

அலகு - I

1.1. மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல் கொள்கை (Molecular Orbital Theory)

சக பிணைப்பு : வரையறை : இரு அணுக்கள் தமக்கிடையே ஒரு ஜோடி எலக்ட்ரான்களைப் பங்கிட்டுக் கொண்டு உருவாக்கிக் கொள்ளும் வேதிப் பிணைப்பே சகபிணைப்பு எனப்படுகிறது. இவ்வாறு இணையும் இரு அணுக்களும் தலா ஒரு எலக்ட்ரானை வழங்கி அவ்வாறு பெறப்பட்ட ஒரு ஜோடி எலக்ட்ரான்களை தமக்குள் பங்கிட்டுக் கொள்கின்றன. பங்கிடப்பட்ட இரு எலக்ட்ரான்கள் மீதும் பிணைக்கப்பட்டுள்ள அணுக்கள் இரண்டும் சம உரிமை பெறுகின்றன.

சக பிணைப்பு என்ற தத்துவத்தை விளக்க வேண்டுமாயின், சகபிணைப்பு ஏன் உண்டாகிறது? ஒரு மூலக்கூறில் புறவெளியில் எலக்ட்ரான்கள் எவ்வாறு ஒழுங்கமைக்கப்பட்டுள்ளன? எலக்ட்ரான்கள் பகிர்ந்து கொள்வதன் அடிப்படையில் மூலக்கூறுகளின் வடிவமைப்புகளை எவ்வாறு விளக்குவது போன்ற கேள்விகளுக்கு விடையளிக்கவல்ல கொள்கைகள் நமக்குத் தேவைப் படுகின்றன.

அலை இயக்கவியலில் ஏற்பட்ட வளர்ச்சி வேதிப்பிணைப்புகளுக்கான இரு கொள்கைகளுக்கு வழிகோலின.

1. இணைதிறன் பிணைப்புக் கொள்கை (Valence bond theory - VBT)
2. மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல் (மண்டலக்) கொள்கை (Molecular orbital theory - MOT)

ஹைட்ரஜன் மூலக்கூறுகள் உருவாவதை எடுத்துக்காட்டாகக் கொண்டு இவ்விரு கொள்கைகளை விளக்குவோம்.

M.O. கொள்கை பற்றிய ஆய்வு

மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல் கொள்கையின் படி,

1. அணுக்கருக்கள் ஒன்றையொன்று நெருங்கும்போது, மூலக்கூறு உருவாதலில் பங்கு பெறும் அணுக்களின் அணு ஆர்பிட்டல்கள் அனைத்தும் பாதிக்கப்படுகின்றன.
2. அணு ஆர்பிட்டல்கள் கலந்து, மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல்கள் எனப்படும் புதிய ஆர்பிட்டல்களை சமமான எண்ணிக்கையில் தருகின்றன.
3. ஒரு ஒற்றை அணுவிலுள்ள ஒவ்வொரு எலக்ட்ரானையும் ஒரு குறிப்பிட்ட அலைச்சார்பு $1/\lambda$ மூலம் குறித்துக்காட்டுவது போன்ற மூலக்கூறிலுள்ள ஒவ்வொரு எலக்ட்ரானையும் ஒரு குறிப்பிட்ட மூலக்கூறுக்கு உரித்தான ஒரு அலைச்சார்பின் மூலம் குறிப்பிடலாம்.
4. அணு ஆர்பிட்டலைப் போன்றே ஒரு மூலக்கூறு ஆர்பிட்டலும் இரு எலக்ட்ரான்களும் மேல் பெற்றிருக்காது.

5. இவ்விரு எலக்ட்ரான்களும் எதிரெதிர்க்குறி பெற்றிருத்தல் வேண்டும்.
6. ஆனாலும் ஒரு அணு ஆர்பிட்டலுக்கு ஒரு மூலக்கூறு ஆர்பிட்டலுக்கும் இடையே ஒரு திட்டவட்டமான வேறுபாடு உண்டு. அணு ஆர்பிட்டலில் உள்ள ஒரு எலக்ட்ரான் நேர்மின்கமை கொண்ட, ஒரு அணுக்கருவின் ஆதிக்கத்தில் மட்டுமே உள்ளது. மாறாக மூலக்கூறு ஆர்பிட்டலில் உள்ள எலக்ட்ரான் ஒன்று அல்லது அதற்கு மேற்பட்ட அணுக்கருக்களின் கூட்டு ஆதிக்கத்தில் உள்ளது.

இரு அணுக்களின் $1s^1$ அணு ஆர்பிட்டல்களிலிருந்து ஹைட்ரஜன் மூலக்கூறு உருவாகிறது. இவை $\sigma(1s)$ மற்றும் $\sigma^*(1s)$ ஆகிய இரு மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல்களைத் தருகின்றன. இரு எலக்ட்ரான்கள் ஆஃபெள கொள்கையின் படி நிரப்பப்படுகின்றன. இவ்வாறாக இந்த இரு எலக்ட்ரான்களும் ஆற்றல் குறைந்த பிணைப்பு மூலக்கூறு ஆர்பிட்டலுக்குச் செல்கின்றன. பிணை எதிர் மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல் காலியாக உள்ளது. இவ்வாறாக ஹைட்ரஜன் மூலக்கூறு ஒரு பிணைப்பினால் H - H, இணைக்கப்பட்டுள்ளது.

பிணைப்பு, பிணை எதிர் ஆர்பிட்டல்கள் :

(Bonding and antibonding orbitals)

அணுக்களில் உள்ளது போன்றே மூலக்கூறுகளிலும் பல்வேறு ஆற்றல் மட்டங்கள் அதாவது ஆர்பிட்டல்கள் இருப்பதாக கருதப்படுகிறது. ஒரு மூலக்கூறில் உள்ள இந்த ஆற்றல் மட்டங்கள் மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல்கள் எனப்படுகின்றன. ஆஃபெள மற்றும் பாலியின் விலக்குதல் தத்துவங்களைப் பின்பற்றி அணு ஆர்பிட்டல்களை நிரப்புவதைப் போன்றே மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல்களையும், நிரப்பலாம். இவ்வாறாக, எதிரெதிர்ச் சுழற்சிகளையுடைய இரு எலக்ட்ரான்களை மட்டுமே உச்சபட்சமாக ஒரு மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல் பெற்றிருக்க வேண்டும்.

இரு வகையான MOக்கள் உள்ளன. அதாவது பிணைப்பு மற்றும் பிணை எதிர் MOக்கள், பிணைக்கப்பட்டுள்ள அணுக்களின் அணு ஆர்பிட்டல்களை இணைத்து மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல்கள் உருவாக்கப்படுகின்றன எனக்கண்டோம். இதற்கு நாம் அணு ஆர்பிட்டல்களின் நேர்க்கோட்டு, இணைப்பு (Linear Combination of Atomic Orbitals - LCAO) என்ற தத்துவத்தைப் பயன்படுத்துகிறோம், ஈரணு மூலக்கூறு ஒன்றில் A மற்றும் B ஆகிய இரு அணுக்கருக்களின் புலத்தில் உள்ள ஒரு எலக்ட்ரானுக்கான அலைச்சார்பு ψ சீர்மையான இணைப்பு மற்றும் எதிர்சீர்மையான இணைப்பு என்ற இருவகை இணைப்புகளினால் தரப்படும். இவ்வாறாக, நமக்கு கிடைப்பது.

$$\psi_s = \psi_A + \psi_B \quad (1)$$

$$\psi_a = \psi_A - \psi_B \quad (2)$$

ψ ஐ விட ψ^2 தான் கூடுதலான முக்கியத்துவம் வாய்ந்தது எனக்கண்டோம்.

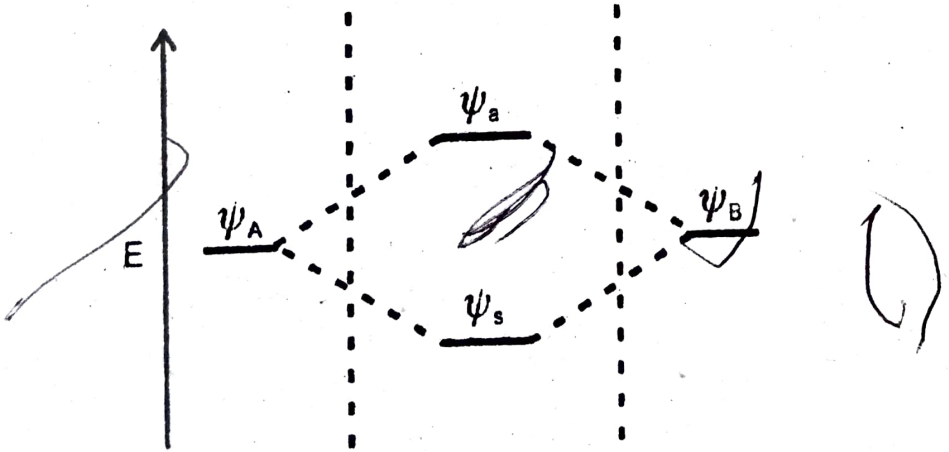
எனவே (1) மற்றும் (2) ஆகியவற்றிற்கு இருமடி எடுக்க நமக்கு கிடைப்பது.

$$\psi_s^2 = \psi_A^2 + \psi_B^2 + 2\psi_A\psi_B \quad (3)$$

$$\psi_a^2 = \psi_A^2 + \psi_B^2 - 2\psi_A\psi_B \quad (4)$$

சமன்பாடு (3) லிருந்து ψ_s^2 என்பது $\psi_A^2 + \psi_B^2$ ஐ விட அதிகம் என்பது புலனாகிறது. அதாவது சமன்பாடு (1) ன் படி LCAO முறையில் பெறப்பட்ட மூலக்கூறு ஆர்பிட்டலில் ஒரு எலக்ட்ரானைக் காண்பதற்கான நிகழ்தகவு ψ_A யிலோ அல்லது ψ_B யிலோ உள்ளதை விட அதிகம் என்பதாகும். வேறுவகையில் கூறின் ψ_s என்று குறிப்பிடப்படும் மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல் ψ_A அல்லது ψ_B யை விடக் குறையான ஆற்றலைப் பெற்றிருக்கும். எனவே இந்த ஆர்பிட்டல் ஒரு நிலையான வேதிப்பிணைப்பு உருவாக வழிகோலும், எனவே இந்த ஆர்பிட்டல் பிணைப்பு (bonding) ஆர்பிட்டல் எனப்படுகிறது.

சமன்பாடு (4) லிருந்து ψ_a^2 என்பது $\psi_A^2 + \psi_B^2$ ஐ விடக் குறைவு, அதாவது, சமன்பாடு (2) ன் படி LCAO முறையில் பெறப்பட்ட மூலக்கூறு ஆர்பிட்டலில் ஒரு எலக்ட்ரான்களைக் காண்பதற்கான நிகழ்தகவு ψ_A யிலோ ψ_B யிலோ உள்ளதை விடக் குறைவு என்பதாகும். வேறு வகையில் கூறின் ψ_a என்று குறிப்பிடப்படும் மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல் ψ_A அல்லது ψ_B யைவிடக் கூடுதலான ஆற்றலைப் பெற்றிருக்கும். எனவே இந்த ஆர்பிட்டல் ஒரு நிலையான வேதிப்பிணைப்பை உருவாக்க வழிவகுக்காது. எனவே இந்த ஆர்பிட்டல் பிணை எதிர் (anti bonding) ஆர்பிட்டல் எனப்படுகிறது.

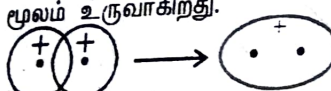
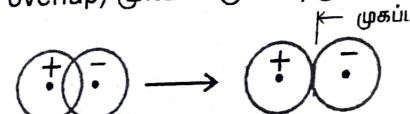


ψ_A மற்றும் ψ_B ஆகிய இரு அணு ஆர்பிட்டல்களிலிருந்து பிணைப்பு M.O. ψ_s மற்றும் பிணை எதிர். M.O. ψ_a ஆகியவை உருவாதல் படத்தில் காட்டப்பட்டுள்ளது.

இவ்வாறாக இரு அணு ஆர்பிட்டல்கள் இணைந்து இரு மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல்களைக் தருகின்றன எனக் காண்கிறோம். இவற்றில் ஒன்று பிணைப்பு ஆர்பிட்டல் மற்றும் பிணை எதிர் ஆர்பிட்டல் ஆகும்.

இரு அணு ஆர்பிட்டல்கள் நேர்கோட்டில் மேற்பொருத்துமாயின் நமக்கு இரு M.O. க்கான கிடைக்கின்றன. இவை சிக்மா (பிணைப்பு) மற்றும் சிக்மா* (பிணை எதிர்) எனக்குறிப்பிடப்படுகின்றன. இவ்வாறாக s-s மேற்பொருத்துதல் அல்லது s-p மேற்பொருத்துதல் அல்லது p-p மேற்பொருத்துதல் ஆகியவை இயலும். இவை அனைத்தும் σ மற்றும் σ^* ஆர்பிட்டல்களைத் தரும். இரு ஆர்பிட்டல்கள் பக்கவாட்டில் பொருந்துமாயின் π மற்றும் π^* ஆர்பிட்டல்கள் கிடைக்கின்றன.

பிணைப்பு மற்றும் பிணை எதிர் ஆர்பிட்டல்களுக்கிடையேயான வேறுபாடுகள்

பிணைப்பு MO	பிணை எதிர் MO
<p>1. ஒத்த குறிகளுள்ள (signs) எலக்ட்ரான் அலைகள் இணைவதால். அதாவது, அணு ஆர்பிட்டல்களின் கூட்டு மேற்பொருத்துகை (addition overlap) மூலம் உருவாகிறது.</p> 	<p>எதிரெதிர்க்குறிருள்ள எலக்ட்ரான் அலைகள் இணைவதால் அதாவது அணு ஆர்பிட்டல் நீக்கு மேற்பொருத்துகை (subtraction overlap) மூலம் உருவாகிறது.</p> 
<p>2. எந்த அணு ஆர்பிட்டல்களிலிருந்து உருவானதோ அவற்றை விடக் குறைவான ஆற்றல் கொண்டது.</p>	<p>எந்த அணு ஆர்பிட்டல்களிலிருந்து உருவானதோ அவற்றை விடக் கூடுதலான ஆற்றல் கொண்டது.</p>
<p>3. அணுக்கருக்களுக்கிடையே எலக்ட்ரான் செறிவு அதிகம், எனவே அணுக்கருக்களுக்கிடையேயான ஈர்ப்பு அதிகம், அணுக்கருக்கிடையே பிணைப்பு உருவாவதை இது விளக்குகிறது.</p>	<p>அணுக்கருக்களுக்கிடையே எலக்ட்ரான் செறிவு குறைவு. எனவே அணுக்கருக்களுக்கிடையே விலக்கம் அதிகம். அணுக்கருக்கிடையே பிணைப்பு உருவாகாமல் இருப்பதை இது விளக்குகிறது.</p>

பிணைப்பு தரம் அல்லது பிணைப்பு எண் (Bond Order) :

$$\text{பிணைப்பு தரம்} = \frac{1}{2} (N_b - N_a)$$

N_b = பிணை எதிர் ஆர்பிட்டல்களில் உள்ள எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை

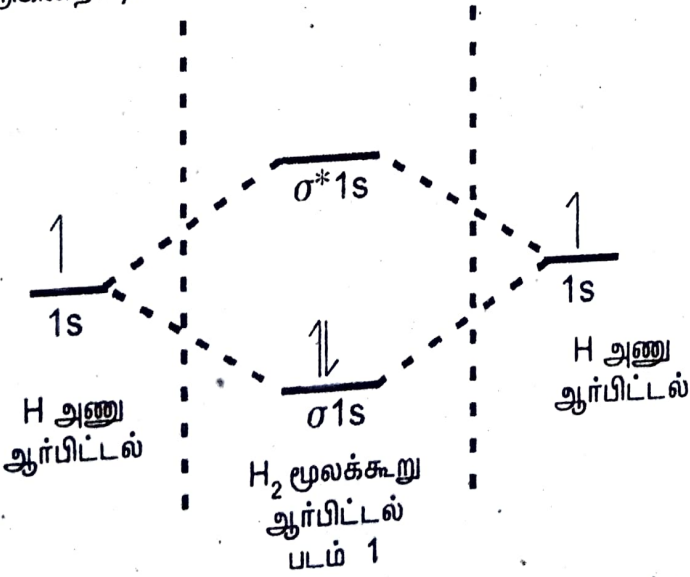
N_a = பிணைப்பு ஆர்பிட்டல்களில் உள்ள எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை

பிணைப்பு தரம் என்பது ஒரு மூலக்கூறுலுள்ள பிணைப்புகளின் எண்ணிக்கையைக் குறிக்கும். பிணைப்பின் எண்ணிக்கை அதிகரிக்கும்போது மூலக்கூறின் நிலைப்புத் தன்மை அதாவது வலிமை அதிகரிக்கும். இதேபோல் பிணைப்பின் தரம் அதிகரிக்கும் போது பிணைப்புத் தூரம் குறையும்.

மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல் கொள்கையின் பயன்பாடுகள்:

1. H_2 மூலக்கூறு

மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல் கொள்கையின் படி ஹைட்ரஜன் மூலக்கூறு உருவாவதைக் காண்போம். ஒவ்வொரு ஹைட்ரஜன் அணுவிலிருந்தும் ஒரு $1s$ அணு ஆர்பிட்டல் வீதம் இரு அணு ஆர்பிட்டல்கள் ஒன்றை ஒன்று நெருங்கி ஒரு மூலக்கூறினை உருவாக்குகின்றன. அணு ஆர்பிட்டல்களிலிருந்து உருவாகும் மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல்களின் எண்ணிக்கை அணு ஆர்பிட்டல்களின் எண்ணிக்கைக்குச் சமம். ஆற்றலைக் குறைக்கும் வகையான மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல், அமைப்பிற்கு நிலைப்புத்தன்மையைத் தருகிறது. இதுவே அணுக்களுக்கிடையே பிணைப்பு ஏற்படக் காரணமாய் உள்ளது. எனவே, இவ்வகையான மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல்கள் பிணைப்பு மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல்கள் எனப்படுகின்றன. $1s$ அணு ஆர்பிட்டல்களிலிருந்து உருவாகும் மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல்களை $\sigma(1s)$ என்று குறிப்பிடப் படுகின்றன. ஒரு மூலக்கூறு ஆர்பிட்டலில் உள்ள எலக்ட்ரான் செறிவு அணுக்கருக்களுக்கிடையேயான பகுதியில், முனைகளில் இருப்பதைவிட அதிகமாக இருக்கும். மற்றொரு வகையான மூலக்கூறு, ஆர்பிட்டல்கள் உயர் ஆற்றல் நிலைக்குப் பொருந்துபவை. இத்தகைய மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல்களின் எலக்ட்ரான் செறிவு முனைகளில் உச்சபட்சமாக இருக்கும். அணுக்கருக்களுக்கிடையேயான பகுதியில் எலக்ட்ரான் செறிவு கிட்டத்தட்ட பூஜ்ஜியமாக இருக்கும். இவை பிணை எதிர் மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல்கள் எனப்படுகின்றன. (இவை விண்மீன் குறிகளால் குறிப்பிடப்படுகின்றன).



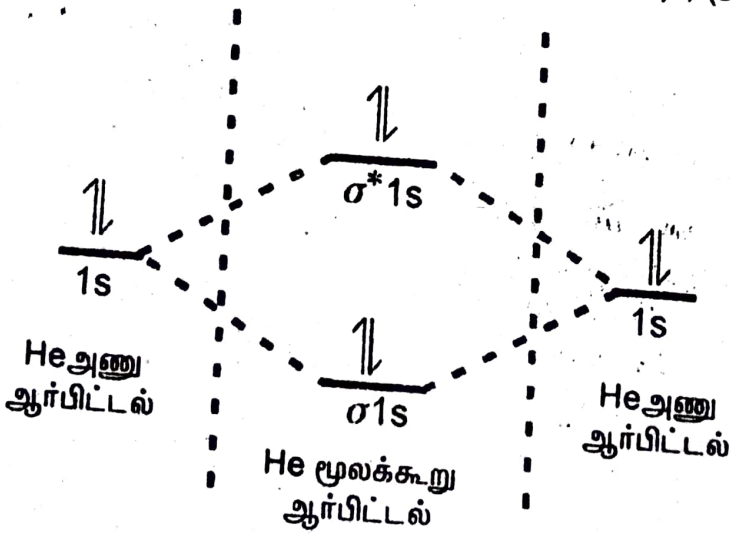
இரு அணுக்களின் $1s^1$ அணு ஆர்பிட்டல்களிலிருந்து ஹைட்ரஜன் மூலக்கூறு உருவாகிறது. இதன் $\sigma(1s)$ மற்றும் $\sigma^*(1s)$ ஆகிய இரு மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல்களைத் தருகின்றன. இரு எலக்ட்ரான்கள் ஆஃபெள கொள்கையின் படி நிரப்பப்படுகின்றன. இவ்வாறாக இந்த இரு எலக்ட்ரான்களும் ஆற்றல்

குறைந்த பிணைப்பு மூலக்கூறு ஆர்பிட்டலுக்குச் செல்கின்றன. பிணை எதிர் மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல் காலியாக உள்ளது. இவ்வாறாக ஹைட்ரஜனின் பிணைப்பு தரம் (bond order) = $\frac{1}{2}$ [பிணைப்பு மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல்களிலுள்ள எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை - பிணை எதிர் மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல்களில் உள்ள எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை] = $\frac{1}{2}(2-0) = \frac{1}{2} \times 2 = 1$. அதாவது ஹைட்ரஜன் மூலக்கூறு ஒரு பிணைப்பினால், H - H இணைக்கப்பட்டுள்ளது. அதன் மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல் ஒழுங்கமைப்பு $\sigma(1s)^2 \sigma^*(1s)^0$.

2. ஹீலியம் He_2 மூலக்கூறு :

இரண்டு ஹீலியம் அணுக்கள் இணைந்து He_2 மூலக்கூறின் தரம் சாத்தியக் கூறினைக் காண்போம். ஒவ்வொரு ஹீலியம் அணுவும் இரு 1s எலக்ட்ரான்களைப் பெற்றுள்ளது. ஆக நான்கு எலக்ட்ரான்களுக்கு இடமமைத்துத் தரவேண்டும். $\sigma(1s)$ மூலக்கூறு ஆர்பிட்டலில் இரு எலக்ட்ரான்களும் $\sigma^*(1s)$ மூலக்கூறு ஆர்பிட்டலில் இரு எலக்ட்ரான்களும் இடம்பெறும். இது படத்தில் காட்டப்பட்டுள்ளது.

ஹீலியம் மூலக்கூறின் எலக்ட்ரான் ஒழுங்கமைப்பு = $(\sigma 1s)^2, (\sigma^* 1s)^2$



பிணைப்பு மற்றும் பிணை எதிர் ஆர்பிட்டல்கள் ஒவ்வொன்றிலும் தலா இரு எலக்ட்ரான்கள் உள்ளன. எனவே பிணைப்புத் தரம் = $\frac{1}{2} (2-2) = 0$ அதாவது, பிணைப்பின் தரம் பூஜ்ஜியம். வேறு வகையில் கூறின், இரு He அணுக்களுக்கிடையே பிணைப்பேதும் இருக்காது. அதாவது He மூலக்கூறு இருக்க வாய்ப்பில்லை என்பது விளங்குகிறது.

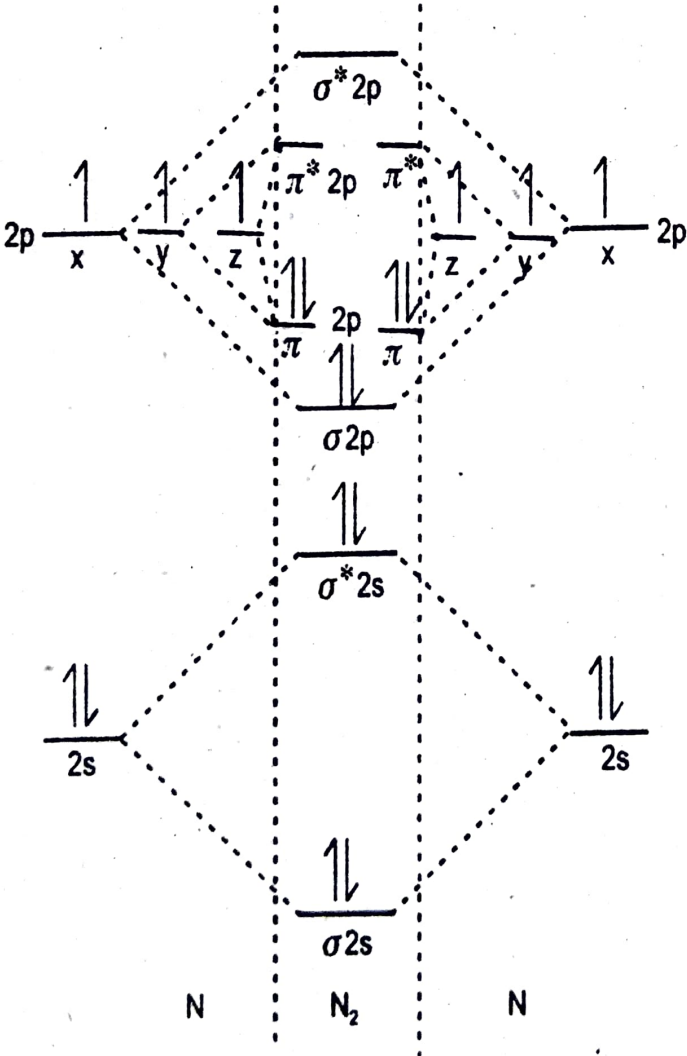
3. நைட்ரஜன் N_2 மூலக்கூறு :

N ன் எலக்ட்ரான் ஒழுங்கமைப்பு $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$. ஒவ்வொரு அணுவும் 5 (2+1+1+1) இணைதிற எலக்ட்ரான்களைத் தருகின்றன. மூலக்கூறில் படம் 2 ல் காட்டியுள்ளது போல, எட்டு மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல்கள் இருக்கும்.

இவற்றில் பத்து எலக்ட்ரான்கள் இடம் பெற வேண்டும். எட்டு எலக்ட்ரான்கள், பிணைப்பு மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல்களுக்கும், இரண்டு, பிணை எதிர் மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல்களுக்கும் செல்கின்றன. பிணைப்பு தரம் = $\frac{1}{2}(8-2) = 3$ இவ்வாறாக N_2 மூலக்கூறு ஒரு முப்பிணைப்பினைக் கொண்டுள்ளது.

N_2 வின் MO படத்திலிருந்து பின்வருவன புலனாகின்றன :

- பிணைப்பின் தரம் = $\frac{1}{2}$ (பிணைப்பு ஆர்பிட்டல்களிலுள்ள எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை - பிணை எதிர் ஆர்பிட்டல்களிலுள்ள எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை) = $\frac{1}{2}(8-2) = 3$.
- $\sigma(2s)$ மற்றும் $\sigma^*(2s)$ ஆகிய இரு ஆர்பிட்டல்களிலும் தலா இரண்டு எலக்ட்ரான்கள் உள்ளன. எனவே இவை பிணைப்பில் இல்லா எலக்ட்ரான்களாகிவிடுகின்றன. $\sigma(2p)$ MO வில் இரு எலக்ட்ரான்களும் $\pi(2p)$ MO க்களில் நான்கு எலக்ட்ரான்களும் உள்ளன. எனவே N_2 மூலக்கூறில் ஒரு σ பிணைப்பும் இரு π பிணைப்புகளும் உள்ளன.



- iii. MO க்களில் இணையாகா எலக்ட்ரான்கள் இல்லையாதலால் மூலக்கூறு டயா காந்தத் தன்மை பெற்றிருக்கும்.

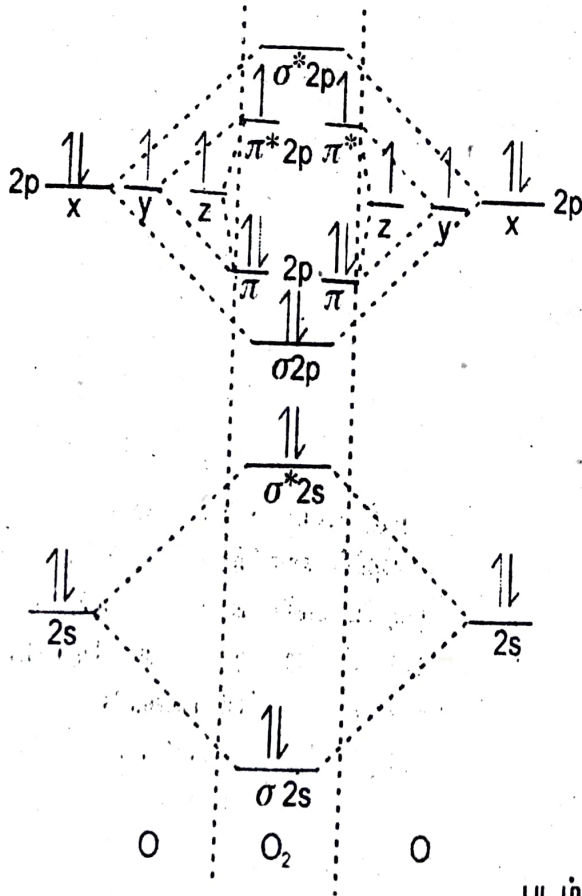
இவ்வாறாக N_2 வின் MO அமைப்பு அதன் பண்புகளை விளக்குகிறது.

4. ஆக்ஸிஜன் O_2 மூலக்கூறு :

O வின் எலக்ட்ரான் ஒழுங்கமைப்பு $1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^1 2p_z^1$. ஒவ்வொரு அணுவும் $6(2+2+1+1)$ இணைதிற எலக்ட்ரான்களைத் தருகின்றன. O_2 மூலக்கூறில் படம் 3 ல் காட்டியுள்ளது போல எட்டு மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல்கள் இருக்கும். இவற்றில் $12(6 \times 2)$ எலக்ட்ரான்கள் இடம் பெற வேண்டும். எலக்ட்ரான்கள் ஆஃபெள தத்துவத்தின் அடிப்படையில் நிரப்பப்படுகின்றன. எட்டு எலக்ட்ரான்கள், பிணைப்பு மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல்களுக்குச் செல்கின்றன. 2 எலக்ட்ரான்கள் $\sigma^*(2s)$ பிணை எதிர் மூலக்கூறு ஆர்பிட்டலுக்குச் செல்கின்றன. இரு எலக்ட்ரான்கள் சம ஆற்றல் பெற்ற $\pi^* 2p$ பிணை எதிர் இரு ஆர்பிட்டல்களுக்குத் தலா ஒன்று வீதம் செல்லுகின்றன. O_2 மூலக்கூறில் உள்ள பிணைப்புகளின் எண்ணிக்கை $= \frac{1}{2}(8-4) = 2$.

O_2 வின் MO படத்திலிருந்து பின்வருவன தெளிவாகின்றன.

- i. பிணைப்பு தரம் $= \frac{1}{2}$ (பிணைப்பு ஆர்பிட்டல்களில் உள்ள எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை - பிணை எதிர் ஆர்பிட்டல்களில் உள்ள எலக்ட்ரான்கள் எண்ணிக்கை) $= \frac{1}{2}(8-4) = 2$.



ii. சிக்மா பிணைப்புகளின் எண்ணிக்கை = $\frac{1}{2}$ (சிக்மா ஆர்பிட்டல்களில் உள்ள எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை - சிக்மா* ஆர்பிட்டல்களில் உள்ள எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை) = $\frac{1}{2}(4-2) = 1$. அதாவது ஒரு சிக்மாப் பிணைப்பு உள்ளது.

iii. π பிணைப்புகளின் எண்ணிக்கை = $\frac{1}{2}$ (π ஆர்பிட்டல்களில் உள்ள எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை - π^* ஆர்பிட்டல்களில் உள்ள எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை) = $\frac{1}{2}(4-2) = 1$.

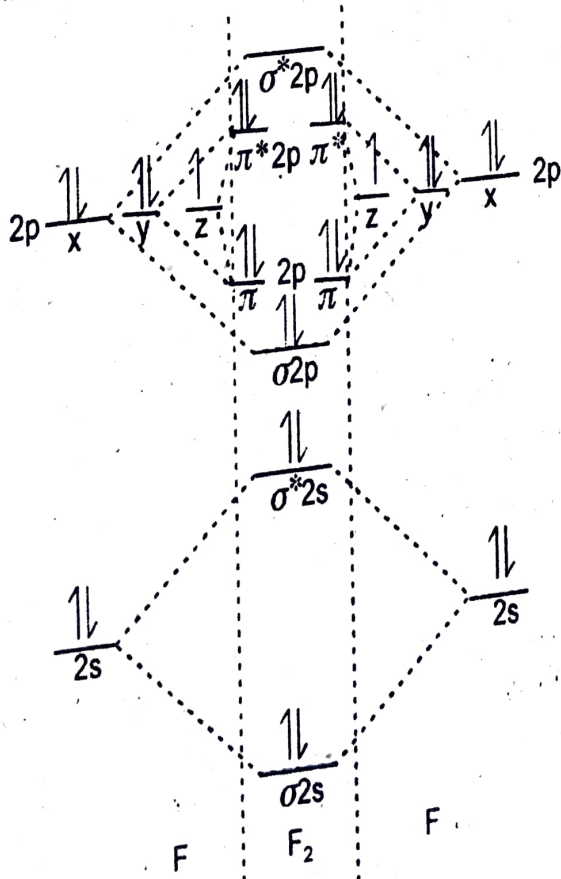
iv. சம ஆற்றல் பெற்ற இரு π^* ($2p$) ஆர்பிட்டல்களின் இரு இணையாகா எலக்ட்ரான் இருப்பதால் O_2 மூலக்கூறு பாராகாந்தத்தன்மையுடையதாக உள்ளது.

v. பிணைப்பு எலக்ட்ரான்களும் பிணை எதிர் எலக்ட்ரான்களுக்கும் இடையே எண்ணிக்கையில் உள்ள வேறுபாடு பிணைப்பின் இறுக்கத்தை நிர்ணயிக்கிறது. O_2 மூலக்கூறில் இவ்வேறுபாடு 4 ஆகும். எனவே இதன் பிணைப்பு ஆற்றல் அதிகம். இதற்கு ஈடான அளவில் பிரிகை ஆற்றலும் அதிகம்.

இவ்வாறாக, O_2 வின் MO அமைப்பு அதன் பண்புகளை விளக்குகிறது.

F. மூலக்கூறு :

F ன் எலக்ட்ரான் ஒழுங்கமைப்பு $1s^2 2s^2 2p_x^2 2p_y^2 2p_z^1$ உட்கூடுகளில் (1s) உள்ள எலக்ட்ரான்கள் பாதிக்கப்படுவதில்லை. F_2 மூலக்கூறு 8 மூலக்கூறு



ஆர்பிட்டல்களை உருவாக்குகிறது. அவையாவன : $(\sigma 2s)$, $(\sigma^* s)$, $(\sigma 2p)$, $(\pi 2p)$, $(\pi 2p)$, $(\pi^* 2p)$ மற்றும் $(\sigma^* 2p)$ இம்மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல்களில் நிரப்பி 14 எலக்ட்ரான்கள் உள்ளன. இவ்வாறாக F_2 வின் எலக்ட்ரான் உருவமைப்பு வருமாறு : $KK(\sigma 2s)^2$, $(\sigma^* 2s)^4$, $(\sigma 2p)^2$, $(\pi 2p)^4$, $(\pi^* 2p)^4$, $(\sigma^* 2p)^0$ பிணைப்புக்களின் எண்ணிக்கை அதாவது பிணைப்பின் தரம் = $\frac{1}{2}(8-6) = \frac{1}{2} \times 2 = 1$. இவ்வாறாக இரு F அணுக்கள் ஒரு ஒற்றைப் பிணைப்பினைக் கொண்ட மூலக்கூறு ஒன்றினை உருவாக்குகின்றன.

F_2 வின் MO படத்திலிருந்து பின்வருவன தெளிவாகின்றன.

1. பிணைப்பின் தரம் = $\frac{1}{2}$ (பிணைப்பு ஆர்பிட்டல்களிலுள்ள உள்ள எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை - பிணை எதிர் ஆர்பிட்டல்களில் உள்ள எலக்ட்ரான்கள் எண்ணிக்கை) = $\frac{1}{2}(8-4) = 2$.
2. சிக்மா பிணைப்புகளின் எண்ணிக்கை = $\frac{1}{2}$ (சிக்மா ஆர்பிட்டல்களில் உள்ள எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை - சிக்மா* ஆர்பிட்டல்களின் உள்ள எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை) = $\frac{1}{2}(6-4) = 2$. அதாவது F_2 மூலக்கூறில் ஒரு σ பிணைப்பு உள்ளது.
3. π பிணைப்புகளின் எண்ணிக்கை = $\frac{1}{2}$ (π ஆர்பிட்டல்களில் உள்ள எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை - π^* ஆர்பிட்டல்களில் உள்ள எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை) = $\frac{1}{2}(4-4) = 0$. அதாவது F_2 மூலக்கூறில் ஒரு π பிணைப்பு உள்ளது.

இவ்வாறாக, F_2 வின் MO அமைப்பு அதன் பண்புகளை விளக்குகிறது.

பல்கலைக் கழக வினாக்கள்

1. சகபிணைப்பு என்றால் என்ன?
2. மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல் என்பதை வரையறு.
3. M.O. கொள்கையின் முக்கியக் கருத்துக்கள் யாவை?
4. பிணைப்பு மற்றும் பிணைப்பு எதிர் மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல்கள் ஆகியவற்றை எவ்வாறு வேறுபடுத்திக் காட்டுவாய்?
6. மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல் கொள்கையின் பிணைதரம் என்பது யாது?
7. ஹைட்ரஜன் மூலக்கூற்றை மேற்கோளாகக் கொண்டு மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல்கள் கொள்கையை விளக்கு.
8. ஹைட்ரஜன் மூலக்கூறின் மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல் படம் வரைக.
10. ஹீலியத்தின் மூலக்கூறு ஆர்பிட்டல் அமைப்பை விளக்குக.