Chemical Bonding

UNIT – II, Sem -V

Que. 1:-H_2 આણુ માટે V.B. Theory ની ચર્ચા કરો.

- હાઈડ્રોજન પરમાણું સાથે બીજો હાઈડ્રોજન પરમાણું ઈલેકટ્રોન ની ભાગીદારી કરી H_2આણુ ની રચના કરે છે.
- આપણે આપણી સરળતા ખાતર હાઈ ડ્રોજન પરમાણું ને H_AઅનેH_Bથી ઓળખીશુ. પ્રથમ હાઈડ્રોજન ના ઈલેકટ્રોન ને e_1 તરીકે અને બીજા હાઈડ્રોજન ના ઈલેકટ્રોન e_2 તરીકે દર્શાવીશુ.

$H_A + H_B \rightarrow H_2$ or $[(H_A)\ (e_1)\ (e_2)\ (H_B)]$

પરમાણુંપરમાણું આણુ

ઈલેકટ્રોન રચના $1S^1 1S^1$

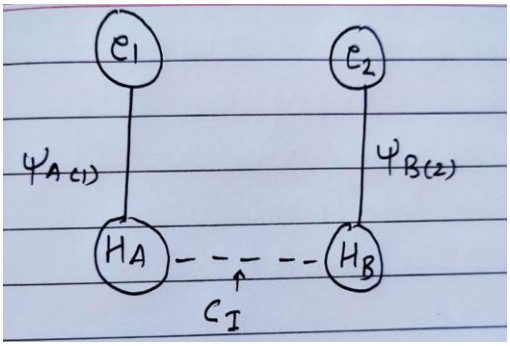
આમ, H_2આણુ એ બે કેન્દ્ર, બે ઈલેકટ્રોનવાળી પ્રણાલી છે.

સંયોજકતા બંધાનવાદ (V.B) પ્રમાણે

"સહસંયોજક બંધ માં ભાગ લેતા ઈલેકટ્રોન એક જ સમયે એક જ કેન્દ્ર ના આકર્ષણ માં રહી શકે છે." અહી બે કેન્દ્ર અને બે ઈલેકટ્રોન આવેલા હોવાથી H_2આણુ માટે બે બંધારણ શક્ય બનશે.

બંધારણ 1:

ધારો કે e_1 એ H_A કેન્દ્ર ના આકર્ષણ માં છે ત્યારે તેનું તરંગ વિધેય $\psi_{A(1)}$ છે, તે જ વખતે e_2એH_B કેન્દ્ર ના આકર્ષણ માં છે, ત્યારે તેનું તરંગ વિધેય $\psi_{B(2)}$ છે. આ ઈલેકટ્રોન નો સહસંયોજક બંધ માં ડાબો C_I જેટલો છે. અને તેનું બંધારણ નીચે મુજબ છે.



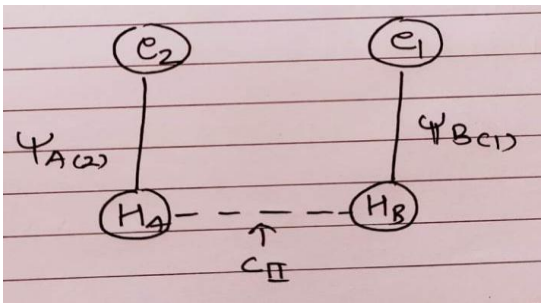
ઉપરોક્ત બંધારણ નું તરંગ વિધેય $\psi_I = C_I\ \psi_{A(1)}\psi_{B(2)}$----------(1)

બંધારણ નું તરંગ વિધેય = સહસંયોજક બંધ માં ફાળોX તરંગ વિધેય ગુણાકાર

ઉપરોક્ત બંધારણ નું તરંગ વિધેય $\psi_{II} = C_{II}\ \psi_{A(2)}\psi_{B(1)}$----------(2)

બંધારણ 2:

ધારો કે e_2 એ H_A કેન્દ્ર ના આકર્ષણ માં છે તે જ વખતે e_1એ H_B કેન્દ્ર ના આકર્ષણ માં છે, ત્યારે તેમના તરંગ વિધેય અનુક્રમે $\psi_{A(1)}$ અને $\psi_{B(2)}$ છે. આ ઈલેક્ટ્રોન ના સહસંયોજક બંધ માં ડાબો C_{II} જેટલો છે. અને તેનું બંધારણ નીચે મુજબ છે.



- ψ_Iઅને ψ_{II}એ સ્વતંત્ર બંધારણ ના તરંગવિધેય છે. જો સંયુક્ત આણુ નું તરંગવિધેય મેળવવું હોય તો, આ સ્વતંત્ર બંધારણ ના તરંગવિધેય નું રૈખિક સંગઠન કરવું પડે V.B Theory માં રૈખિક સંગઠન કરતા સ્વતંત્ર બંધારણ ના તરંગ વિધેય નો સરવાળો કરવો પડે છે.

સયુંકત આણુ નું તરંગ વિધેય $\psi = \psi_I + \psi_I$----------(3)

સમીકરણ (III) માં સમીકરણ (I) અને સમીકરણ (II) ની કિંમત મુકતા,

$\psi = C_I\ \psi_{A(1)}\psi_{B(2)} + C_{II}\ \psi_{A(2)}\psi_{B(1)}$----------(4)

- આપણેજાણીએછેકેબંધનિર્માણત્યારેજશક્યબનેછેજયારેપ્રણાલીનીશક્તિન્યુનતમથાયએટલેકેશૂન્યથાયઆમC_I અને C_{II} ની કિંમતો એવી હોવી જોઈએ કે જેથી પ્રણાલી ની કુલ શક્તિ E શૂન્ય થાય.

ઉપરોક્ત વિધાન ને વિકલ સમીકરણ સ્વરૂપ માં નીચે મુજબ દર્શાવી શકાય

$$dE/dC_I = 0,\ \ dE/dC_{II} = 0$$

વેરીયેસન સિદ્ધાંત પ્રમાણે ઉપરોક્ત વિકલ સમીકરણ નો ઉકેલ મેળવતા C_IઅનેC_{II}ની બે કિંમતો પ્રાપ્ત થાય છે.

(1) $C_I = +1$ અને $C_{II} = +1$

(2) $C_I = +1$ અને $C_{II} = -1$

ઉપર ની કિંમતો વારાફરથી સમીકરણ (4) માં મુકતા

$\psi = C_I\ \psi_{A(1)}\psi_{B(2)} + C_{II}\ \psi_{A(2)}\psi_{B(1)}$----------(4)

$\psi = C_I = +1 \quad \psi = C_{II} = +1$

$\psi = \psi_{A(1)}\psi_{B(2)} + \psi_{A(2)}\psi_{B(1)}$----------(5)

સમીકરણ (V) માં e_1 ની જગ્યા એ e_2 અને e_2ની જગ્યા e_1 લખતા,

$$\psi = \psi_{A(2)}\psi_{B(1)} + \psi_{A(1)}\psi_{B(2)}$$

પદ - I પદ - II

પદ –II ને આગળ લખી સમીકરણ ની પુન:રચના કરતા,

$$\psi = \psi_{A(1)}\psi_{B(2)} + \psi_{A(2)}\psi_{B(1)} \text{----------} (6)$$

સમીકરણ (VI) એ સમીકરણ (V) ને સરખું પ્રાપ્ત થાય છે, માટે સમીકરણ (V) ના તરંગ વિધેય ને સંમિતી તરંગ વિધેય તરીકે ઓળખવામાં આવે છે, કે જે ને "ψs" ની સંજ્ઞા તરીકે ઓળખવામાં આવે છે.

$$\psi s = \psi_{A(1)}\psi_{B(2)} + \psi_{A(2)}\psi_{B(1)} \text{----------} (7)$$

$C_I = +1$ અને $C_{II} = -1$ સમીકરણ (IV) માં મુકતા,

$$\psi = \psi_{A(1)}\psi_{B(2)} - \psi_{A(2)}\psi_{B(1)} \text{----------} (8)$$

ઉપરોક્ત સમીકરણ માં e_1 ની જગ્યા એ e_2 અને e_2ની જગ્યા e_1 લખતા નીચે મુજબ નું સમીકરણ પ્રાપ્ત થાય છે.

$$\psi = \psi_{A(2)}\psi_{B(1)} + \psi_{A(1)}\psi_{B(2)}$$

પદ - I પદ - II

ઉપરોક્ત સમીકરણ માં પદ –II ને આગળ લખી સમીકરણ ની પુનઃરચના કરતા

$$\psi = (-\psi_{A(1)}\psi_{B(2)} + \psi_{A(2)}\psi_{B(1)}) \text{----------} (9)$$

સમીકરણ (9) માંથી (-) નિશાની સામાન્ય કાઢતા,

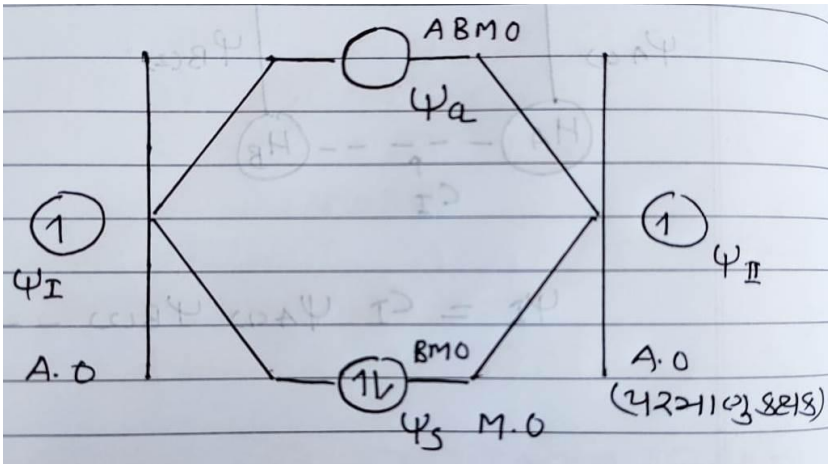
$$\psi = - \{\psi_{A(1)}\psi_{B(2)} - \psi_{A(2)}\psi_{B(1)}\} \text{----------} (10)$$

સમીકરણ (8)અને સમીકરણ (10) એકબીજા ને મળતા આવે છે, પરંતુ આ સમીકરણ માં વિરુધ્ધ (-) નિશાની પ્રાપ્ત થાય છે, માટે સમીકરણ (8) ના તરંગવિધેય ને પ્રતિસંમિતી તરીકે ઓળખાય છે અને તેને "ψa" ની સંજ્ઞા વડે ઓળખાય છે.

$$\psi a = \psi_{A(1)}\psi_{B(2)} - \psi_{A(2)}\psi_{B(1)} \text{----------} (11)$$

આમ, H_2 અણુ માટે V.B. Theory પ્રમાણે બે તરંગવિધેય નું રૈખિકસંગઠન કરતા જુદા – જુદા બે તરંગવિધેયો ψs અને ψa પ્રાપ્ત થાય છે.

H_2 આણુ માટે V.B. Theory પ્રમાણે તેનો શક્તીસ્તર આલેખ નીચે મુજબ પ્રાપ્ત થશે.



Que2: સંયોજકતા બંધનવાદ ની મર્યાદા આપો.

- આંતર કેન્દ્રીય અંતર વિરુદ્ધ સ્થિતિશક્તિ ના આલેખ પરથી ψa અને ψs ના સમીકરણ પરથી સ્થિતિશક્તિ નું ન્યુનતમ મૂલ્ય અને તે વખત નું અંતર r_0એH_2 આણુ માટે સૈધાંતિક થી ગણતરી કરી નીચે મુજબ પ્રાપ્ત થાય છે.

  સ્થિતિશક્તિ = - 4.76 e.volt

  બંધઅંતર r_0= 0.87 A^0

H_2 આણુ માટે જુદા – જૂદા વૈજ્ઞાનિકો એ વિવિધ પ્રયોગો કરી આંતર કેન્દ્રીય અંતર વિરુદ્ધ સ્થિતિશક્તિ ના આલેખ મેળવ્યા અને તેના પરથી સ્થિતિશક્તિ અને r_0ની પ્રાયોગિક કિંમતો મેળવવા માં આવી.

સ્થિતિશક્તિ = - 3.14 e.volt

બંધઅંતર r_0= 0.7416 A^0

અહી,

H_2 આણુ માટે સૈધાંતિક કિંમત અને પ્રાયોગિક કિંમત વચ્ચે મોટો તફાવત જોવા મળે છે, વારંવાર પ્રયોગો ના આધારે એવું નક્કી કરવામાં આવ્યું કે પ્રાયોગિક કિંમતો સાચી છે એટલે કે સૈધાંતિક કિંમતો ખોટી ક અધુરી છે. સૈધાંતિક કિંમતો ψs ના સમીકરણ પરથી પ્રાપ્ત થાય છે. એટલે કે ψs નું સમીકરણ ખોટું કે સાચું છે, ψs ના સમીકરણ પરથી સ્થિતિશક્તિ અને r_0અંતર ની સૈધાંતિક કિંમત અને પ્રાયોગિક કિંમત વચ્ચે વિસંગતતા જોવા મળે છે તેને દુર કરવા માટે પૈલિંગે વિસ્તૃત “સંયોજકતા બંધનવાદ” આપ્યો

Que3: પૌઉલીંગ નું વિસ્તૃત સંયોજકતા બંધનવાદ સમજાવો

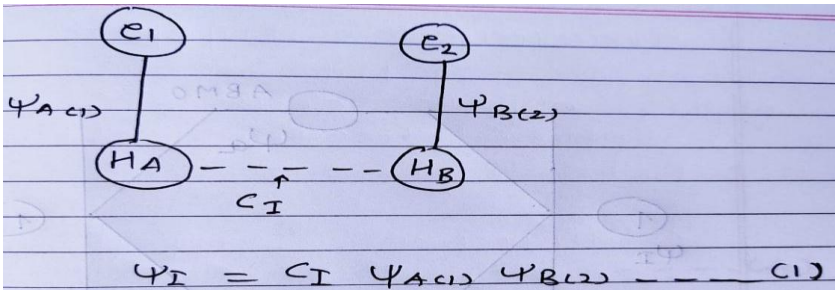
અથવા

$\psi_{V.B.} = \psi_{\text{સહસંયોજક}} + \psi_{\text{આયોનિક}}$

- પાઉલીંગે સંયોજકતા બંધનવાદ માં આપવામાં આવેલા બંને બંધારણો ને કેન્દ્ર માં લીધા તે ઉપરાંત બીજા બે બંધારણ આપ્યા કે જે બંધારણો ને "આયોનિક બંધારણ" તરીકે ઓળખવામા આવે છે.
- પાઉલીંગ ના વિસ્તૃત સંયોજકતા બંધનવાદ માં ચાર બંધારણ આપવામાં આવ્યા છે.

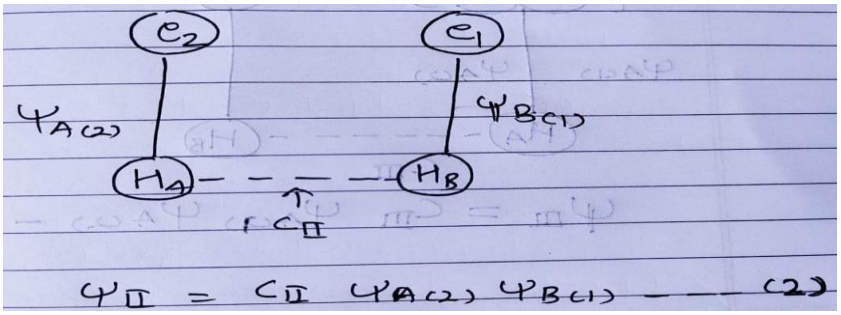
બંધારણ I :-

ધારો કે, e_1એH_Aકેન્દ્ર ના આકર્ષણ માં છે, તે જ વખતે e_2 એ H_B કેન્દ્ર ના આકર્ષણમાં છે ત્યારે તેના તરંગવિધેય અનુક્રમે $\psi_{A(1)}$ છે, આ બંને ઈલેકટ્રોન નો સહસંયોજક બંધ માં ફાળોC_Iજેટલો છે.



બંધારણ II :-

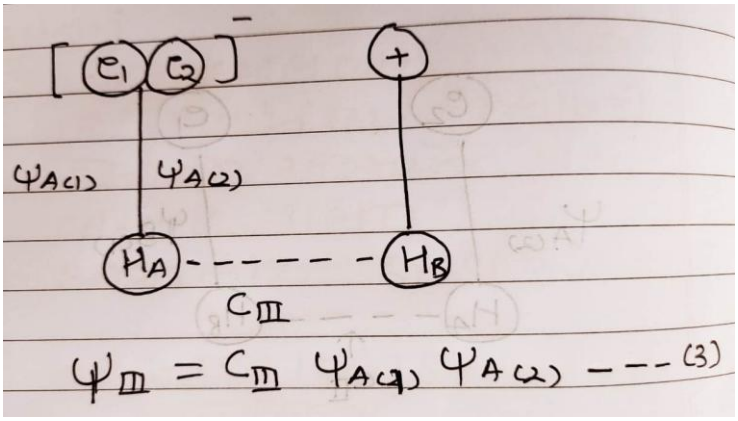
ધારો કે, e_2 એH_Aકેન્દ્ર ના આકર્ષણ માં છે, તે જ વખતે e_1 એ H_B કેન્દ્ર ના આકર્ષણમાં છે ત્યારે તેના તરંગવિધેય અનુક્રમે $\psi_{B(1)}$ છે, આ બંને ઈલેકટ્રોન નો સહસંયોજક બંધ માં ફાળોC_{II}જેટલો છે.



બંધારણ III :-

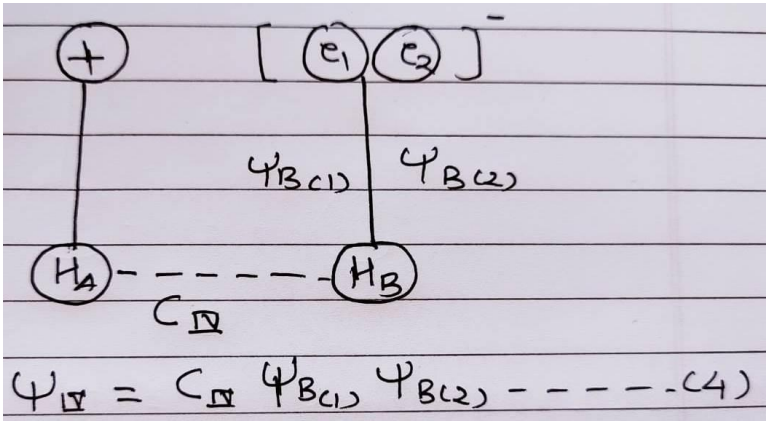
આ બંધારણ માં આપણે હાઈડ્રોજન – હાઈડ્રોજન વચ્ચે આયોનિક બંધ આવેલો છે, તેવુ બંધારણ રજુ કરીશુ

ધારો કે, e_1અને e_2 એH_Aકેન્દ્ર ના આકર્ષણ માં છે, તે જ વખતે તેમના તરંગવિધેય અનુક્રમે $\psi_{A(1)}$ અને $\psi_{A(2)}$ છે, અને આ ઈલેકટ્રોન નો સહસંયોજક બંધ માં ફાળોC_{III} જેટલો છે, તેવું બંધારણ નીચે મુજબ છે.



બંધારણ IV :-

ધારો કે, e_1અને e_2 એH_Bકેન્દ્ર ના આકર્ષણ માં છે, તે જ વખતે તેમના તરંગવિધેય અનુક્રમે $\psi_{B(1)}$ અને $\psi_{B(2)}$ છે, અને આ ઈલેકટ્રોન નો સહસંયોજક બંધ માં ફાળો C_{IV} જેટલો છે, તેવું બંધારણ નીચે મુજબ છે.



ψ_I,ψ_{II}, ψ_{III}અનેψ_{IV}એ સ્વત્તંત્ર બંધારણ ના તરંગવિધેય છે. જો સંયુક્ત આણુ નું તરંગવિધેય મેળવવું હોય તો, સ્વત્તંત્ર બંધારણ ના તરંગવિધેય નું રૈખિક સંગઠન કરવું પડે છે, અને V.B. Theory માં રૈખિક સંગઠન કરતા સરવાળો કરવામાં આવે છે.

સંયુક્ત આણુ નું તરંગવિધેય,

$$\psi = \psi_I+\psi_{II}+\psi_{III}+\psi_{IV} \text{----------(5)}$$

સમીકરણ (5) માં સમીકરણ (1), (2), (3) અને (4) ની કિંમત મુકતા,

$$\psi_S = \psi_{A(1)}\psi_{B(2)}+\psi_{A(2)}\psi_{B(1)} + \lambda[\psi_{A(1)}\psi_{A(2)}+\psi_{B(1)}\psi_{B(2)}] \text{----------(6)}$$

સમીકરણ (6) માં C_I, C_{II},C_{III}, C_{IV} = +1 લેવામાં આવે છે, તથા λ= સહસંયોજક બંધ માં આયોનિક લક્ષણ ધરાવતી સંજ્ઞા

ઉપરોક્ત, સમીકરણ (6) પરથી H_2આણુ માટે સ્થિતિશક્તિ અને બંધઅંતર r_0 ની કિંમત (સૈધાંતિક) નીચે મુજબ પ્રાપ્ત થાય

(સ્થિતિ શક્તિ) P.E = - 3.21 e.v

r_0= 0.78 A^0

આ કિંમત એ પ્રાયોગિક કિંમતો ને મળતી આવે છે તેથી કહી શકાય કે ψs નું સમીકરણ એ સાચું સમીકરણ છે અને તેમાં આપવામાં આવેલા આયોનિક બંધારણ એ સાચું બંધારણ છે.

Que4 :-H_2 અણુ માટે M.O. Theory ની ચર્ચા કરો.

- હાઈડ્રોજન પરમાણું સાથે બીજા હાઈડ્રોજન પરમાણું ઈલેક્ટ્રોન ની ભાગીદારી થી H_2 અણુ ની રચના કરે છે.
- આપણે આપણી સરળતા ખાતરહાઈડ્રોજન પરમાણું ને H_A અને H_Bતરીકે ઓળખી પ્રથમહાઈડ્રોજન ના ઈલેક્ટ્રોન ને e_1અને બીજા હાઈડ્રોજન ના ઈલેક્ટ્રોન e_2 છે.

$$H_A+H_B \rightarrow H_2 \approx [(H_A)(e_1)(e_2)(H_B)]$$

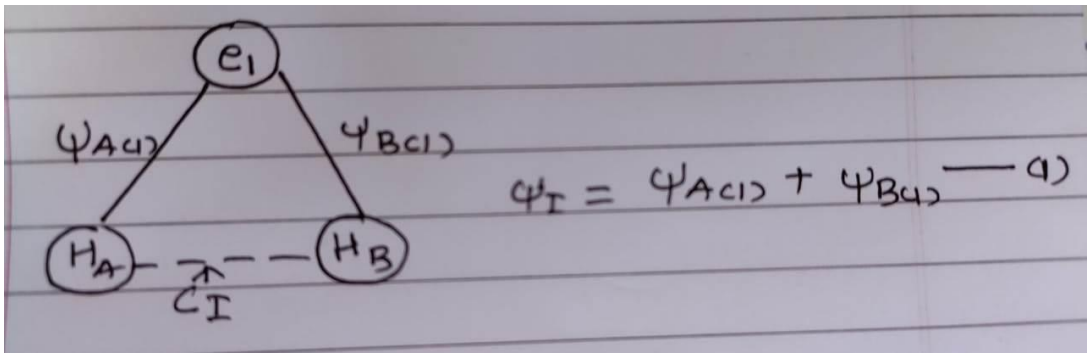
આમ H_2અણુ એ બે કેન્દ્ર અને બે ઈલેક્ટ્રોન વાળી પ્રણાલી છે.

- M.O. Theory (અણુ કક્ષક વાદ) પ્રમાણે, સહસંયોજક બંધ માં ભાગ લેતા ઈલેક્ટ્રોન એક સમયે બધા જ કેન્દ્ર ના આકર્ષણ માં H_2અણુ પાસે બે કેન્દ્રો અને બે ઈલેક્ટ્રોન આવેલી હોવાથી બે બંધારણ શક્ય બને છે.

બંધારણ –I

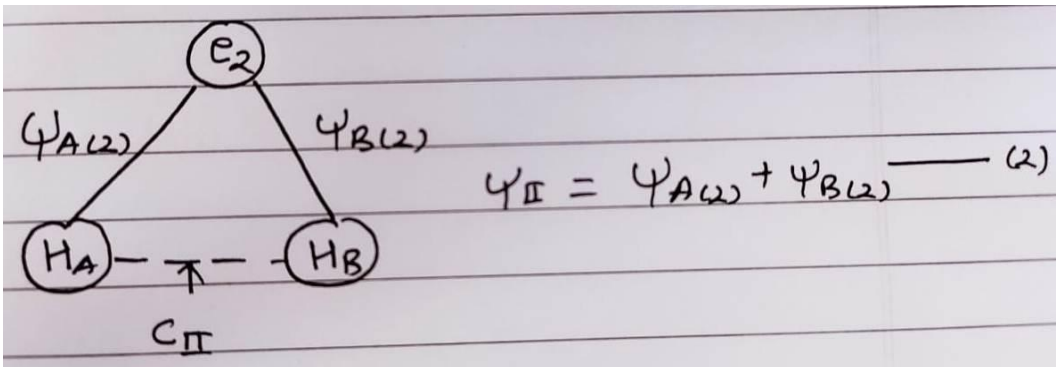
ધારો કે, e_1એ H_Aઅને H_Bકેન્દ્ર ના આકર્ષણ માં છે, તે જ વખતે તેમના તરંગવિધેય અનુક્રમે $\psi_{A(1)}$ અને $\psi_{B(1)}$ છે.

M.O. Theory માં બંધારણ નું તરંગવિધેય લખતા કેન્દ્ર ના તરંગવિધેય નો સરવાળો કરવામાં આવે છે.



બંધારણ –II

ધારો કે, e_2 એ H_Aઅને H_Bકેન્દ્ર ના આકર્ષણ માં છે, તે જ વખતે તેમના તરંગવિધેય અનુક્રમે $\psi_{A(2)}$ અને $\psi_{B(2)}$ છે.



ψ_Iઅનેψ_{II}એ સ્વતંત્ર બંધારણ ના તરંગવિધેય છે, જો સંયુક્ત આણુ નું તરંગવિધેય છે, જો સંયુક્ત આણુ નું તરંગવિધેય મેળવવું હોય તો બંધારણ ના તરંગવિધેય નું રૈખિક સંગઠન કરવું પડે છે, અનેરૈખિક સંગઠન કરતા M.O. Theory માં ગુણાકાર કરવામાં આવે છે.

સંયુક્ત આણુ નું તરંગવિધેય,

$$\psi = \psi_I \times \psi_{II} \text{----------} (3)$$

સમીકરણ (1) અને (2) ની કિંમતો સમીકરણ (3) માં લેતા,

$$\psi s = [\psi_{A(1)} + \psi_{B(1)}] \times [\psi_{A(2)} + \psi_{B(2)}]$$

$$\psi s = \psi_{A(1)}\psi_{A(2)} + \psi_{A(1)}\psi_{B(2)} + \psi_{A(2)}\psi_{B(1)} + \psi_{B(1)}\psi_{B(2)}$$

પદ - I પદ - II પદ - III પદ - IV

પદ –Iઅને પદ –IV ને પાસપાસે લખતા

$$\psi s = [\psi_{A(1)}\psi_{A(2)} + \psi_{B(1)}\psi_{B(2)}] + [\psi_{A(2)}\psi_{B(2)} + \psi_{A(2)}\psi_{B(1)}] \text{-------} (4)$$

પદ - I પદ - II

ઉપરોક્ત, સમીકરણ (4) માં પ્રાપ્ત થયેલ ψs ના સમીકરણ માં પદ –I એ H_2આણુ માટે આપવામાં આવેલા V.B. Theory ના ψs સમીકરણ ને મળતુ આવે છે, જયારે પદ –II પૈઉલીંગ ના વિસ્તૃત સંયોજકતા બંધનવાદ માં પ્રાપ્ત થયેલ આયોનિક બંધારણ ના પદ ને મળતું આવે છે. તેથી કહી શકાય કે M.O. Theory પણ પૈઉલીંગ ના વિસ્તૃત સંયોજકતા બંધનવાદ ના આયોનિક બંધનવાદ ને ટેકો આપે છે.

****