திசையமைப்பினைக் குறிப்பிடுகிறது.

3) காந்தப்புலத்தில் நிறமாலை வரிகள் பிரியும் நிகழ்வான சீமன்விளைவு, இக்குவாண்டம் எண்ணிற்கான ஆய்வு அடிப்படையிலான ஒரு நிரூபனமாகும்.

4) குவாண்டம் எண் 'l' ஆனது கோண உந்தத்தின் எண் மதிப்பினைத் தரும் நிலையில், காந்தக் குவாண்டம்எண் (m_l) அதன் திசையினைத் தருகிறது.

தற்சுழற்சிக் குவாண்டம் எண் (m_s)

1) இக்குவாண்டம் எண் எலக்ட்ரான்களின் தற்சுழற்சியினைக் குறிப்பிடுகிறது. இது 'm_s' என்ற குறியீட்டால் குறிப்பிடப்படுகிறது.

2) எலக்ட்ரானானது அணுவின் அணுக்கருவினை சுற்றிவருவதோடு இல்லாமல் தனக்குத்தானே சுழன்று வருகிறது. இதனை, எலக்ட்ரானது தனது சுய அச்சில் தனக்குத்தானே கடிகாரமுள் சுழலும் திசையிலேயோ அல்லது அதற்கு எதிர் திசையிலேயோ சுழல்கிறது எனக் குறிப்பிடுவது வழக்கம். இதனை காட்சிப் படுத்தல் உண்மையல்ல எனினும் தற்சுழற்சியினை, காந்தப் புலத்தில் உணரப்படும் ஒரு பண்பினைக் குறிப்பிடுவதாக நம்மால் புரிந்து கொள்ளமுடியும்.

3) கடிகார முள் சுழலும் திசை அல்லது கடிகார முள் சுழலுவதற்கு எதிர்திசையில் எலக்ட்ரான்களின் தற் சுழற்சியினைப் பொறுத்து, அதிகபட்சமாக இரு மதிப்புகளை இக்குவாண்டம் பெற வாய்ப்புள்ளது

4) m_sன் மதிப்புகள் +1/2 மற்றும் –1/2 ஆகும்.

அட்டவணை 2.1 குவாண்டம் எண்கள் மற்றும் அவற்றின் முக்கியத்துவம்

கூடு	முதன்மைக் குவாண்டம எண் (n)	ஒரு கூட்டில் காணப்படும் அதிகபட்ச எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை ($2n^2$)	கோண உந்தக் குவாண்டம் எண் $l = 0,1 \ldots (n-1)$	ஒரு ஆர்பிட்டாலில் காணப்படும் அதிகபட்ச எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை $2(2l+1)$	காந்தக் குவாண்டம் எண் (m) ஆர்பிட்டாலின் வெவ்வேறு திசையமைப்புகள்	ஒரு கூட்டில் உள்ள ஆர்பிட்டாலின் குறியீடு
K	1	$2(1)^2 = 2$	0	$2[2(0)+1] = 2$	0	1s
L	2	$2(2)^2 = 8$	0	2	0	2s
			1	$2[2(1)+1] = 6$	-1, 0, +1	$2p_y$, $2p_z$, $2p_x$
M	3	$2(3)^2 = 18$	0	2	0	3s
			1	6	-1, 0, +1	$3p_y$, $3p_z$, $3p_x$,
			2	$2[2(2)+1] = 10$	-2, -1, 0, +1, +2	$3d_{x^2-y^2}$, $3d_{yz}$, $3d_{z^2}$, $3d_{zx}$, $3d_{xy}$
N	4	$2(4)^2 = 32$	0	2	0	4s
			1	6	-1, 0, +1	$4p_y$, $4p_z$, $4p_x$
			2	10	-2, -1, 0, +1, +2	$4d_{x^2-y^2}$, $4d_{xy}$, $4d_{z^2}$, $4d_{yz}$, $4d_{zx}$
			3	$2[2(3)+1] = 14$	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	$f_{y(3x^2-y^2)}$ $f_{z(x^2-y^2)}$, f_{yz^2}, f_{z^3}, f_{xz^2}, f_{xyz}, $f_{x(x^2-3y^2)}$,

P_x, d_{z^2}, f_{xyz} என்பன போன்ற ஆர்பிட்டால்களை குறிக்கப் பயன்படும் (x, z^2, xyz) போன்ற அடையாளங்களானது, குறிப்பிட்ட 'm' மதிப்புடன் தொடர்புடையவை அல்ல.

தன் மதிப்பீடு

3) 4வது ஆற்றல் மட்டத்தில் (n=4) எத்தனை ஆர்பிட்டால்கள் இருப்பதற்கு வாய்ப்பு உள்ளது?

Unit 2.indd 49 23-12-2021 16:18:43

2.5.1.ஆர்பிட்டால்களின் வடிவங்கள்

ஷ்ரோடிங்கர் அலைச் சமன்பாட்டின் தீர்வுகள் ஐகன் மதிப்புகள் என்றழைக்கப்படும். அனுமதிக்கப்பட்ட ஆற்றல் மதிப்புகளைத் தருகின்றன. ஐகன் மதிப்போடு தொடர்புடைய ஐகன் சார்புகள் அணு ஆர்பிட்டால்கள் என அழைக்கப்படுகின்றன. ஹைட்ரஜனை ஒத்த ஒரு எலக்ட்ரான் அமைப்பிற்கான ஷ்ரோடிங்கர் அலைச் சமன்பட்டின் தீர்வை (Ψ) கோளக துருவ ஆய அச்சில் (r, θ, φ) (spherical polar co–ordinates).பின்வருமாறு குறிப்பிடலாம்.

$$\Psi\ (r, \theta, \varphi) = R(r).f(\theta).g(\varphi) \text{ ------ } (2.15)$$

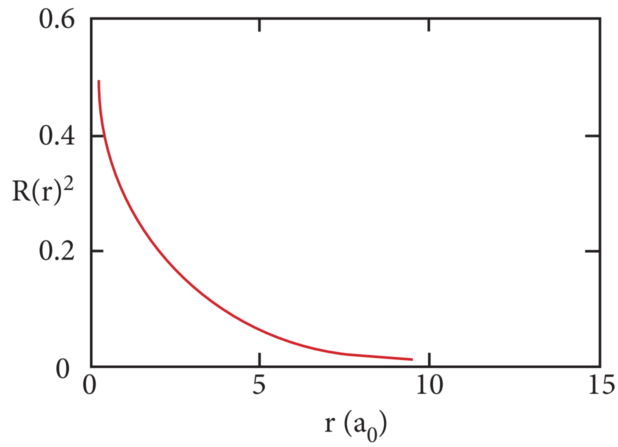
இங்கு R(r) என்பது ஆர அலைச் சார்பு (Radial wave function) என அழைக்கப்படுகிறது. மற்ற இருசார்புகளும் கோண அலைச் சார்புகள் (angular wave function) என அழைக்கப்படுகின்றன.

Ψ க்கு என இயற் முக்கியத்துவம் ஏதும் இல்லை எனவும், அலைச் சார்பின் இருமடி $|\Psi|^2$ ஆனது புறவெளியில் (space) கொடுக்கப்பட்ட கனஅளவிற்குள் எலக்ட்ரானை காண்பதற்கான நிகழ்தகவோடு தொடர்புடையது எனவும் நாம் அறிவோம்.

அணுக்கருவிலிருந்து உள்ள, தொலைவினைப் பொருத்து $|\Psi|^2$ மதிப்பானது எவ்வாறு மாறுபடுகிறது – (நிகழ்தகவின் ஆரபங்கீடு–Radial distribution of the probability) என்பதனையும் அணுக்கருவிலிருந்து திசையினைப் பொருத்து (நிகழ்தகவின் கோணப்பங்கீடு – angular distribution of the probability $|\Psi|^2$) எவ்வாறு மாறுபடுகிறது என்பதனையும் நாம் ஆய்ந்தறிவோம்.

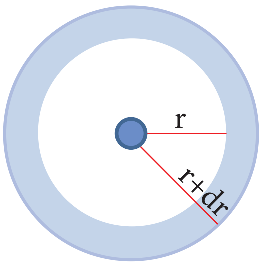
ஆரப் பங்கீட்டுச் சார்பு

அடிஆற்றல் நிலையில் (ground state) உள்ள ஹைட்ரஜன் அணுவின் ஒற்றை எலக்ட்ரானைக் கருதுக. இந்த எலக்ட்ரானுக்கான குவாண்டம் எண்கள் n=1 மற்றும் l=0 அதாவது இந்த எலக்ட்ரான் 1s ஆர்பிட்டாலில் உள்ளது. 1s ஆர்பிட்டாலுக்கான, $R(r^2)$ Vs r வரைபடம் படம் (2.3)ல் கொடுக்கப்பட்டுள்ளது.



படம் 2.3 – ஹைட்ரஜனின் 1s ஆர்பிட்டாலுக்கான $R(r^2)$ Vs r வரைபடம்

மேற்கண்டுள்ள வரைபடத்திலிருந்து ,எலக்ட்ரானுக்கும் அணுக்கருவிற்கும் இடையேயான தூரம் குறையும்போது, எலக்ட்ரானைக் காண்பதற்கான நிகழ்த்தகவும் அதிகரிக்கின்றது என அறிய முடிகிறது, r=0, எனும் போது $R(r)^2$– ன் மதிப்பானது பெருமமாகிறது . அதாவது $|\Psi|^2$ –ன் அதிக பட்ச மதிப்பானது அணுக்கருவினுள் அமைகிறது. எனினும் அணுக்கருவினைச் சுற்றி கொடுக்கப்பட்ட கோளகக் கூட்டில் எலக்ட்ரானைக் காண்பதற்கான நிகழ்தகவே முக்கியமானதாகும். r மற்றும் r+dr. ஆகிய ஆரங்களுடைய இரு ஒரு மைய கோளங்களுக்கு இடைப்பட்ட கன அளவு (dV) – யைக் கருதுவோம்.



படம் 2.4

கோளத்தின் கன அளவு $V = \frac{4}{3}\pi r^3$

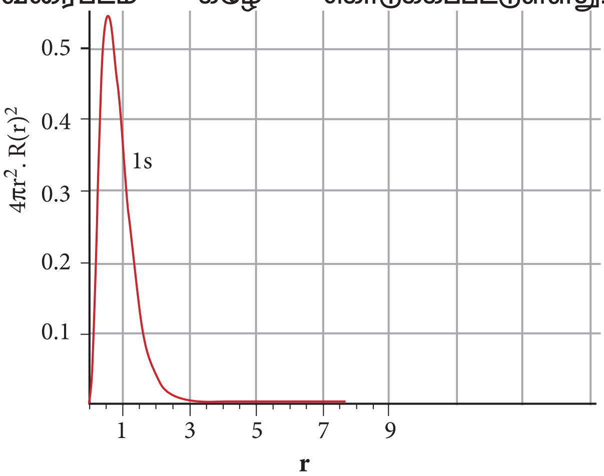
$$\frac{dV}{dr} = \frac{4}{3}\pi(3r^2)$$

$$dV = 4\pi r^2 dr$$

$$\Psi^2 dV = 4\pi r^2 \Psi^2 dr \text{ ---------- } (2.16)$$

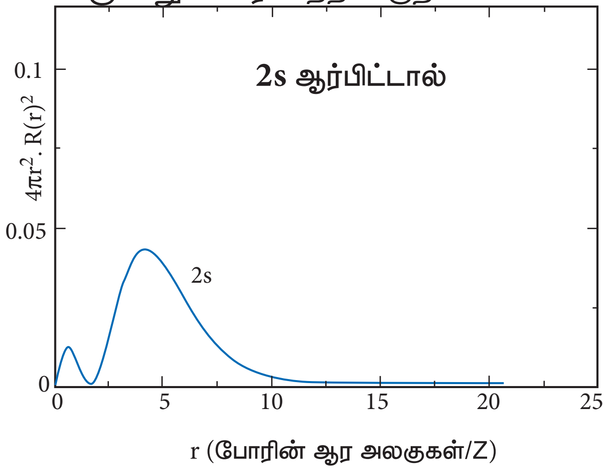
Unit 2.indd 50 23-12-2021 16:18:43

r மதிப்பிற்கு எதிரான $4\pi r^2 . R(r)^2$ – ன் வரைபடம் கீழே கொடுக்கப்பட்டுள்ளது.

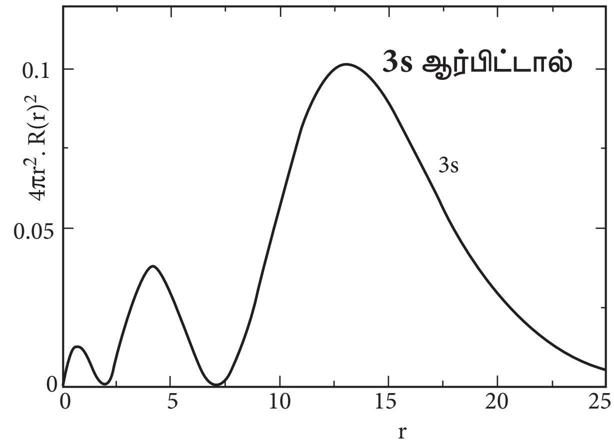


படம் 2.5 ஹைட்ரஜனின் 1s ஆர்பிட்டாலுக்கான $4\pi r^2 . R(r)^2$ Vs r - வரைபடம்

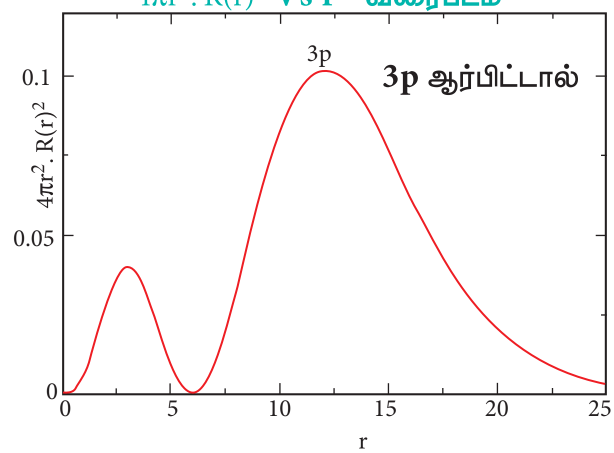
மேற்கண்டுள்ள வரைபடத்தின் மூலம் அணுக்கருவிலிருந்து 0.52Å தொலைவில் அதிகபட்ச நிகழ்த்தகவு அமைந்துள்ளது என அறிய முடிகிறது. இத்தொலைவு போர் ஆரத்திற்குச் சமம். இத்தொலைவில் அணுக்கருவினை சுற்றி, எலக்ட்ரானைக் காண்பதற்கான அதிகபட்ச நிகழ்தகவு உள்ளதை இது குறிப்பிட்டாலும், இத்தொலைவினை தவிர்த்த பிற தொலைவுகளிலும் எலக்ட்ரானை காண்பதற்கான வாய்ப்பு (நிகழ்தகவு) உண்டு. ஹைட்ரஜன் அணுவில் 2s, 3s, 3p மற்றும் 3d ஆர்பிட்டால்களுக்கான ஆர பகிர்வு சார்பினை பின்வருமாறு வரைபடத்தில் குறிப்பிடலாம்.



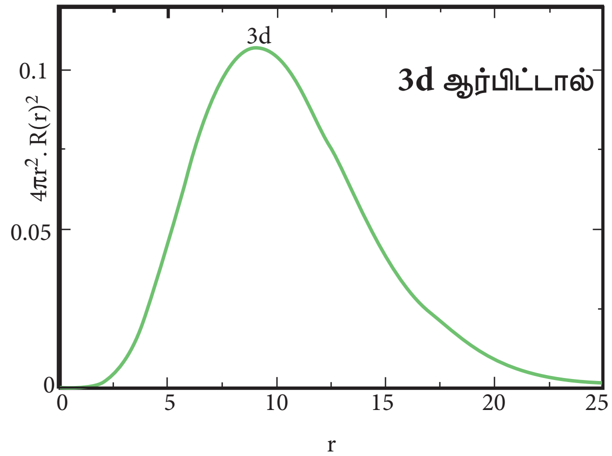
படம் 2.6 (அ) – ஹைட்ரஜனின் 2s ஆர்பிட்டாலுக்கான $4\pi r^2 . R(r)^2$ வரைபடம்



படம் 2.6 (ஆ) – ஹைட்ரஜனின் 3s ஆர்பிட்டாலுக்கான $4\pi r^2 . R(r)^2$ Vs r - வரைபடம்



படம் 2.6 (இ) – ஹைட்ரஜனின் 3p ஆர்பிட்டாலுக்கான $4\pi r^2 . R(r)^2$ Vs r - வரைபடம்



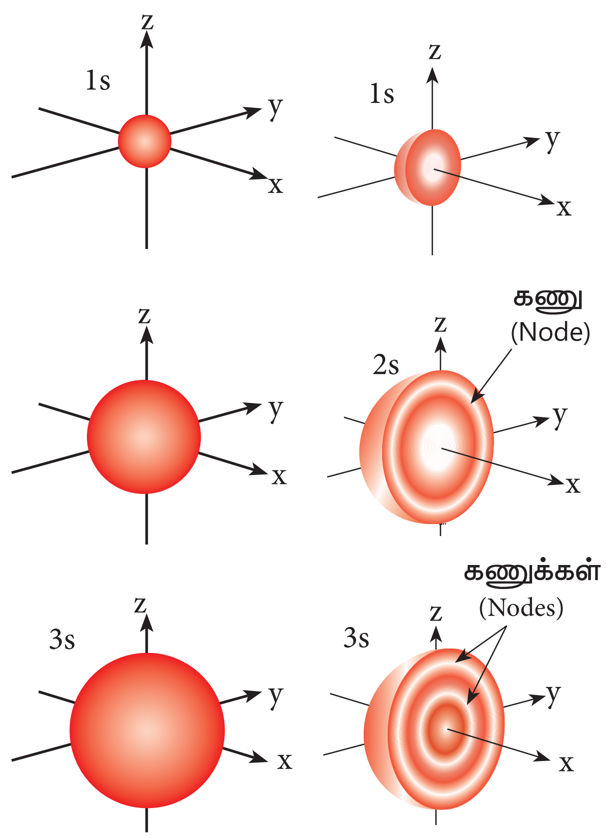
படம் 2.6 (ஈ) – ஹைட்ரஜனின் 3d ஆர்பிட்டாலுக்கான $4\pi r^2 . R(r)^2$ Vs r - வரைபடம்

Unit 2.indd 51 23-12-2021 16:18:43

2s ஆர்பிட்டாலுக்கு, அணுக்கருவிலிருந்து தொலைவு (r) அதிகரிக்கும்போது, நிகழ்தகவு அடர்த்தி முதலில் அதிகரித்து, ஒரு சிறிய பெரும மதிப்பை அடைகிறது. அதன் பின்னர் பூஜ்ஜியத்திற்கு குறைந்து மீண்டும் மற்றுமொரு பெரும மதிப்பினை அடைந்து பின் பூஜ்ய மதிப்பினையடைகிறது. இவ்வாறு **நிகழ்தகவு அடர்த்தி சார்பின் மதிப்பு எப்பகுதியில் பூஜ்யமாகிறதோ அப்பகுதி, கணு புறப்பரப்பு (nodal surface) அல்லது ஆரக்கணு (radial node) என அழைக்கப்படுகிறது.** பொதுவாக, ns–ஆர்பிட்டாலானது (n–1) கணுக்களைப் பெற்றுள்ளன என கண்டறியப்பட்டுள்ளது. அதாவது 2s ஆர்பிட்டால் ஒரு கணுவையும், 3s ஆர்பிட்டால் இரு கணுக்களையும் கொண்டுள்ளது. இது பிற ஆர்பிட்டால்களுக்கும் பொருந்தும். 3p மற்றும் 3d ஆர்பிட்டால்களுக்கான, $4\pi r^2 R(r)^2$ன் வரைபடமானது, இதனைப் போலவே உள்ளது. ஆனால் இந்நேர்வில் ஆர கணுக்களின் எண்ணிக்கை **(n-l-1)** க்குச் சமம். இங்கு 'n' என்பது முதன்மைக் குவாண்டம் எண்ணையும், l என்பது கோண உந்த குவாண்டம் எண்ணையும் குறிப்பிடுகின்றது.

கோணப் பகிர்வு சார்பு (Angular distribution function)

அணுக்கருவை மையத்தில் கொண்டுள்ள ஒரு கோளத்தில் உள்ள, எலக்ட்ரானைக் கண்டறியும் நிகழ்தகவில் ஏற்படும் மாறுபாடு ஆனது கோண உந்தக் குவாண்டம் எண்ணை பொருத்து அமைகிறது. 1s ஆர்பிட்டாலுக்கு $l=0$ மற்றும் $m=0$. மேலும் $f(\theta)=1/\sqrt{2}$ மற்றும் $g(\varphi)=1/\sqrt{2}\pi$ எனவே, கோணபகிர்வு சார்பு $f(\theta)$. $g(\varphi)$ ஆனது $1/2\sqrt{\pi}$-க்குச் சமம். இது கோணம் θ மற்றும் φ- ஐச் சார்ந்து அமைவதில்லை. எனவே, எலக்ட்ரானைக் காண்பதற்கான நிகழ்தகவு அணுக்கருவிலிருந்து உள்ள திசையினைப் பொருத்து அமைவதில்லை. எனவே S ஆர்பிட்டாலின் வடிவம் படம் 2.7ல் கொடுக்கப்பட்டுள்ளவாறு ஒரு சீர்மைக் கோளமாகும்.

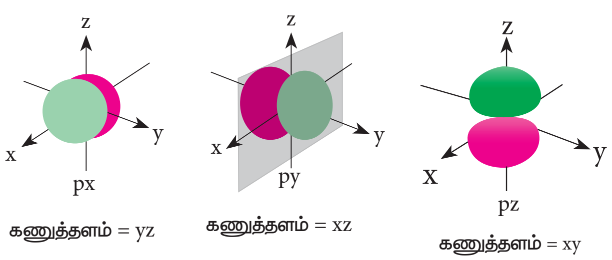


படம் 2.7 1s, 2s மற்றும் 3s ஆர்பிட்டால்களின் வடிவங்கள்

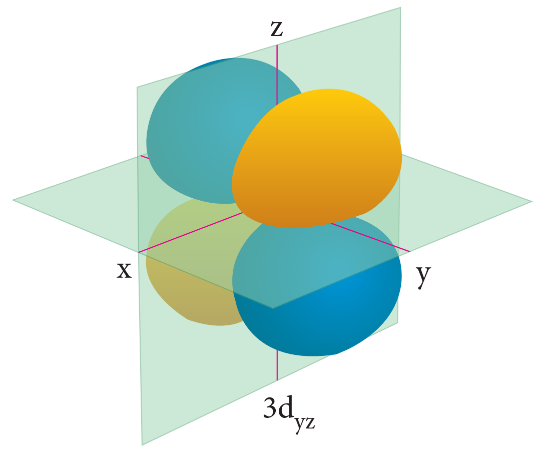
p–ஆர்பிட்டாலுக்கு l = 1, மற்றும் இதற்கு இணையான m மதிப்புகள் முறையே –1,0 மற்றும் +1 ஆகும். இதற்கான கோண பகிர்வு சார்புகள் சிக்கலானவை, மேலும் இங்கு விவரிக்கப்படவில்லை. 'p' ஆர்பிட்டாலின் டம்பல் வடிவம் படம் (2.8)ல் கொடுக்கப்பட்டுள்ளது. 'm' ன் மூன்று மதிப்புகளிலிருந்து மூன்று திசையமைப்புடைய 'p' ஆர்பிட்டால்கள் உள்ளன என அறியமுடிகிறது. இந்த ஆர்பிட்டால்கள் p_x, p_y மற்றும் p_z என குறியிடப்படுகின்றன. ஆர்பிட்டால்களின் கோணப்பகிர்வின் மூலம் p_x p_y மற்றும் p_z, ஆர்பிட்டால்களின் மடல்கள் (lobes) முறையே x, y மற்றும் z அச்சுகளின் வழியே அமைந்துள்ளது என அறியலாம்.

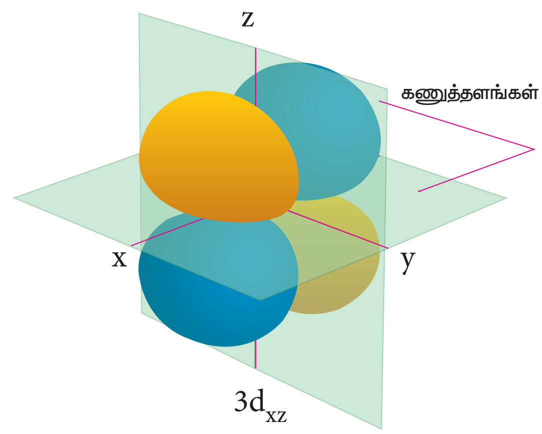
Unit 2.indd 52 23-12-2021 16:18:44

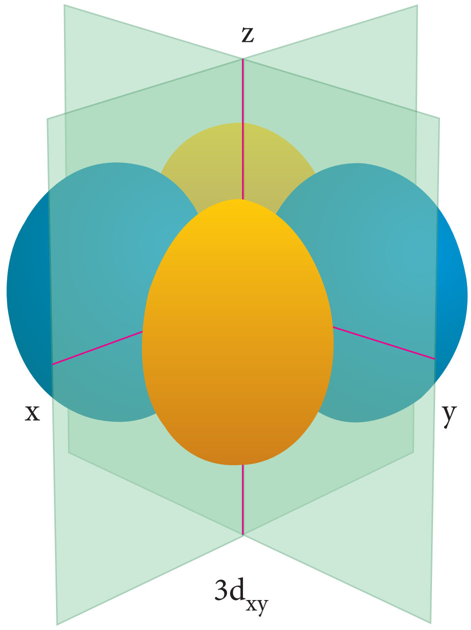
படம் 2.8ல் காட்டப்பட்டுள்ளவாறு 2P ஆர்பிட்டால் ஒரு கணுத்தளத்தினை (nodal plane) பெற்றுள்ளது. d ஆர்பிட்டாலுக்கு l = 2, இதற்கு இணையான m மதிப்புகள் முறையே −2, −1, 0, +1, +2. d ஆர்பிட்டாலானது குளோவர் இலையின் வடிவமைப்பினை ஒத்துள்ளது. m−ன் இந்த ஐந்து மதிப்புகளானது, $d_{x^2-y^2}$, d_{xy}, d_{z^2}, d_{yz}, d_{zx} ஆகிய ஐந்து ஆர்பிட்டால்கள் உள்ளதைக் காட்டுகிறது. படம் (2.9)ல் காணப்பட்டுள்ளவாறு, 3d ஆர்பிட்டால் இரு கணுத்தளங்களை(nodal planes) பெற்றுள்ளன.

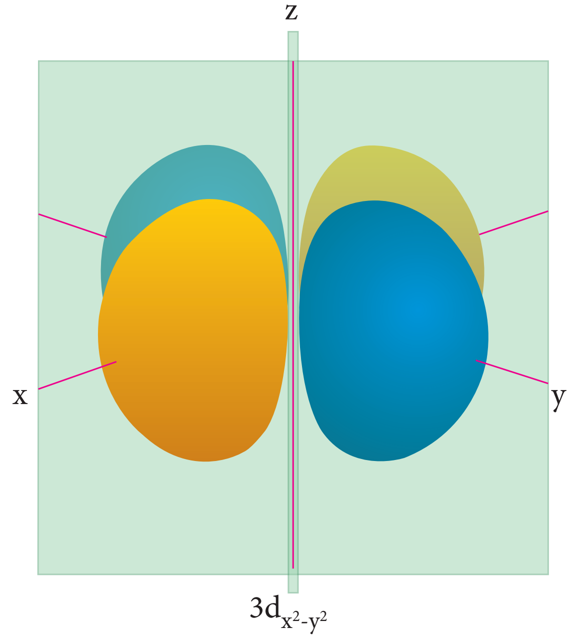


படம் 2.8 - 2p ஆர்பிட்டாலின் வடிவங்கள்

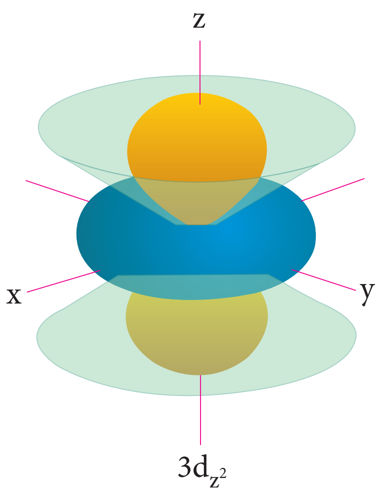






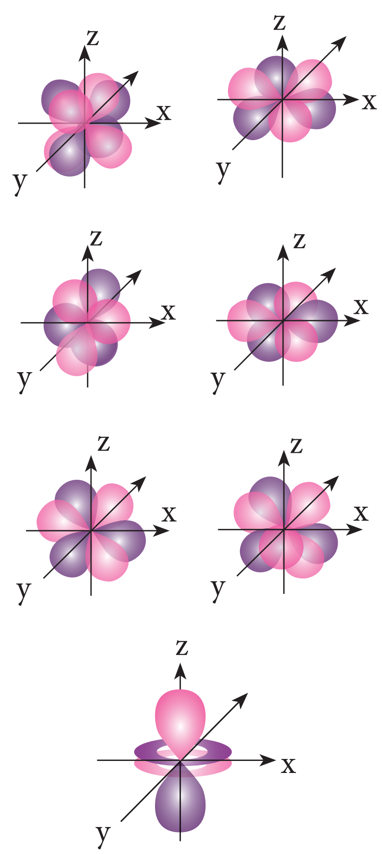


Unit 2.indd 53 23-12-2021 16:18:44



படம் 2.9 -d ஆர்பிட்டாலின் வடிவங்கள்

f ஆர்பிட்டாலுக்கு, l = 3 மற்றும் m மதிப்புகள் முறையே −3, −2, −1, 0, +1, +2, +3 ஆகும். இந்த m மதிப்புகளுக்கு இணையாக ஏழு f ஆர்பிட்டால்கள் $f_{y(3x^2-y^2)}$, $f_{z(x^2-y^2)}$, f_{yz^2}, f_{z^3}, f_{xz^2}, f_{xyz}, $f_{x(x^2-3y^2)}$ காணப்படுகின்றன.



படம் 2.10 -f ஆர்பிட்டாலின் வடிவங்கள்

தன் மதிப்பீடு

3d மற்றும் 4f ஆர்பிட்டால்களில் காணப்படும் ஆர மற்றும் கோண கணுக்களின் எண்ணிக்கையினைக் கணக்கிடுக.

2.5.2. ஆர்பிட்டால்களின் ஆற்றல்கள்

ஹைட்ரஜன் அணுவில் ஒரே ஒரு எலக்ட்ரான் மட்டுமே உள்ளது. இத்தகைய ஒரு எலக்ட்ரானை மட்டுமே பெற்றுள்ள அமைப்பிற்கு, nஆவது வட்டப்பாதையின் உள்ள எலக்ட்ரானின் ஆற்றல் பின்வருமாறு தரப்படுகிறது.

$$E_n = \frac{(-1312.8)\,Z^2}{n^2}\ \text{kJ mol}^{-1}$$

இச்சமன்பாட்டிலிருந்து, ஆற்றலானது முதன்மைக் குவாண்டம் எண்ணை மட்டுமே பொருத்து அமைகிறது என நாம் அறிகிறோம். nன் மதிப்பு அதிகரிக்கும் போது, ஆர்பிட்டாலின் ஆற்றலின் மதிப்பும் அதிகரிக்கும். பல்வேறு ஆர்ப்பிட்டால்களுக்கான ஆற்றலின் வரிசை பின்வருமாறு அமைகிறது.

$1s < 2s = 2p < 3s = 3p = 3d < 4s = 4p = 4d = 4f < 5s = 5p = 5d = 5f < 6s = 6p = 6d = 6f < 7s$

ஹைட்ரஜன் அணுவில் உள்ள ஒருஎலக்ட்ரான் குறைந்தபட்ச ஆற்றலைப் பெற்றுள்ள 1s ஆர்பிட்டாலில் உள்ளது. இந்நிலை இயல்பு ஆற்றல் நிலை (ground state) என அழைக்கப்படுகிறது. இந்த எலக்ட்ரான் சிறிதளவு ஆற்றலை பெறும் போது 2s, 2p போன்ற அதிக ஆற்றலுடைய ஆர்பிட்டால்களுக்குச் செல்லும். இந்த உயர் ஆற்றல் நிலைகள் கிளர்வுற்றநிலைகள் (excited state) என அழைக்கப்படுகின்றன. எனினும் ஹைட்ரஜனைத் தவிர்த்த பிற அணுக்களுக்கு (பல எலக்ட்ரானை கொண்ட அமைப்புகளுக்கு) மேற்கண்டுள்ள ஆற்றல் வரிசை உண்மையல்ல. அத்தகைய

Unit 2.indd 54 23-12-2021 16:18:44

அமைப்புகளுக்கு ஷ்ரோடிங்கர் அலைச் சமன்பாடு சிக்கலானதாகும். இத்தகைய அமைப்பில் உள்ள பல்வேறு ஆர்பிட்டால்களின் ஒப்பீட்டு அளவிலான ஆற்றல் வரிசையினை (n+l) விதி தருகிறது. இவ்விதிப்படி, ஆர்பிட்டாலின் (n+l) மதிப்பு குறைவாக இருப்பின் அதன் ஆற்றலும் குறைவாக இருக்கும். இரு ஆர்பிட்டால்களின் (n+l) மதிப்பு சமமாக இருப்பின், அவ்விரு ஆர்பிட்டால்களில் எந்த ஆர்பிட்டாலுக்கு n மதிப்பு குறைவாக உள்ளதோ அந்த ஆர்பிட்டால் குறைந்த ஆற்றலைப் பெற்றிருக்கும். இவ்விதியினைப் பயன்படுத்தி பல்வேறு ஆர்பிட்டால்களின் ஆற்றலின் வரிசையினை பின்வருமாறு குறிப்பிடலாம்.

அட்டவனை 2.2 பல்வேறுஆர்பிட்டால்களின் (n+l) மதிப்புகள்

ஆர்பிட்டால்	n	l	n+l
1s	1	0	1
2s	2	0	2
2p	2	1	3
3s	3	0	3
3p	3	1	4
3d	3	2	5
4s	4	0	4
4p	4	1	5
4d	4	2	6
4f	4	3	7
5s	5	0	5
5p	5	1	6
5d	5	2	7
5f	5	3	8
6s	6	0	6
6p	6	1	7
6d	6	2	8
7s	7	0	7

(n+l) விதியின் அடிப்படையில், ஆர்பிட்டால்களின் ஆற்றலின் ஏறுவரிசை பின்வருமாறு

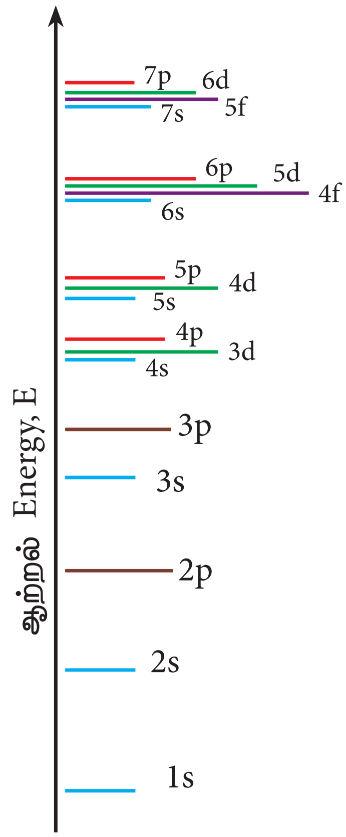
1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s <3d <4p <5s<4d < 5p < 6s<4f< 5d < 6p < 7s < 5f < 6d

ஒரு p ஆர்பிட்டாலுக்கு, மூன்று வகையான திசையமைப்புகள் உள்ளன என்பதனை நாம் அறிவோம். அதாவது p_x, p_y மற்றும் p_z. ஆகிய இம்மூன்று ஆர்பிட்டால்களின் ஆற்றலும் சமம். இவைகள் சம ஆற்றல் ஆர்பிட்டால்கள் (degenerate orbitals) என அழைக்கப்படுகின்றன. எனினும் மின் மற்றும் காந்தப்புலங்களின் இந்த சமஆற்றல் பண்பு (degeneracy) இழக்கப்படுகிறது.

பல எலக்ட்ரான்களைப் பெற்றுள்ள ஒரு அணுவில், அணுக்கருவிற்கும், எலக்ட்ரான்களுக்கும் இடையேயான நிலை மின்னியல் கவர்ச்சி விசை மட்டுமல்லாமல், எலக்ட்ரான்களுக்கிடையேயான விலக்குவிசையும் காணப்படுகிறது. இவ்விருவிசைகளும் ஒன்றுக்கொன்று எதிரெதிர் திசைகளில் செயல்படுகின்றன. இதன் விளைவாக அணுக்கருவானது எலக்ட்ரான் மீது செலுத்தும் கவர்ச்சி விசை குறைகிறது. **எலக்ட்ரானால் உணரப்படும் நிகர அணுக்கரு மின்சுமையானது செயலுறு அணுக்கரு மின் சுமை (effective nuclear charge) என்றழைக்கப் படுகிறது.** இந்த நிகர அணுக்கரு மின்சுமை ஆர்ப்பிட்டால்களின் வடிவமைப்பினைப் பொருத்து அமைகிறது. மேலும் கோண உந்தக் குவாண்டம் எண் 'l' ன் மதிப்பு அதிகரிக்கும் போது இதன் மதிப்பு குறைகிறது.

ஒரு குறிப்பிட்ட கூட்டினுள், உள்ள ஆர்பிட்டால்களில் காணப்படும் எலக்ட்ரானால் உணரப்படும் நிகர அணுக்கரு மின்சுமையின் மதிப்பு s>p>d>f என்ற வரிசையில் அமையும். நிகர அணுக்கரு மின்சுமையின் மதிப்பு அதிகமாக இருப்பின், ஆர்பிட்டால்களின் நிலைப்புத்தன்மை அதிகமாக இருக்கும். எனவே, கொடுக்கப்பட்ட ஆற்றல் மட்டத்தில், ஆர்பிட்டால்களின் ஆற்றலின் வரிசை பின்வருமாறு அமையும். s<p<d<f

Unit 2.indd 55 23-12-2021 16:18:44



படம். 2.11 அணு ஆர்பிட்டால்களின் ஆற்றல்வரிசை

ஒரே வகையான ஆர்பிட்டால்களின் ஆற்றலானது அணு எண் அதிகரிக்கும் போது குறையும். உதாரணமாக ஹைட்ரஜனின் 2s ஆர்பிட்டாலின் ஆற்றலானது, லித்தியத்தின் 2s ஆர்பிட்டாலின் ஆற்றலை விட அதிகம், இதைப் போலவே லித்தியத்தின் 2s ஆர்பிட்டாலின் ஆற்றல் சோடியத்தின் 2s ஆர்பிட்டாலின் ஆற்றலை விட அதிகம். அதாவது, $E_{2s}(H) > E_{2s}(Li) > E_{2s}(Na) > E_{2s}(K)$.

தன்மதிப்பீடு

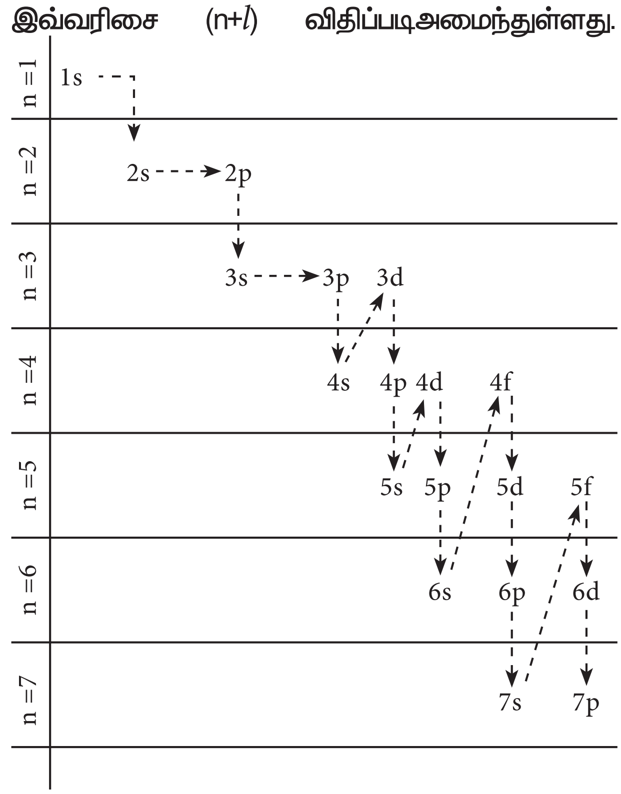
5) ஹைட்ரஜன் அணுவில் உள்ள ஒரு எலக்ட்ரானின் அடிநிலை ஆற்றல் – 13.6.ev. இரண்டாவது கிளர்வுற்ற நிலையில் இந்த எலக்ட்ரானின் ஆற்றல் என்ன?

2.6 ஆர்பிட்டால்கள் நிரப்பப்படுதல்

ஆஃபா தத்துவம், பௌலி தவிர்க்கைத் தத்துவம் மற்றும் ஹூண்ட்விதி ஆகிய விதிகளுக்கிணங்க ஒரு அணுவின் பல்வேறு ஆர்பிட்டால்களில் எலக்ட்ரான்கள் நிரப்பப்படுகின்றன.

2.6.1. ஆஃபாதத்துவம்

ஜெர்மன் மொழியில் ஆஃபா என்ற சொல்லுக்கு கட்டமைத்தல் (building up) என்பது பொருளாகும். இயல்பு ஆற்றல் நிலையில் உள்ள அணுவின், ஆர்பிட்டால்கள் அவற்றின் ஆற்றலின் ஏறுவரிசையில் நிரப்பப்படுகின்றன. அதாவது, எலக்ட்ரான்கள், அவை நிரப்பப்படுவதற்கு வாய்ப்புள்ள ஆர்பிட்டால்களில், எந்த ஆர்பிட்டால் குறைந்த ஆற்றலுடையதோ அந்த ஆர்பிட்டாலில் முதலில் நிரம்பும். குறைவான ஆற்றலுடைய ஆர்பிட்டால் முழுமையாக நிரப்பப்பட்ட பின்னரே, எலக்ட்ரானானது அடுத்த உயர் ஆற்றலுடைய ஆர்பிட்டாலினுள் நுழையும். படம் 2.12ல் ஆஃபா தத்துவத்தின் அடிப்படையில், பல்வேறு ஆர்பிட்டால்களின் நிரப்பப்படும் வரிசை தரப்பட்டுள்ளது. இவ்வரிசை $(n+l)$ விதிப்படிஅமைந்துள்ளது.



படம் 2.12 ஆஃபாதத்துவம்

Unit 2.indd 56 23-12-2021 16:18:45

2.6.2. பௌலி தவிர்க்கை தத்துவம்

ஒரு அணுவில் உள்ள எந்த இரு எலக்ட்ரான்களுக்கும், அவற்றின் நான்கு குவாண்டம் எண்களின் மதிப்பின் தொகுப்பும் ஒன்றாக இருக்காது என்ற தவிர்க்கைத் தத்துவத்தினை பௌலி கூறினார். அதாவது ஒவ்வொரு எலக்ட்ரானும் அதற்கென தனித்த நான்கு குவாண்டம் எண்களின் n,l, m மற்றும் s) மதிப்பினை பெற்றிருக்க வேண்டும் என்பதே இதன் பொருளாகும்

ஹைட்ரஜனில் உள்ள ஒரு தனித்த எலக்ட்ரானிற்கு, நான்கு குவாண்டம் எண்களின் மதிப்புகள், n = 1; l = 0; m = 0 மற்றும் s = +½. ஹீலியத்தின் உள்ள இரு எலக்ட்ரான்களில் ஒரு எலக்ட்ரான் ஹைட்ரஜனைப் போலவே, n = 1, l = 0, m=0 மற்றும் s = +½. மதிப்பினையும், மற்றொரு எலக்ட்ரானைப் பொருத்த வரையில், நான்காவது குவாண்டம் எண் மட்டும் மாறுபட்டு காணப்படுகிறது. அதாவது n = 1, l = 0, m=0 மற்றும் s = –½ . தற்சுழற்சி குவாண்டம் எண் +½ மற்றும் – ½ ஆகிய இருமதிப்புகளை மட்டுமே பெற இயலும் எனநாம் அறிவோம். எனவே, பௌலி தத்துவப்படி, கொடுக்கப்பட்ட ஒரு ஆர்பிட்டாலில் அதிகபட்சமாக இரு எலக்ட்ரான்களை மட்டுமே நிரப்ப முடியும். L கூட்டில் அதிக பட்சமாக காணப்படும் எட்டு எலக்ட்ரான்களுக்கும், நான்கு குவாண்டம் எண்களையும் எழுதுவதன் மூலம் இதனை நாம் புரிந்து கொள்ளமுடியும்.

அட்டவணை 2.3 – L கூட்டில் காணப்படும் எலக்ட்ரான்களுக்கான குவாண்டம் எண்கள்

எலக்ட்ரான்	n	l	m	s
1st	2	0	0	+½
2nd	2	0	0	-½
3rd	2	1	-1	+½
4th	2	1	0	+½
5th	2	1	+1	+½
6th	2	1	-1	-½
7th	2	1	0	-½
8th	2	1	+1	-½

2.6.3. ஹூண்ட்விதி

ஆஃபாதத்துவமானது,பல்வேறுஆர்பிட்டால்களில் எலக்ட்ரான்கள் எவ்வாறு நிரப்பப்படுகின்றன என்பதனை விளக்குகிறது. ஆனால் p_x, p_y, p_z. போன்ற சம ஆற்றலுடைய (degenerate) ஆர்ப்பிட்டல்களில் எலக்ட்ரான்கள் நிரப்பப்படுவது பற்றி அவ்விதியில் ஏதும் குறிப்பிடப்படவில்லை. இந்த ஆர்பிட்டால்கள் எவ்வரிசையில் நிரப்பப்பட வேண்டும்? என்ற வினாவிற்கு உரிய விடையினை ஹூண்ட்விதி தருகிறது.

ஹூண்ட் விதிப்படி,

சம ஆற்றலுடைய ஆர்பிட்டால்களில் எலக்ட்ரான்கள் நிரப்பப்படும் போது, நிரப்பப்படுவதற்கு வாய்ப்புள்ள அனைத்து சமஆற்றலுடைய ஆர்பிட்டால்களும் ஒற்றை எலக்ட்ரானால் நிரப்பப்பட்ட பின்னரே, எலக்ட்ரான் இரட்டையாதல் (electron pairing) நிகழும். மூன்று p ஆர்பிட்டால்கள், ஐந்து d ஆர்பிட்டால்கள் மற்றும் ஏழு f ஆர்பிட்டால்கள் உள்ளன என நாம் அறிவோம். இந்த ஆர்பிட்டால்களில் முறையே, நான்காவது, ஆறாவது மற்றும் எட்டாவது எலக்ட்ரான்கள் நுழையும் போது மட்டுமே எலக்ட்ரான் இரட்டையாதல் துவங்கும்.

உதாரணமாக ஆறு எலக்ட்ரான்களைக் கொண்டுள்ள கார்பன் அணுவினைக் கருதுவோம். ஆஃபாதத்துவத்தின் படி, இதன் எலக்ட்ரான் அமைப்பு $1s^2$, $2s^2$, $2p^2$. இதனை பின்வருமாறு குறிப்பிடலாம்

↑↓	↑↓	↑	↑	
$1s^2$	$2s^2$	$2p_x^{\ 1}$	$2p_y^{\ 1}$	$2p_z^{\ 0}$

இந்நிகழ்வில், எலக்ட்ரான் – எலக்ட்ரான் விலக்கு விசையினை குறைத்திட (சிறுமமாக்கிட) ஹூண்ட் விதிப்படி, ஆறாவது எலக்ட்ரானானது, ஐந்தாவது எலக்ட்ரான் இடம் கொண்டுள்ள p_x ஆர்பிட்டாலில் சென்று இரட்டையாகாமல், p_y ஆர்பிட்டாலுக்குச் செல்கிறது.

தன்மதிப்பீடு

6. Fe^{3+} (Z=26), Mn^{2+} (Z=25) மற்றும் ஆர்கான் (Z=18) ஆகியவற்றின் சிறும ஆற்றல் நிலையில் காணப்படும் தனித்த எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கையினைக் கணக்கிடுக.

2.6.4. அணுக்களின் எலக்ட்ரான் அமைப்பு

ஒரு அணுவில் உள்ள, வெவ்வேறு ஆர்பிட்டால்களில் அந்த அணுவின் எலக்ட்ரான்கள் பங்கிடப்பட்டுள்ளதை குறிப்பிடுவது எலக்ட்ரான் அமைப்பு எனப்படும். ஆஃபாதத்துவம், ஹூண்ட்விதி, பௌலிதத்துவம் ஆகியவற்றின் அடிப்படையில் எலக்ட்ரான் அமைப்பினை எழுதமுடியும். எலக்ட்ரான் அமைப்பானது nl^x என்ற குறியீட்டால் எழுதப்படுகிறது. இங்கு n என்பது முதன்மைக் குவாண்டம் எண். l என்பது ஆர்பிட்டால்களின் எழுத்து வடிவினை குறிப்பிடுகிறது [s(l=0), p (l=1), d(l=2) மற்றும் f(l=3)] மற்றும் x குறிப்பிட்ட ஆர்ப்பிட்டாலில் உள்ள எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கையினைக் குறிப்பிடுகிறது.

ஒரே ஒரு எலக்ட்ரானைக் கொண்டுள்ள ஹைட்ரஜன் அணுவினை நாம் கருதுவோம். ஆஃபா தத்துவத்தின்படி, குறைவான ஆற்றலுடைய 1s ஆர்பிட்டாலில் இந்த எலக்ட்ரான் இடம் கொள்கிறது. இந்நேர்வில் n=1; l=s; x=1. எனவே, எலக்ட்ரான் அமைப்பு $1s^1$ (one –ess–one என கூற வேண்டும்). இந்த அமைப்பிற்கான ஆர்பிட்டால் வரைபடம்.

↑
$1s^1$

ஒன்று முதல் 10 வரையிலான அணு எண்களை கொண்டுள்ள அணுக்களுக்கான எலக்ட்ரான் அமைப்பு மற்றும் ஆர்பிட்டால் வரைபடம்பின்வருமாறு:–

அட்டவணை 2.4 – முதல் 10 தனிமங்களுக்கு எலக்ட்ரான் அமைப்பு மற்றும் ஆர்பிட்டால் வரைபடம்

தனிமம்	அணு எண்	எலக்ட்ரான் அமைப்பு	ஆர்பிட்டால் வரைபடம்
H	1	$1s^1$	[↑] $1s^1$
He	2	$1s^2$	[↑↓] $1s^2$
Li	3	$1s^2\ 2s^1$	[↑↓] $1s^2$ [↑] $2s^1$
Be	4	$1s^2\ 2s^2$	[↑↓] $1s^2$ [↑↓] $2s^2$
B	5	$1s^2\ 2s^2\ 2p^1$	[↑↓] $1s^2$ [↑↓] $2s^2$ [↑][ ][ ] $2p_x^{\ 1}$ $2p_y$ $2p_z$
C	6	$1s^2\ 2s^2\ 2p^2$	[↑↓] $1s^2$ [↑↓] $2s^2$ [↑][↑][ ] $2p_x^{\ 1}$ $2p_y^{\ 1}$ $2p_z$
N	7	$1s^2\ 2s^2\ 2p^3$	[↑↓] $1s^2$ [↑↓] $2s^2$ [↑][↑][↑] $2p_x^{\ 1}$ $2p_y^{\ 1}$ $2p_z^{\ 1}$

Unit 2.indd 58 23-12-2021 16:18:45

O	8	$1s^2\ 2s^2\ 2p^4$	[↑↓] [↑↓] [↑↓] [↑] [↑] $1s^2$ $2s^2$ $2p_x^{\ 2}$ $2p_y^{\ 1}$ $2p_z^{\ 1}$
F	9	$1s^2\ 2s^2\ 2p^5$	[↑↓] [↑↓] [↑↓] [↑↓] [↑] $1s^2$ $2s^2$ $2p_x^{\ 2}$ $2p_y^{\ 2}$ $2p_z^{\ 1}$
Ne	10	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6$	[↑↓] [↑↓] [↑↓] [↑↓] [↑↓] $1s^2$ $2s^2$ $2p_x^{\ 2}$ $2p_y^{\ 2}$ $2p_z^{\ 2}$

குரோமியம், காப்பர் போன்ற சிலஅணுக்களின் எலக்ட்ரான் அமைப்பானது, ஆஃபாதத்துவத்தின் படி எதிர்பார்க்கப்படும் எலக்ட்ரான் அமைப்பிலிருந்து சிறிது வேறுபட்டு காணப்படுகிறது.

குரோமியம் (Z=24) அணுவிற்கு எதிர்பார்க்கப்படும் எலக்ட்ரான் அமைப்பு.

$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^4\ 4s^2$

உண்மையான எலக்ட்ரான் அமைப்பு

$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^5\ 4s^1$

காப்பர் – (Z=29) அணுவிற்கு எதிர்பார்க்கப்படும் எலக்ட்ரான் அமைப்பு

$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^9\ 4s^2$

உண்மையான எலக்ட்ரான் அமைப்பு

$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^{10}\ 4s^1$

மேற்கண்டுள்ளவாறு எலக்ட்ரான் அமைப்பு காணப்படுவதற்கு பகுதியளவு நிரப்பப்பட்ட ஆர்ப்பிட்டால்கள் மற்றும் முழுமையாக நிரப்பப்பட்ட ஆர்பிட்டால்கள் அதிக நிலைப்புத் தன்மையினை பெற்று விளங்கும் தன்மை காரணமாக அமைகிறது. அதாவது p^2, p^5, d^4, d^9, f^6, மற்றும் f^{13} அமைப்புகளைக் காட்டிலும் p^3, p^6, d^5, d^{10}, f^7 மற்றும் f^{14} அமைப்புகள் அதிகநிலைப்புத் தன்மையினைக் கொண்டுள்ளன. இந்த நிலைப்புத் தன்மையின் காரணமாக, ஆஃபா தத்துவப்படி 4s ஆர்பிட்டாலில் இடம் பெறவேண்டிய ஒரு எலக்ட்ரான் குரோமியத்தில் 3d ஆர்பிட்டாலில் இடம் பெறுவதன் மூலம் அதிக நிலைப்புத் தன்மையினை பெறுகிறது. இதைப் போலவே காப்பரும் d ஆர்பிட்டாலில் முழுமையாக நிரப்பட்ட எலக்ட்ரான் அமைப்பினைப் பெற்றுள்ளது.

தன்மதிப்பீடு

7. $4f^2$ என்ற குறியீடு உணர்த்தும் பொருள் யாது? இதில் உள்ள எலக்ட்ரான்களுக்கு, நான்கு குவாண்டம் எண்களின் மதிப்புகளையும் எழுதுக.

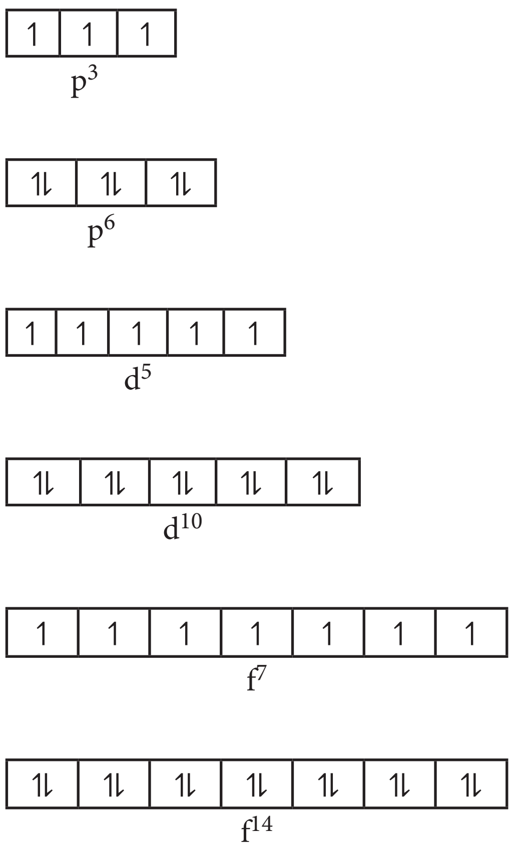
2.6.5 சரிபாதியளவு மற்றும் முழுவதும் நிரப்பப்பட்ட ஆர்பிட்டால்களின் நிலைப்புத் தன்மை

சம ஆற்றலுடைய ஆர்பிட்டால்களில், சரிபாதியளவு மற்றும் முழுவதும் நிரப்பப்பட்ட ஆர்பிட்டால்களின் நிலைப்புத் தன்மையானது, பிற பகுதியளவு நிரப்பப்பட்ட ஆர்பிட்டால்களைக் காட்டிலும் அதிகம். இதனை சமச்சீர்தன்மை (symmetry) மற்றும் பரிமாற்ற ஆற்றல் (exchange energy) ஆகியவற்றின் அடிப்படையில் விளக்கலாம். எடுத்துக்காட்டாக குரோமியம் $[Ar]3d^4\ 4s^2$ என்ற எலக்ட்ரான் அமைப்பினை பெற்றிருக்காமல், $[Ar]3d^5\ 4s^1$ என்ற எலக்ட்ரான் அமைப்பினைப் பெற்றுள்ளது. இதற்கு எலக்ட்ரான்களின் சமச்சீரான பங்கீடு மற்றும் d எலக்ட்ரான்களின் பரிமாற்ற ஆற்றல் ஆகியன காரணமாக அமைகின்றன.

Unit 2.indd 59 23-12-2021 16:18:45

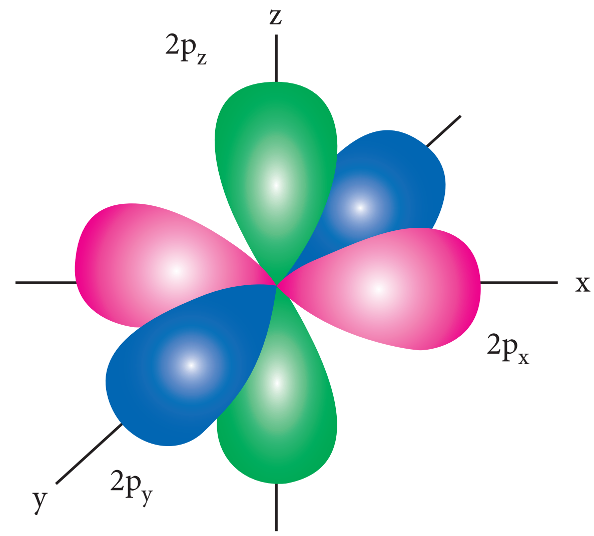
எலக்ட்ரான்களின் சமச்சீரான பங்கீடு

சமச்சீர்த் தன்மையானது, நிலைப்புத் தன்மையினைத் தருகிறது. படம் 2.13ல் கொடுக்கப்பட்டள்ளவாறு சரிபாதியளவு மற்றும் முழுமையாக நிரப்பப்பட்ட அமைப்புகளில், எலக்ட்ரான்கள் சமச்சீராக பங்கிடப்பட்டுள்ளன. எனவே, அவைகள், சமச்சீர்த் தன்மையற்ற அமைப்புகளைக் காட்டிலும் அதிக நிலைப்புத் தன்மையினை பெற்றுள்ளன.



படம் 2.13 சரிபாதியளவு மற்றும் முழுமையாக நிரப்பப்பட்ட p, d, f ஆர்பிட்டால்கள்

p_x,p_y மற்றும் p_z போன்ற ஆர்பிட்டால்கள் சமஆற்றலைப் பெற்றிருக்கின்றன. மேலும் அவற்றின் புறவெளி திசையமைப்பு (படம் 2.14) ல் காட்டியவாறு வெவ்வேறு திசைகளில் அமைகின்றன. சமச்சீரான பங்கீட்டினால் ஒரு எலக்ட்ரான் மற்றொரு எலக்ட்ரானை மறைக்கும் (shielding) விளைவு, ஒப்பீட்டு அளவில் குறைவாகும் எனவே, எலக்ட்ரான்கள் அணுக்கருவால் அதிக கவர்ச்சி விசையுடன் ஈர்க்கப்படுகின்றன. இதனால் நிலைப்புத் தன்மை அதிகரிக்கின்றது.



படம் 2.14 சம ஆற்றலுடைய p ஆர்பிட்டாலின் வடிவங்கள்

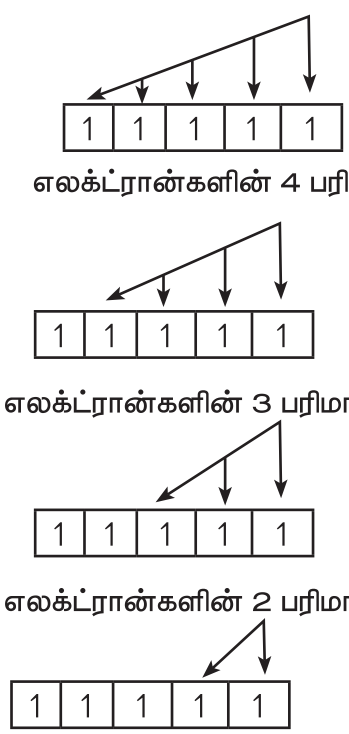
பரிமாற்ற ஆற்றல் (Exchange energy)

சம ஆற்றலுடைய ஆர்பிட்டால்களில், இரண்டு அல்லது அதற்கு மேற்பட்ட ஒரே தற்சுழற்சி உடைய எலக்ட்ரான்கள் இருக்குமாயின், அவைகளினுடைய இடங்களை பரிமாற்றிக் கொள்வதற்கு வாய்ப்பு உள்ளது. பரிமாற்றம் அடையும்நிகழ்வின் போது, ஆற்றலானது வெளியிடப்படுகிறது. மேலும் வெளியிடப்படும் ஆற்றல் பரிமாற்ற ஆற்றல் (exchange energy) என அழைக்கப்படுகிறது. பரிமாற்றங்களின் எண்ணிக்கை அதிகமாக இருப்பதற்கு வாய்ப்பு இருப்பின், வெளியிடப்படும் ஆற்றலின் மதிப்பும் அதிகமாக இருக்கும். அதிக எண்ணிக்கையில் பரிமாற்றங்கள் நிகழ்வதற்கு சரிபாதியளவு மற்றும் முழுமையாக நிரப்பப்பட்டுள்ள நேர்வுகளில் மட்டுமே, வாய்ப்புகள் அதிகம்.

எடுத்துக்காட்டாக, குரோமியத்தின் எலக்ட்ரான் அமைப்பு $[Ar]3d^5\ 4s^1$ ஆகும். இதில் 3d ஆர்பிட்டாலானது

Unit 2.indd 60 23-12-2021 16:18:45

சரிபாதியளவு நிரப்பப்பட்டுள்ளது. மேலும் படம் (2.15) ல் கொடுக்கப்பட்டுள்ளவாறு பத்து பரிமாற்றங்கள் நிகழ்வதற்கு வாய்ப்புகள் உள்ளன. மாறாக, $[Ar]3d^4\ 4s^2$ அமைப்பிற்கு, ஆறு பரிமாற்றங்கள் மட்டுமே நிகழ்வதற்கு வாய்ப்புகள் உள்ளன. எனவே சரிபாதியளவு நிரப்பப்பட்ட அமைப்பிற்கு பரிமாற்ற ஆற்றல் அதிகம் இது சரி பாதியளவு நிரப்பப்பட்ட $3d$ ஆர்பிட்டால்களின் நிலைப்புத் தன்மையினை அதிகரிக்கிறது. சம ஆற்றலுடைய ஆர்பிட்டால்களில் ஒற்றை எலக்ட்ரான் நிரப்பப்படுவதற்கு ஏதுவாக காலியான ஆர்பிட்டால்கள் இருக்கும் வரை எலக்ட்ரான் இரட்டையாதல் நிகழாது என்ற ஹுண்ட்விதிக்கு அடிப்படையாக பரிமாற்ற ஆற்றலானது அமைகிறது.

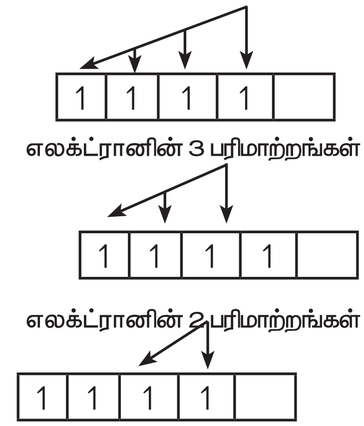


எலக்ட்ரானின் 1 பரிமாற்றம்

ஒட்டுமொத்த எலக்ட்ரான் பரிமாற்றங்கள்

$(4+3+2+1 = 10)$

படம் 2.14 (அ) – குரோமியத்தின் d^5 ஆர்பிட்டால்களில் பரிமாற்றத்திற்கான வாய்ப்புகள்



எலக்ட்ரானின் 1 பரிமாற்றம்

ஒட்டுமொத்த எலக்ட்ரான் பரிமாற்றங்கள்

$(3+2+1 = 6)$

படம் 2.14 (ஆ) – குரோமியத்தின் d^4 ஆர்பிட்டால்களில் பரிமாற்றத்திற்கான வாய்ப்புகள்

தன் மதிப்பீடு

8) Ni^{2+} அல்லது Fe^{3+} அதிக நிலைப்புத் தன்மையுடைய எலக்ட்ரான் அமைப்பினை பெற்றுள்ளது எது?

பாடச்சுருக்கம்

துணை அணுத்துகள்கள் கண்டறியப்படும் வரை அணுவானது மேலும் பிரிக்க முடியாத துகள் என்று கருதப்பட்டு வந்தது. J.J. தாம்சன் என்பவர், அணுவானது நேர்மின்சுமையுடைய கோளவடிவினை பெற்றுள்ளது எனவும் அதில் எலக்ட்ரான்கள் பொதிந்து வைக்கப்பட்டுள்ளன எனவும் கூறினார் எனினும் இவரது கொள்கை அணுவின் நிலைப்புத் தன்மையினை விளக்க வில்லை. ரூதர்போர்டு தனது α கதிர் சிதறல் ஆய்வின் மூலம், அணுக்கரு என்ற ஒன்றை அறிமுகப்படுத்தினார். இவரது கொள்கைப்படி அணுகருவினை சுற்றி வட்டப் பாதையில் அதிக வேகத்தில் எலக்ட்ரான்கள் சுற்றி வருகின்றன. இக்கொள்கையும் அணுவின்

Unit 2.indd 61 23-12-2021 16:18:45

நிலைப்புத்தன்மையை விளக்கவில்லை. எலக்ட்ரானின் ஆற்றலானது வரையறுக்கப் பட்ட மதிப்புகளை மட்டுமே பெறும் என்ற கருத்தின் அடிப்படையில் ரூதர்ஃபோர்டு மாதிரியை போர் மாற்றியமைத்து நிலை வட்டப் பாதைகள் என்ற கருத்தினை அறிமுகப்படுத்தினார். அனைத்துப் பருப்பொருட்களும் ஈரியல்புத் தன்மையினைப் பெற்றுள்ளன என லூயிஸ் டிபிராக்ளி முன் மொழிந்தார். அதாவது அவைகள் துகள் மற்றும் அலை ஆகிய இரண்டின் பண்புகளையும் பெற்றுள்ளன. டிபிரக்ளி அலை நீளம் $\lambda = h / mv = h / \sqrt{2mev}$ ஆனது எலக்ட்ரானைப் போன்ற நுண் துகளுக்கு முக்கியத்துவம் உடையது. டேவிசன் ஜெர்மர் சோதனை மூலமும் எலக்ட்ரான் அலைத் தன்மையினை பெற்றுள்ளது உறுதிபடுத்தப்பட்டது. எலக்ட்ரானைப் போன்ற நுண்துகளுக்கு இணை மாறிகளான நிலை மற்றும் உந்தம் போன்றவற்றை ஒரே நேரத்தில் மிகவும் துல்லியமாகக் கண்டறிய இயலாது, அவ்வாறு அளவிடுவதில் நிச்சயமற்ற தன்மை காணப்படுகிறது. இக்கொள்கை ஹெய்சன்பர்கின் நிச்சயமற்ற தன்மை கோட்பாடு என அறியப்படுகிறது. இதனை $\Delta x.\Delta p \geq h/4\pi$. எனக்குறிப்பிடலாம்.

டிபிராக்ளி கோட்பாடு மற்றும் ஹெய்சன்பர்கின் நிச்சயமற்ற தன்மை ஆகியவை, குவாண்டம் இயக்கவியல் அடிப்படையிலான அணுமாதிரி உருவாவதற்கு வித்திட்டன. எர்வின் ஷ்ரோடிங்கர் எலக்ட்ரான்களுக்கான ஒரு அலைச்சமன்பாட்டினை உருவாக்கினார். அச்சமன்பாடு $\hat{H}\psi = E\psi$ எனக் குறிப்பிடப்படுகின்றது.

இது ஒரு இரண்டாம் படியுடைய வகைக்கெழுச் சமன்பாடாகும். H, He^{+} போன்ற ஒற்றை எலக்ட்ரானை பெற்றுள்ள அமைப்புகளுக்கு, இச்சமன்பாட்டிற்கு தீர்வு காண்பது கடினமானதல்ல. ஆனால் பல எலக்ட்ரான்களைக் கொண்ட அமைப்பிற்கு இச்சமன்பாட்டிற்கு. தீர்வு காண்பது சிக்கல் நிறைந்ததாகும் ஷ்ரோடிங்கர் சமன்பாடு, குறிப்பிட்ட சில ஆற்றல் மதிப்புகளுக்கு தீர்வு காணத்தக்கதாகும். இத்தகைய ஆற்றல் மதிப்புகள் ஐகன் மதிப்புகள் எனப்படுகின்றன. இந்த ஐகன் மதிப்புகளோடு தொடர்புடைய அலைச்சார்புகள் அணு ஆர்பிட்டால்கள் என அழைக்கப்படுகின்றன. அலைச்சார்பு Ψ ஆனது எத்தகைய இயற் முக்கியத்துவத்தினையும் பெற்றிருப்பதில்லை எனினும், $|\Psi|^2$ ஆனது அணுக்கருவினை சுற்றி எலக்ட்ரான்களை காண்பதற்கான நிகழ்தகவோடு தொடர்புடையது. எனவே, குவாண்டம் இயக்கவியல் நமக்கு ஆர்பிட்டால் என்பதை அறிமுகப்படுத்துகிறது. ஆர்பிட்டால் என்பது, அணுக்கருவினைச் சுற்றி முப்பரிமான வெளியில் எலக்ட்ரான்களை காண்பதற்கு அதிக நிகழ்தகவினை பெற்றுள்ள பகுதியாகும். ஆர்பிட்டாலில் இடம் கொண்டுள்ள எலக்ட்ரானை, முதன்மைக் குவாண்டம் எண் (n) துணைக் கூட்டினை குறிக்கும் கோண உந்தக் குவாண்டம் எண் (l) புறவெளியில் ஆர்பிட்டால்களின் திசையமைப்பினைக் குறிப்பிடும் காந்தக் குவாண்டம் எண் (m) எலக்ட்ரான்களின் தற்சுழற்சியை குறிப்பிடும் தற்சுழற்சிக் குவாண்டம் எண் (s) ஆகிய நான்கு குவாண்டம் எண்களால் குறிப்பிட இயலும். ஒற்றை எலக்ட்ரான் அமைப்பிற்கான, ஷ்ரோடிக்கர் சமன்பாட்டின் தீர்வினை கோளக துருவ ஆயஅச்சுகளில் (r, θ, φ) பின்வருமாறு குறிப்பிடலாம் $\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r).f(\theta).g(\varphi)$ இங்கு $R(r)$ என்பது ஆர அலைச்சார்பு, மற்ற இரு சார்புகளும் கோண அலைச்சார்புகள் என அழைக்கப்படுகின்றன. $4\pi r^2$. $\mathbf{R(r)^2}$ **Vs r** ன் வரைபடமானது, ஆர பகிர்வு வளைகோடுகளைத் தருகிறது. ஆரகணுக்களின் (radial node) எண்ணிக்கையினை (n–l–1) ன் மூலமும் கோணக்

Unit 2.indd 62 23-12-2021 16:18:46

கணுக்களின் எண்ணிக்கையினை l ன் மூலமும் கணக்கிடலாம் கோணப்பங்கீட்டு வளைகோடுகள், ஆர்பிட்டால்களின் புறப்பரப்பு எல்லை (boundary surface) வரைபடத்தினை தருகிறது.

S ஆர்பிட்டால் சீரான கோளவடிவத்தினையும், d ஆர்பிட்டால் குளோவர் இலை வடிவத்தினையும் பெற்றிருக்கும். எலக்ட்ரான்கள் ஆர்பிட்டால்களில் நிரம்பும் போது, ஆர்பிட்டால்களின் ஆற்றலின் ஏறுவரிசையில் நிரம்புகிறது. இது ஆஃபாதத்துவம் எனப்படும். பல்வேறு ஆர்பிட்டால்களின் ஆற்றலின் ஏறுவரிசை (n+l) விதி மூலம் தரப்படுகிறது. இவ்விதிப்படி, ஒரு ஆர்பிட்டாலின் (n+l) மதிப்பு குறைவாக இருப்பின் அதன் ஆற்றலும் குறைவாக இருக்கும். இரு ஆர்பிட்டால்களின் (n+l) மதிப்புகள் சமமாக இருப்பின், அவ்விரு ஆர்பிட்டால்களுள் குறைவான n மதிப்பினை பெற்றுள்ள ஆர்பிட்டாலின் ஆற்றல் குறைவாகும். பௌலி தவிர்க்கை தத்துவப்படி, ஒரு ஆர்பிட்டாலில் நிரப்பப்படும் அதிக பட்ச எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை இரண்டு. சம ஆற்றலுடைய ஆர்பிட்டால்களில் எலக்ட்ரான்கள் நிரப்பப்படும் போது, நிரப்பப்படுவதற்கு வாய்ப்புள்ள அனைத்து சமஆற்றலுடைய ஆர்பிட்டால்களும் ஒற்றை எலக்ட்ரானால் நிரப்பப்பட்ட பின்னரே, எலக்ட்ரான் இரட்டையாதல் (electron pairing) நிகழும். இது ஹுண்ட்விதி எனப்படும். மேற்கண்டுள்ள இவ்விதிகளின் அடிப்படையில், அணுக்களின் எலக்ட்ரான் அமைப்பினை எழுதமுடியும். சமஆற்றலுடைய ஆர்பிட்டால்களில், சரிபாதியளவு மற்றும் முழுவதும் நிரப்பப்பட்ட ஆர்பிட்டால்கள் பிற பகுதியளவு நிரப்பப்பட்ட ஆர்பிட்டால்களைக் காட்டிலும் அதிக நிலைப்புத் தன்மையினை பெற்று விளங்குகின்றன. இதற்கு சமச்சீர் தன்மை மற்றும் பரிமாற்ற ஆற்றல் ஆகியன காரணமாக அமைகின்றன.

Unit 2.indd 63 23-12-2021 16:18:46

மதிப்பீடு :

I. சரியான விடையினைத் தெரிவு செய்க

1) M^{2+} அயனியின் எலக்ட்ரான் அமைப்பு $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^6$ அதன் அணு நிறை 56 எனில் M என்ற அணுவின் அணுக்கரு பெற்றிருக்கும் நியூட்ரான்களின் எண்ணிக்கை

அ) 26 ஆ) 22 இ) 30 ஈ) 24

2) 45 nm அலைநீளம் உடைய ஒளியின் ஆற்றல்

அ) $6.67 \times 10^{15} J$ ஆ) $6.67 \times 10^{11} J$ இ) $4.42 \times 10^{-18} J$ ஈ) $4.42 \times 10^{-15} J$

3. இரு கதிர்வீச்சின் ஆற்றல்கள் E_1 மற்றும் E_2 முறையே 25 eV மற்றும் 50 eV அவைகளின் அலைநீளங்கள் $\lambda 1$ மற்றும் $\lambda 2$ ஆகியவற்றிற்கு இடையேயானத் தொடர்பு

அ) $\frac{\lambda_1}{\lambda_2} = 1$ ஆ) $\lambda_1 = 2\lambda_2$ இ) $\lambda_1 = \sqrt{25 \times 50}\ \lambda_2$ ஈ) $2\lambda_1 = \lambda_2$

4. மின்புலத்தில் நிறமாலைக் கோடுகள் பிரிகையடையும் விளைவு

அ)சீமன் விளைவு ஆ) மறைத்தல் விளைவு

இ) காம்ப்டன் விளைவு ஈ) ஸ்டார்க் விளைவு

5. $E = -2.178 \times 10^{-18} J\ (z^2/n^2)$ என்ற சமன்பாட்டின் அடிப்படையில், சில முடிவுகள் தரப்பட்டுள்ளன. அவற்றுள் சரியாக இல்லாதது எது? (NEET)

அ) எலக்ட்ரானானது ஒரு ஆர்பிட்டிலிருந்து மற்றொரு ஆர்பிட்டிற்கு மாறும்போது, ஆற்றல் மாறுபாட்டினை கணக்கிட இச்சமன்பாட்டினைப் பயன்படுத்தலாம்.

ஆ) n= 6 வட்டப்பாதையில் இருப்பதைக் காட்டிலும் n= 1 ல் எலக்ட்ரானானது அதிக எதிர்குறி ஆற்றலைப் பெற்றிருக்கும். இதற்கு எலக்ட்ரானானது சிறிய அனுமதிக்கப்பட்ட வட்டப்பாதையில் (ஆர்பிட்) உள்ளபோது வலிமைக்குறைவாக பிணைக்கப்பட்டுள்ளது என பொருள்.

இ) இச்சமன்பாட்டில் உள்ள எதிர்குறியானது, அணுக்கருவோடு எலக்ட்ரான் பிணைக்கப்பட்டுள்ளபோது உள்ள ஆற்றலானது, எலக்ட்ரான்கள் அணுக்கருவிலிருந்து ஈறிலாத் தொலைவில் உள்ளபோது பெற்றுள்ள ஆற்றலைக் காட்டிலும் குறைவு என்ற பொருளைத் தருகிறது.

ஈ) n ன் மதிப்பு அதிகமாக இருப்பின், ஆர்பிட்டால் ஆர மதிப்பும் அதிகம்.

6) போர் அணுக்கொள்கையின் அடிப்படையில், ஹைட்ரஜன் அணுவில் பின்வரும் எந்தப் பரிமாற்றம் குறைவான ஆற்றலுடைய போட்டானைத் தரும்.

அ) n = 6 இல் இருந்து n = 1   ஆ) n = 5 இல் இருந்து n = 4

இ) n = 5 இல் இருந்து n = 3   ஈ) n = 6 இல் இருந்து n = 5

7) கூற்று: He^+ ன் நிறமாலையானது, ஹைட்ரஜனின் நிறமாலையினை ஒத்திருக்கும்.
காரணம்: He^+ ம் ஒரு எலக்ட்ரானைக் கொண்ட ஒரு அமைப்பாகும்.

அ) கூற்று மற்றும் காரணம் இரண்டும் சரியானது. காரணமானது, கூற்றிற்கு சரியான விளக்கமாகும்.

ஆ) கூற்று மற்றும் காரணம் இரண்டும் சரியானது. ஆனால், காரணமானது, கூற்றிற்கு சரியான விளக்கமல்ல.

இ) கூற்று சரி காரணம் தவறு

ஈ) கூற்று மற்றும் காரணம் இரண்டும் தவறு.

8) பின்வரும் d ஆர்பிட்டால் இணைகளில் எலக்ட்ரான் அடர்த்தியினை அச்சுகளின் வழியே பெற்றிருப்பது எது?

அ) d_{z^2}, d_{xz} ஆ) d_{xz}, d_{yz} இ) $d_{z^2}, d_{x^2-y^2}$ ஈ) $d_{xy}, d_{x^2-y^2}$

9) ஒரே ஆர்பிட்டாலில் உள்ள இரு எலக்ட்ரான்களையும் வேறுபடுத்தி அறிய உதவுவது

அ) கோண உந்தக் குவாண்டம் எண்

ஆ) தற்சுழற்சிக் குவாண்டம் எண்

இ) காந்தக் குவாண்டம் எண்

ஈ) ஆர்பிட்டால் குவாண்டம் எண்

10. Eu (அணு எண் 63), Gd (அணு எண் 64) மற்றும் Tb (அணு எண் 65) ஆகியவற்றின் எலக்ட்ரான் அமைப்புகள் முறையே (NEET– Phase II)

அ) $[Xe]\ 4f^6\ 5d^1\ 6s^2$, $[Xe]\ 4f^7\ 5d^1\ 6s^2$ மற்றும் $[Xe]\ 4f^8\ 5d^1\ 6s^2$

ஆ) $[Xe]\ 4f^7, 6s^2$, $[Xe]\ 4f^7\ 5d^1\ 6s^2$ மற்றும் $[Xe]\ 4f^9\ 6s^2$

இ) $[Xe]\ 4f^7, 6s^2$, $[Xe]\ 4f^8\ 6s^2$ மற்றும் $[Xe]\ 4f^8\ 5d^1\ 6s^2$

ஈ) $[Xe]\ 4f^6\ 5d^1\ 6s^2$, $[Xe]\ 4f^7\ 5d^1\ 6s^2$ மற்றும் $[Xe]\ 4f^9\ 6s^2$

Unit 2.indd 65   23-12-2021 16:18:46

11) ஒரு துணைக்கூட்டில் உள்ள அதிகபட்சமான எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கையினை குறிப்பிடுவது

அ) $2n^2$ ஆ) $2l + 1$ இ) $4l + 2$ ஈ) மேற்கண்டுள்ள எதுவுமில்லை

12) d– எலக்ட்ரானுக்கான, ஆர்பிட்டால் கோண உந்த மதிப்பானது

அ) $\frac{\sqrt{2}h}{2\pi}$ ஆ) $\frac{\sqrt{2h}}{2\pi}$ இ) $\frac{\sqrt{2\times4}\,h}{2\pi}$ ஈ) $\frac{\sqrt{6}\,h}{2\pi}$

13) n = 3, l= 1 மற்றும் m = –1ஆகிய குவாண்டம் எண்களின் தொகுப்பினை அதிகபட்சமாக எத்தனை எலக்ட்ரான்கள் பெற்றிருக்க முடியும்?

அ) 4 ஆ) 6 இ) 2 ஈ) = 10

14) கூற்று: 3p ஆர்பிட்டாலுக்கான ஆர மற்றும் கோண கணுக்களின் எண்ணிக்கை முறையே 1, 1
காரணம்: ஆர மற்றும் கோண கணுக்களின் எண்ணிக்கை முதன்மைக் குவாண்டம் எண்ணை மட்டுமே பொறுத்து அமையும்

அ) கூற்று மற்றும் காரணம் இரண்டும் சரியானது. காரணமானது, கூற்றிற்கு சரியான விளக்கமாகும்.

ஆ) கூற்று மற்றும் காரணம் இரண்டும் சரியானது. ஆனால், காரணமானது, கூற்றிற்கு சரியான விளக்கமல்ல.

இ) கூற்று சரி காரணம் தவறு

ஈ) கூற்று மற்றும் காரணம் இரண்டும் தவறு.

15) n=3 என்ற முதன்மைக் குவாண்டம் எண்ணை பெற்றிருக்கும் ஆர்ட்டால்களின் மொத்த எண்ணிக்கை

அ) 9 ஆ)8 இ) 5 ஈ)7

16) n=6 எனில், எலக்ட்ரான்கள் நிரப்பப்படும் சரியான வரிசை

அ) $ns \rightarrow (n-2)f \rightarrow (n-1)d \rightarrow np$ ஆ) $ns \rightarrow (n-1)d \rightarrow (n-2)f \rightarrow np$

இ) $ns \rightarrow (n-2)f \rightarrow np \rightarrow (n-1)d$ ஈ) இவை எதுவும் சரியல்ல

17) பின்வரும் குவாண்டம் எண்களின் தொகுப்பினைக் கருதுக.

	n	l	m	s
(i)	3	0	0	$+\frac{1}{2}$
(ii)	2	2	1	$-\frac{1}{2}$
(iii)	4	3	−2	$+\frac{1}{2}$
(iv)	1	0	−1	$+\frac{1}{2}$
(v)	3	4	3	$-\frac{1}{2}$

பின்வரும் எந்த குவாண்டம் எண்களின் தொகுப்பு சாத்தியமற்றது?

அ) (i), (ii), (iii) மற்றும் (iv)
ஆ) (ii), (iv) மற்றும் (v)

இ) (i) மற்றும் (iii)
ஈ) (ii), (iii) மற்றும் (iv)

18) அணு எண் 105 உடைய அணுவில் உள்ள எத்தனை எலக்ட்ரான்கள் $(n+l) = 8$ என்ற மதிப்பினை பெற்றிருக்க முடியும்.

அ) 30 ஆ) 17 இ) 15 ஈ) தீர்மானிக்க இயலாது

19) $3d_{xy}$ ஆர்பிட்டாலில் yz தளத்தில் எலக்ட்ரான் அடர்த்தி

அ) பூஜ்யம் ஆ) 0.50 இ) 0.75 ஈ) 0.90

20) நிலை மற்றும் உந்தத்தின் நிச்சயமற்றத் தன்மை சமம் எனில், அதன் திசைவேகத்தின் குறைந்தபட்ச நிச்சயமற்றத் தன்மை

அ) $\frac{1}{m}\sqrt{\frac{h}{\pi}}$ ஆ) $\sqrt{\frac{h}{\pi}}$ இ) $\frac{1}{2m}\sqrt{\frac{h}{\pi}}$ ஈ) $\frac{h}{4\pi}$

21) 100 cm s^{-1} வேகத்தில் இயங்கும் 100g நிறையுடைய துகள் ஒன்றின் டி–பிராக்ளி அலைநீளம்

அ) 6.6×10^{-29} cm
ஆ) 6.6×10^{-30} cm

இ) 6.6×10^{-31} cm
ஈ) 6.6×10^{-32} cm

Unit 2.indd 67 23-12-2021 16:18:48

22) டியூட்ரியத்தின் திசைவேகம், α – துகளைக் காட்டிலும் ஐந்து மடங்காக இருக்கும்போது, டியூட்ரியம் அணுவிற்கும் α – துகளிற்கும் இடையேயான டீபிராக்ளி அலைநீளங்களின் விகிதம்

அ) 4 ஆ) 0.2 இ) 2.5 ஈ) 0.4

23) ஹைட்ரஜன் அணுவின் மூன்றாம் வட்டப்பாதையின் (orbit) ஆற்றல் மதிப்பு –E அதன் முதல் வட்டப்பாதையின் (orbit) ஆற்றல் மதிப்பு

அ) –3E ஆ) $-E/3$ இ) $-E/9$ ஈ) –9E

24. காலத்தைச் சார்ந்து அமையாத ஷ்ரோடிங்கர் அலைச் சமன்பாடானது

அ) $\hat{H}\psi = E\psi$

ஆ) $\nabla^2\psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E+V)\psi = 0$

இ) $\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{h^2}(E-V)\psi = 0$

(ஈ) இவை அனைத்தும்

25. பின்வருவனவற்றுள், ஹெய்சன் பர்கின் நிச்சயமற்றத் தன்மையினைக் குறிப்பிடாத சமன்பாடு எது?

அ) $\Delta x . \Delta p \geq h/4\pi$

ஆ) $\Delta x . \Delta v \geq h/4\pi m$

இ) $\Delta E . \Delta t \geq h/4\pi$

(ஈ) $\Delta E . \Delta x \geq h/4\pi$

II. பின்வரும் வினாக்களுக்கு சுருக்கமான விடையளி:

26. ஆர்பிட்டாலின் வடிவம், ஆற்றல், திசையமைப்பு, உருவளவு ஆகியவற்றினை குறிப்பிடும் குவாண்டம் எண்கள் எவை?

27. n = 4க்கு சாத்தியமான ஆர்பிட்டால்களின் எண்ணிக்கையினை குறிப்பிடுக.

28. 2s, 4p, 5d மற்றும் 4f ஆர்பிட்டால்களுக்கு எத்தனை ஆரக் கணுக்கள் (radial node) காணப்படுகின்றன? எத்தனை கோணக் கணுக்கள் (angular nodes) காணப்படுகின்றன.

29. சரிபாதியளவு நிரப்பப்பட்ட ஆர்பிட்டால்கள் நிலைப்புத்தன்மை பெறுதல் p– ஆர்பிட்டாலைக் காட்டிலும் d – ஆர்பிட்டாலில் அதிகமாக உள்ளது. ஏன்?

30. பின்வரும் d^5 எலக்ட்ரான் அமைப்புகளைக் கருதுக.

⇅	⇅	↑		

(அ)

↑	↑	↑	⇅	

(ஆ)

↑	↑	↑	↑	↑

இ)

Unit 2.indd 68 23-12-2021 16:18:49

(i) இவற்றுள் சிறும ஆற்றல் நிலையை குறிப்பிடுவது எது?

(ii) அதிகபட்ச பரிமாற்ற ஆற்றலைப் பெற்றுள்ள அமைப்பு எது?

31. பௌலி தவிர்க்கைத் தத்துவத்தினைக் கூறு

32. ஆர்பிட்டால் வரையறு. $3p_x$ மற்றும் $4d_{x^2-y^2}$ ஆர்பிட்டாலில் உள்ள எலக்ட்ரானுக்கு n மற்றும் l மதிப்புகளைக் கூறுக.

33. காலத்தைச் சார்ந்து அமையாத ஷ்ரோடிங்கர் அலைச்சமன்பாட்டினை சுருக்கமாக விளக்குக.

34. $\Delta v = 0.1\%$ மற்றும் $V = 2.2 \times 10^6\ ms^{-1}$ ஆக உள்ள எலக்ட்ரான் ஒன்றின் நிலையை அளவிடுவதில் உள்ள நிச்சயமற்றத் தன்மையினைக் கணக்கிடுக.

35. O–அணுவில் உள்ள 8வது எலக்ட்ரான் மற்றும் Cl – அணுவில் உள்ள 15வது எலக்ட்ரான் ஆகியவற்றிற்கான நான்கு குவாண்டம் எண்களின் மதிப்புகளையும் தீர்மானிக்கவும்.

36. குவாண்டம் இயக்கவியலின் அடிப்படையில் ஹைட்ரஜன் அணுவின் ஆற்றல் மதிப்பு

$$E_n = \frac{-13.6}{n^2}\ eV\ atom^{-1}$$

i) இதனைப் பயன்படுத்தி n = 3 மற்றும் n = 4க்கு இடையேயான ஆற்றல் வேறுபாடு ΔE யைக் கண்டறிக.

ii) மேற்கண்டுள்ள பரிமாற்றத்திற்கு உரிய அலைநீளத்தினைக் கணக்கிடுக.

37. 5400Å பச்சை நிற ஒளியின் அலை நீளத்திற்கு சமமான டிபிராக்ளி அலைநீளத்தினைப் பெற 54g டென்னிஸ் பந்து எவ்வளவு வேகத்தில் பயணிக்க வேண்டும்?

38. பின்வரும் ஒவ்வொன்றிற்கும், துணைக்கூட்டின் குறியீடு, அனுமதிக்கப்பட்ட m மதிப்புகள் மற்றும் ஆர்பிட்டால்களின் எண்ணிக்கையினைத் தருக.

i) n = 4, l =2, ii) n =5, l = 3 iii) n=7, l=0

39. Mn^{2+} மற்றும் Cr^{3+} ஆகியனவற்றின் எலக்ட்ரான் அமைப்புகளைத் தருக.

40. ஆஃபா தத்துவத்தினை விவரிக்க.

41. ஒரு அணுவானது 35 எலக்ட்ரான்கள் மற்றும் 45 நியூட்ரான்களைக் கொண்டுள்ளது.

i) புரோட்டான்களின் எண்ணிக்கை ii) தனிமத்தின் எலக்ட்ரான் அமைப்பு

iii) கடைசி எலக்ட்ரானின் நான்கு குவாண்டம் எண்களின் மதிப்பு ஆகியனவற்றை கண்டறிக.

42. ஹைட்ரஜன் அணுவின் போர் வட்டப்பாதையின் சுற்றளவானது, அணுக்கருவினைச் சுற்றி வரும் எலக்ட்ரானுக்கான டிபிராக்ளி அலைநீளத்தின் முழு எண் மடங்கிற்குச் சமம் எனக் காட்டுக.

43. பின்வரும் செயல்முறைக்குத் தேவைப்படும் ஆற்றலைக் கணக்கிடுக.

$$He^{+}_{(g)} \rightarrow He^{2+}_{(g)} + e^{-}$$

சிறும ஆற்றல் நிலையில் உள்ள ஹைட்ரஜனின் அயனியாக்கும் ஆற்றல் –13.6 evatom–1.

44. நிறை எண் 37 உடைய ஒரு அயனி ஒற்றை எதிர்மின் சுமையினைப் பெற்றுள்ளது. இந்த அயனியானது, எலக்ட்ரான்களைக் காட்டிலும் 11.1% அதிகமான நியூட்ரான்களைப் பெற்றிருந்தால், அந்த அயனியின் குறியீட்டினைக் கண்டறிக.

45. Li^{2+}அயனியானது ஹைட்ரஜனை ஒத்த அயனியாகும். அதனை போர் மாதிரியின் அடிப்படையில் விவரிக்க இயலும். அதன் மூன்றாம் வட்டப்பாதையின் போர் ஆரம் மற்றும் நான்காம் வட்டப்பாதையில் உள்ள ஒரு எலக்ட்ரானின் ஆற்றல் ஆகியவற்றைக் கண்டறிக.

46. துகள் முடுக்கிகளைக் கொண்டு புரோட்டான்களை முடுக்குவிக்க இயலும். அத்தகைய முடுக்குவிக்கப்பட்ட $2.85 \times 10^{8}\ ms^{-1}$ வேகத்தில் இயங்கும் புரோட்டான் ஒன்றின் அலை நீளத்தினை (Ål) கணக்கிடுக. (புரோட்டானின் நிறை 1.673×10^{-27} Kg).

47. 140 km hr^{-1} வேகத்தில் பயணிக்கும் 160 g நிறையுடைய கிரிக்கெட் பந்து ஒன்றின் டிபிராலி அலைநீளம் (cmல்) கணக்கிடுக.

48. ஆர்பிட்டில் உள்ள ஒரு எலக்ட்ரானின் நிலையினைத் தீர்மானிப்பதில் உள்ள நிச்சயமற்றத் தன்மை 0.6 Å என இருக்குமெனில், அதன் உந்தத்தில் ஏற்படும் நிச்சயமற்றத் தன்மை யாது?

49. துகள் ஒன்றின் நிலையில் ஏற்படும் நிச்சயமற்றத் தன்மையின் அளவீடானது அதன் டீபிராக்ளி அலைநீளத்திற்குச் சமம் எனில், அதன் திசைவேகத்தில் ஏற்படும் குறைந்த பட்ச நிச்சயமற்றத் தன்மை அதன் திசைவேகத்தின் $1/4\pi$ மடங்குக்குச் சமம் எனக் காட்டுக.

Unit 2.indd 70 23-12-2021 16:18:49

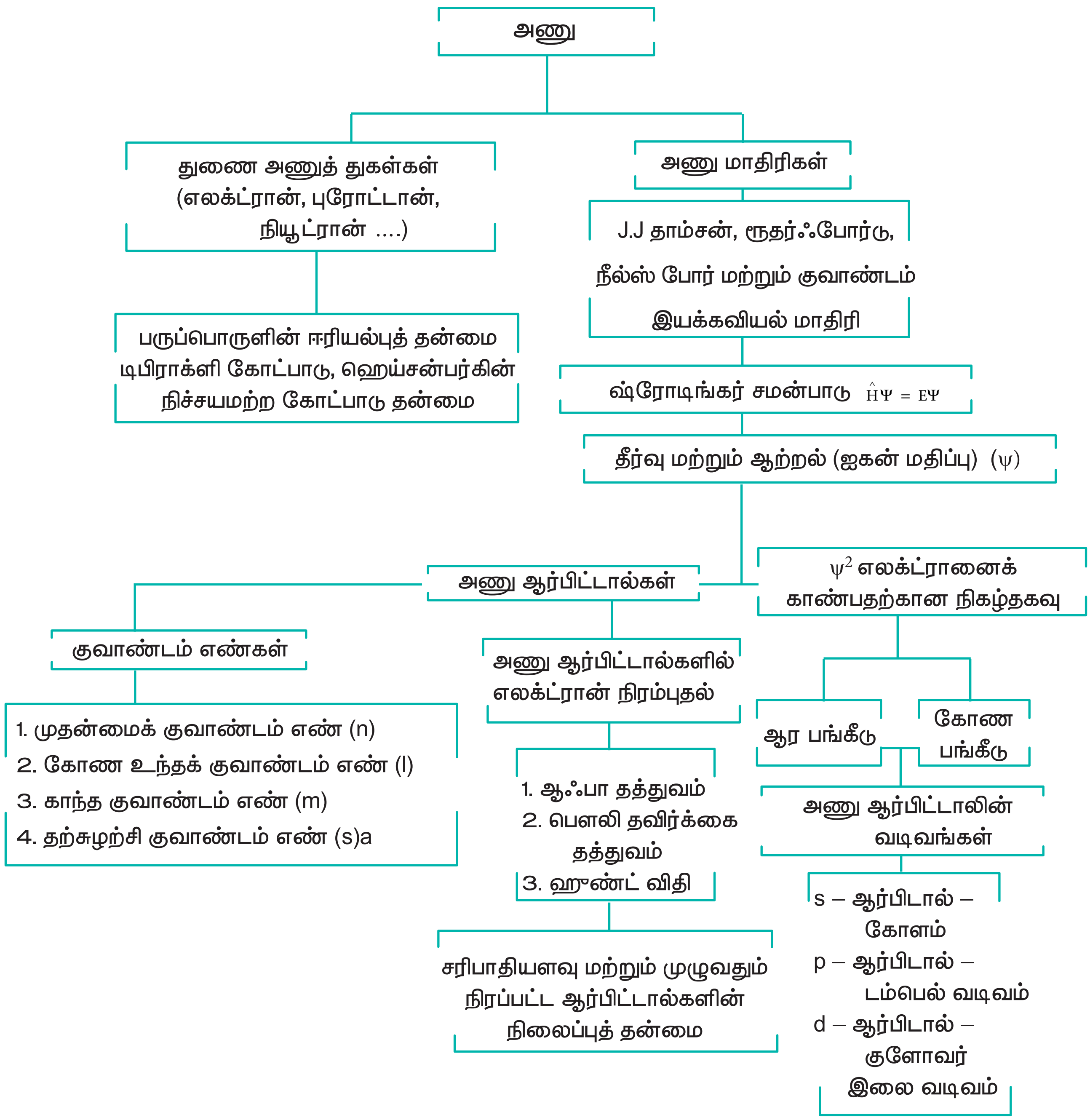
50. அமைதி நிலையில் உள்ள ஒரு எலக்ட்ரான் 100V மின்னழுத்த வேறுபாட்டைக் கொண்டு முடுக்குவிக்கப்படும் போது, அந்த எலக்ட்ரானின் டிபிராக்ளி அலைநீளத்தைக் கண்டறிக.

51. விடுபட்ட குவாண்டம் எண்கள் / துணை ஆற்றல் மட்டங்களைக் கண்டறிக.

n	*l*	m	துணை ஆற்றல் கூடு
?	?	0	4d
3	1	0	?
?	?	?	5p
?	?	-2	3d

Unit 2.indd 71 23-12-2021 16:18:49

கருத்து வரைபடம்



Unit 2.indd 72 23-12-2021 16:18:49