1. मॉड्यूल और इसकी संरचना का विवरण

मॉडच्यूल विस्तार	
विषय का नाम	रसायन विज्ञान
पाठचक्रम का नाम	रसायन विज्ञान 01 (कक्षा XI, सेमेस्टर 01)
मॉडच्यूल का नाम / शीर्षक	परमाणु की संरचना: भाग 4
मॉडच्यूल आईडी	kech_10204
आवश्यक पूर्व ज्ञान:	बोर का परमाणु मॉडल, हाइड्रोजन परमाणु का स्पेक्ट्रा
उद्देश्य	इस मॉडच्यूल के अध्ययन के बाद आप सक्षम हो जायेंगे: 1. परमाणु के क्वांटम यांत्रिक मॉडल को समझ पाएंगे। 2. हाइड्रोजन परमाणु और श्रोडिंगर समीकरण को सहसंबंधित कर पाएंगे। 3. कक्षक और क्वांटम संख्याओं का वर्णन कर पाएंगे। 4. विभिन्न परमाणु कक्षकों के आक्रितइ आक्रिति आकृतिआकार बना पाएंगे।
प्रमुख शब्द (की वर्ड्स)	क्वांटम यांत्रिकी, कोश, उपकोश, दिगंशी क्वांटम संख्या, चुंबकीय कक्षीय क्वांटम संख्या, इलेक्ट्रॉन प्रचक्रण क्वांटम संख्या, परमाणु कक्षक, नोड्स

2. विकास दल

भूमिका	नाम	संबद्धता
राष्ट्रीय एमओओसी समन्वयक (एनएमसी)	प्रो. अमरेन्द्र पी. बेहरा	CIET, NCERT, नई दिल्ली
कार्यक्रम समन्वयक	डॉ. मो. मामूर अली	CIET, NCERT, नई दिल्ली
पाठचक्रम समन्वयक (CC) / पी.आई.	प्रो. आर. के. पराशर	DESM, NCERT, नई दिल्ली
पाठचक्रम समन्वयक / सह-पी.आई.	डॉ. एरुम खान	CIET, NCERT, नई दिल्ली
विषय-वस्तु विशेषज्ञ (SME)	डॉ. के. के. अरोड़ा डॉ. के. के. शर्मा	जाकिर हुसैन दिल्ली कॉलेज (दिल्ली विश्वविद्यालय), दिल्ली राजकीय कॉलेज अजमेर, राजस्थान

समीक्षा टीम	डॉ. नीती मिश्रा डॉ. एरुम खान	आचार्य नरेंद्र देव कॉलेज, नई दिल्ली CIET, NCERT, नई दिल्ली
अनुवादक	डॉ अमर श्रीवास्तव	एसोशिएट प्रोफेसर रसायन विज्ञान विभाग, डी.ए.वी. कॉलेज, कानपुर 208001, उत्तर प्रदेश

विषय सूची

1. परिचय

2. परमाणु का क्वाटंम यांत्रिकीय माडॅल

3. हाइड्रोजन परमाणु तथा श्रोडिंगर समीकरण

4. कक्षक और क्वांटम संख्याएँ

    4.1 मुख्य क्वांटम संख्या

    4.2 दिगंशी क्वांटम संख्या

    4.3 चुम्बकीय कछ्क क्वांटम संख्या

    4.4 इलेक्ट्रॉन प्रचक्रण‘s’

    4.5 परमाणु कक्षकों की आकृतियाँ

5. सारांश

1. परिचय

पिछले मॉड्यूल में आपने विद्युत चुम्बकीय विकिरणों के द्वैत व्यवहार, प्रकाश वैदुत प्रभाव और हाइड्रोजन परमाणु के रेखीय स्पेक्ट्रम के बारे में सीखा है। इन प्रेक्षणों के आधार पर, बोर ने परमाणु की संरचना के लिए एक मॉडल का प्रस्ताव दिया, जो हाइड्रोजन जैसे स्पीशीस के रेखीय स्पेक्ट्रम की व्याख्या कर सकता है जिसका आप इस मॉड्यूल में अध्ययन करेंगे।

2. परमाणु का क्वाटंम यांत्रिकीय माडॅल

जैसा पूर्व खंड में बतलाया गया है, न्यूटन के 'गति के नियमों' के आधार पर विकसित चिरसम्मत यांत्रिकी द्वारा स्थूल पदार्थों (जैसे, गिरते हुए पत्थर, चक्कर लगाते हुए ग्रहों आदि), जिनका व्यवहार कण जैसा होता है, की गति का सफलतापूर्वक वर्णन किया जा सकता है, किंतु जब इसे अति सूक्ष्म कणों (जैसे, इलेक्ट्रॉनों, अणुओं और परमाणु) पर लागू किया जाता है, तो यह विफल हो जाता है। ऐसा होने का कारण यह है कि चिरसम्मत यांत्रिकी द्रव्य रूप से अवपरमाणविक कणों के दोहरे व्यवहार की सकंल्पना तथा अनिश्चितता नियम की उपेछा करती है। द्रव्य के दोहरे व्यवहार को ध्यान में रखकर विकसित विज्ञान को क्वांटम यांत्रिकी (quantum mechanics) कहते हैं।

क्वांटम यांत्रिकी एक सैद्धांतिक विज्ञान है, जिसमें उन अति सूक्ष्म वस्तुओं की गतियों का अध्ययन किया जाता है, जो तरंग और कण दोनों के गुण दर्शाती हैं। यह ऐसी वस्तुओं की गति के नियमों को निश्चित करती है। जब क्वांटम यांत्रिकी को स्थूल वस्तुओं (जिनके लिए तरंगीय गुण अतिन्यून होते हैं) पर लागू किया जाता हैं, तब चिरसम्मत यांत्रिकी के परिणामों जैसे ही परिणाम प्राप्त होते हैं।

सन् 1926 में वर्नर हाइजेनबर्ग और इर्विन श्रोडिंगर द्वारा अलग-अलग क्वांटम यांत्रिकी का विकास किया गया। यहाँ पर हम श्रोडिंगर द्वारा विकसित 'क्वांटम यांत्रिकी' पर ही चर्चा करेंगे, जो तरंगों की गति के विचारों पर आधारित है। क्वांटम यांत्रिकी का मूल समीकरण श्रोडिंगर द्वारा प्रतिपादित किया गया। इसके लिए उन्हें सन् 1933 में भौतिकी का नोबेल पुरस्कार प्रदान किया गया। यह समीकरण, जो दे ब्राग्ली द्वारा बताए गए पदार्थ के कण और तरंग वाले दोहरे व्यवहार को ध्यान में रखता है, काफी जटिल है। इसका हल करने के लिए उच्च गणित का परिपक्व ज्ञान होना आवश्यक है। इस समीकरण को विभिन्न निकायों पर लागू करने के बाद प्राप्त हलों के बारे में आप आगे की कक्षाओं में पढ़ेंगे।

ऐसे निकाय (जैसे, एक परमाणु या अणु, जिसकी ऊर्जा समय के साथ परिवर्तित नहीं होती है) के लिए श्रोडिंगर समीकरण को इस प्रकार लिखा जाता है:

$\hat{H}\psi = E\psi$ जहाँ $\hat{H}$ एक गणितीय संकारक (operator) है, जिसे 'हेमिल्टोनियन' कहते हैं। श्रोडिंगर ने बताया कि निकाय की कुल ऊर्जा के व्यंजक से इस संकारक को कैसे लिखा जा सकता है। किसी निकाय की कुल उर्जा उसके अवपरमाणविक कणों (इलेक्ट्रॉन और नाभिक) की गतिज ऊर्जा इलेक्ट्रॉनों तथा नाभिकों के बीच आकर्षण एवं प्रतिकर्षण विभव से संबंधित है। इस समीकरण के हल से E तथा ψ के मान प्राप्त होते हैं।

3. हाइड्रोजन परमाणु तथा श्रोडिंगर समीकरण

जब श्रोडिंगर समीकरण को हाइड्रोजन परमाणु के लिए हल किया जाता है, तब उससे इलेक्ट्रॉन के संभव ऊर्जा-स्तर और उनके संगत तरंग-फलन (ψ) प्राप्त होते हैं। ये क्वांटित ऊर्जा-स्तर तथा उनके संगत तरंग-फलन श्रोडिंगर -समीकरण के हल के फलस्वरूप प्राप्त होते हैं। इन्हें तीन क्वांटम-संख्याओं- [(मुख्य क्वांटम संख्या n (principal quantum number), दिगंशी क्वाटंम सख्ंया l (azimuthal quantum number) तथा चुंबकीय क्वांटम संख्या, ml (magnetic quantum number)] द्वारा निर्दिष्ट किया जाता है, जो श्रोडिंगर समीकरण के प्राकृतिक हल से प्राप्त होती हैं। जब इलेक्ट्रॉन किसी ऊर्जा स्तर में रहता है, तो उसके संगत तरंग-फलन में इलेक्ट्रॉन के बारे में सही जानकारी विद्यमान होती है। तरंग-फलन एक गणितीय फलन है, जिसका मान परमाणु में इलेक्ट्रॉन के निर्देशांकों पर निर्भर करता है। इसका कोई भौतिक अर्थ नहीं होता है। हाइड्रोजन और उसके समान स्पीशीश के ऐसे एक इलेक्ट्रॉन तरंग-फलन को 'परमाणु कक्षक' (atomic orbitals) कहते हैं। इस प्रकार के एक इलेक्ट्रॉन स्पीशीश के तरंग-फलन एक इलेक्ट्रॉनी निकाय कहलाते हैं। एक परमाणु में किसी बिंदु पर इलेक्ट्रॉन पाए जाने की प्रायिकता उस बिंदु पर $|\psi|2$ के समानुपाती होती है। हाइड्रोजन परमाणु के लिए क्वांटम यांत्रिकी द्वारा प्राप्त परिणाम हाइड्रोजन परमाणु के स्पेक्ट्रम के सभी पहलुओं की सफलतापूर्वक प्रागुक्ति (predict) करते हैं। इसके अतिरिक्त यह उन कुछ परिघटनाओं की भी व्याख्या करता है, जो बोर मॉडल द्वारा स्पष्ट नहीं की जा सकीं। श्रोडिंगर समीकरण को बहु-इलेक्ट्रॉन परमाणुओं पर लागू करने पर प्रायः कुछ कठिनाइयाँ सामने आती हैं। हाइड्रोजन परमाणु तथा श्रोडिंगर समीकरण के लिए श्रोडिंगर समीकरण का यथार्थ (exact) हल नहीं दिया जा सकता था। इस कठिनाई को सन्निकटन (approximate) विधि के उपयोग द्वारा दूर किया गया। कंप्यूटर से गणना करने पर पता चलता है कि हाइड्रोजन के अतिरिक्त अन्य परमाणुओं के हाइड्रोजन परमाणु के कक्षकों से बहुत अधिक भिन्न नहीं हैं। इनमें मुख्य भिन्नता नाभिक में आवेश बढ़ने के कारण होती है। फलतः कक्षक कुछ छोटे हो जाते हैं। आप आगे पढ़ेगे कि बहु-इलेक्ट्रॉन परमाणुओं के कक्षकों की ऊर्जाएँ n और l क्वांटम संख्याओं पर निर्भर करती है, जबकि हाइड्रोजन परमाणु और उसके समान स्पीशीश के कक्षकों की ऊर्जा केवल n क्वांटम संख्या पर निर्भर करती है।

परमाणु के क्वांटम यांत्रिकीय माडॅल के प्रमुख लक्षण परमाणु का क्वांटम यांत्रिकीय माडॅल परमाणु-संरचना का वह चित्र है जो परमाणुओं पर श्रोडिंगर समीकरण लागू करने से प्राप्त होता है, परमाणु के क्वांटम यांत्रिकीय माडॅल के महत्त्वपूर्ण लक्षण निम्नलिखित हैं:

a. परमाणुओं में इलेक्ट्रॉनों की ऊर्जा क्वांटित होती है, अथार्त् इसके केवल कुछ विशेष मान ही हो सकते हैं। उदाहरण के लिए, जब परमाणुओं में इलेक्ट्रॉन नाभिक बंधे होते हैं।

b. इलेक्ट्रॉनों के तरगं जैसे गुणों के कारण क्वांटित इलेक्ट्रॉनिक ऊर्जा-स्तरों का अस्तित्व होता है और श्रोडिंगर तरंग समीकरण के अनुमत हल होते हैं।

c. किसी परमाणु में इलेक्ट्रॉन की सही स्थिति तथा सही वेग को एक साथ ज्ञात नहीं किया जा सकता है (हाइजेनबर्ग अनिश्चितता सिद्धांत) अतः किसी परमाणु में इलेक्ट्रॉन के पथ को सुनिश्चित ज्ञात नहीं किया जा सकता है। इसीलिए हम परमाणु के विभिन्न बिंदुओं पर इलेक्ट्रॉन के होने की प्रायिकता (probability) की संकल्पना के बारे में बात करते हैं। इसके बारे में आप आगे पढ़ेंगे।

d. किसी परमाणु में इलेक्ट्रॉन के तरंग-फलन ψ को 'परमाणु कक्षक' कहते हैं। जब एक तरंग-फलन द्वारा किसी इलेक्ट्रॉन की व्याख्या की जाती है, तो हम यह कहते हैं कि इलेक्ट्रॉन उस कक्षक में उपस्थित है।

चूँकि किसी इलेक्ट्रॉन के लिए बहतु से तरगं-फलन हो सकते हो हैं, अत: परमाणु में कई परमाणु कक्षक होते हैं। परमाणुओं की इलेक्ट्रॉनिक सरंचना, इन 'एक इलेक्ट्रॉन कक्षक तरगं-फलनों' या कक्षकों पर ही आधारित है। प्रत्येक कक्षक में इलेक्ट्रॉन की ऊर्जा निश्चित होती है। किसी भी कक्षक में दो से अधिक इलेक्ट्रॉन नहीं रह सकते हैं। किसी बह-ुइलेक्ट्रॉन परमाणु में ऊर्जा के बढ़ते हुए क्रम में विभिन्न कक्षकों में इलेक्ट्रॉन भरे जाते हैं। अत: बहु-इलेक्ट्रॉन परमाणु में प्रत्येक इलेक्ट्रॉन के लिए एक कक्षक तरंग-फलन होता है, जो उस कक्षक का अभिलाक्षणिक होता है, जिसमें इलेक्ट्रॉन उपस्थित होता है। परमाणु में इलेक्ट्रॉन के बारे में सारी जानकारियाँ उसके कक्षक तरंग-फलन ψ में उपस्थित हार्ती है तथा क्वाटंम यांत्रिकी के द्वारा ψ से इस जानकारी को प्राप्त करना संभव हो पाता है।

e. किसी में किसी बिंदु पर इलेक्ट्रॉन के उपस्थित होने की प्रायिकता उस बिंदु पर कक्षक तरंग-फलन के वर्ग के समानपुाती होती है, अर्थात उस बिंदु पर $|\psi|^2$ को प्रायिकता घनत्व (probability density) कहा जाता है। यह हमेशा धनात्मक होता है। किसी परमाणु के विभिन्न बिंदुओं पर $|\psi|2$ के मान से नाभिक के चारों ओर उस क्षेत्र का पता लगाना संभव है, जहाँ पर इलेक्ट्रॉन के पाए जाने की संभावना अधिक होगी।

4. कक्षक और क्वांटम संख्याएँ

किसी परमाणु में कई कक्षक संभव होते हैं। गुणात्मक रूप में इन कक्षकों में उनके आकार, आकृति और अभिविन्यास के आधार पर अंतर किया जा सकता है। छोटे आकार के कक्षक का अर्थ यह है कि नाभिक के पास इलेक्ट्रॉन के पाए जाने की प्रायिकता अधिक है। इसी प्रकार, आकृति और अभिविन्यास यह बताते हैं कि इलेक्ट्रॉन पाए जाने की प्रायिकता किसी दूसरी दिशा की तुलना में एक दिशा में अधिक है। क्वाटंम संख्याओं द्वारा परमाणु कक्षकों में अतंर किया जा सकता है। प्रत्येक कक्षक को तीन क्वांटम संख्याओं n, l और ml द्वारा दर्शाया जाता है।

4.1 मुख्य क्वाटंम सख्ंया 'n'

यह एक धनात्मक पूर्णांक है जिसका इसका मान 1,2,3..... आदि हो सकता है। मुख्य क्वाटंम सख्ंया से कक्षक के आकार और काफी हद तक उसकी ऊर्जा के बारे में पता चलता है। हाइड्रोजन और उस जैसे निकायों (He^+, Li^{2+},आदि) के लिए यह अकेले ही कक्षक के आकार तथा ऊर्जा को निर्धारित करता है। मुख्य क्वाटंम सख्ंया से कोश (shell) का भी पता चलता है। n का मान बढ़ने के साथ अनमुत कक्षकों की सख्ंया भी बढती है। इसे n2 द्वारा दिया जाता है। n के निश्चित दिए गए मान के लिए सभी कक्षक परमाणु का एक कोश बनाते है। उन्हें निम्नलिखित अक्षरों द्वारा दशार्या जाता है,

n = 1 2 3 4 ……

कोश = K L M N ……

मुख्य क्वांटम संख्या भी बढ़ने के साथ कक्षा का आकार बढ़ता है। दूसरे शब्दों में, इलेक्ट्रॉन नाभिक से दूर स्थित होते हैं। चूँकि एक ऋणावेशित इलेक्ट्रॉन को धनावेशित नाभिक से दूर होने के लिए ऊर्जा की आवश्यकता होती है, अत: n के बढ़ने से कक्षक की ऊर्जा बढ़ेगी।

4.2 दिगंशीय क्वांटम संख्या ‘l’

इसको कक्षक क्वांटम संख्या (orbital quantum number), कक्षक कोणीय संवेग (orbital angular momentum) या भौम क्वांटम संख्या (subsidiary quantum number) भी कहते हैं। यह कक्षक के त्रिविमीय आकार को परिभाषित करती है। n के दिए गए मान के लिए l के 0 से n-1 तक n मान हो सकते हैं। अर्थात् n के दिए गए मान के लिए l के मान 0, 1, 2, ……(n-1) हो सकते हैं। उदाहरण के लिये, जब n=1 होता है तो l का केवल एक मान 0 होता है, n=2 के लिए l के संभव मान 0 तथा 1 हो सकते हैं, n=2 के लिए l के संभव मान 0, 1 और 2 होंगे। प्रत्येक कोश में एक या अधिक उपकोश (subshells) या उप-स्तर (sub levels) होते हैं। किसी मुख्य कोश में उपकोशों की सख्या n के बराबर होती है। उदाहरण के लिये, पहले कोश (n=1) में केवल एक उपकोश होता है, जो l=0 के संगत होता है। इसी प्रकार, (n=2) कोश में दो उप-कोश (l=0, 1), n=3 में तीन उपकोश (l=0, 1, 2) होते हैं। n के अन्य मानों के लिए भी ऐसा लिखा जा सकता है। किसी कोश के उपकोशों को दिगंशीय क्वांटम संख्या (l) द्वारा प्रदर्शित करते हैं। l के विभिन्न मानों के संगत उप-कोशों को निम्नलिखित चिन्हों द्वारा दर्शाया जाता है,

l के मान: 0, 1, 2, 3, 4, 5 .....

उप-कोश के लिए संकेतन (notations) s, p d, f……..

सारणी 1 में दी गई मुख्य क्वांटम संख्या के लिए l के संभव मान और संगत उप-कोशों के संकेतन दिए गए हैं।

सारणी 1: उप-कोश संकेतन

n	l	उपकोश संकेतन
1	0	$1s$
2	0	$2s$
2	1	$2p$
3	0	$3s$
3	1	$3p$
3	2	$3d$
4	0	$4s$
4	1	$4p$
4	2	$4d$
4	3	$4f$

4.3 चुम्बकीय कक्षक क्वांटम संख्या m_l

चुम्बकीय कक्षक क्वांटम संख्या m_l (magnetic orbital quantum number) समन्वय अक्ष के संगत कक्षकों के त्रिविम अभिविन्यास के बारे में जानकारी देती है। किसी उपकोश के लिए m_l के $2l+1$ मान संभव हैं। इन मानों को इस प्रकार दिया जाता है:

m_l = -l, -(l-1), -(l-2)……,0, 1,……(l-2), (l-1), l

अत: l=0 के लिए ml का एक ही स्वीकृत मान 0 होता है, अर्थात् 2(0)+1 = 1, एक s कक्षक होता है। l=1 के लिए, m_l = -1,0,+1 हो सकता है 2(1)+1 = 3p कक्षक। l = 2 के लिए ml = -2, -1, 0, +1, +2 पाचँ d कक्षक हो सकता है। स्मरणीय है कि ml के मान l से और l के मान n से प्राप्त होते हैं।

चुम्बकीय कक्षक किसी परमाणु में प्रत्येक कक्षक n, l और ml मानों के समुच्चय द्वारा परिभाषित किया जाता है। अत: क्वांटम संख्याओं n = 2, l = 1, m_l = 0 द्वारा वर्णित कक्षक ऐसा कक्षक होता है, जो दूसरे कोश के p उपकोश में होता है। यहाँ दी जा रही तालिका में उप-कोश और उससे संबंधित कक्षकों की संख्या का संबंध दिया गया है:

l का मान	0	1	2	3	4	5
उप कोश संकेतन	*s*	*p*	*d*	*f*	*g*	*h*
कक्षकों की संख्या	1	3	5	7	9	11

4.4 इलेक्ट्रॉन प्रचक्रण (Electron spin) s:

किसी परमाणुओं कक्षक के लिए चिन्हित तीनों क्वाटंम सख्ंयाओं को उसकी उर्जा, आकार और अभिविन्यास को परिभाषित करने में प्रयुक्त किया जा सकता है लेकिन बहु-इलेक्ट्रॉन परमाणुओं में देखे गए रेखीय स्पेक्ट्रा की व्याख्या करने में ये क्वाटंम सख्ंयाएँ पर्याप्त नहीं हैं। इनमें कुछ रेखाएँ द्विक (दो रेखाएँ पास-पास) तथा कुछ रेखाएँ त्रिक (तीन रेखाएँ पास-पास) होती हैं। तीनों क्वाटंम सख्ंयाओं द्वारा अनमुानित ऊर्जा के अलावा यह कुछ और उर्जा-स्तरों की उपस्थिति का संकेत करता है।

सन 1925 में जोर्ज उहलेनबैक (George Uhlenback) और सैमुअल गाउटस्मिट (Samuel Goudsmit) ने एक चौथी क्वांटम संख्या की उपस्थिति प्रतिपादित की, जो इलेक्ट्रॉन प्रचक्रण क्वांटम संख्या (ms) कहलाती है। एक इलेक्ट्रॉन अपने अक्ष पर ठीक वैसे ही प्रचक्रण करता है, जैसे सूर्य के चारों ओर चक्कर काटते समय पृथ्वी अपने अक्ष पर प्रचक्रण करती है। दूसरे शब्दों में, इलेक्ट्रॉन में आवेश और द्रव्यमान के अतिरिक्त नैज (intrinsic) प्रचक्रण कोणीय संवेग होता है। इलेक्ट्रॉन का कोणीय संवेग एक सदिश (vector) राशि है। इसके किसी चुने हुए अक्ष के सापेक्ष दो अभिविन्यास हो सकते हैं, जिन में प्रचक्रण क्वांटम संख्या ms के द्वारा भेद किया जा सकता है। m_s का मान +1/2 या -1/2 हो सकता है। इन्हें इलेक्ट्रॉन की दो प्रचक्रण अवस्थाएं (spin states) भी कहते हैं। आमतौर पर वे तीरों ↑ (ऊपरी प्रचक्रण, spin up) और ↓ (निचला प्रचक्रण, spin down) द्वारा दर्शाए जाते हैं। विभिन्न ms मान वाले

दो इलेक्ट्रॉनों (एक +1/2 और दूसरा -1/2) विपरीत प्रचक्रण वाले कहलाते हैं। किसी कक्षक में दो से अधिक इलेक्ट्रॉन नहीं हो सकते हैं; इन दोनों इलेक्ट्रॉनों का विपरीत प्रचक्रण होना चाहिए।

संक्षेप में, हम यह कह सकते हैं कि चारों क्वांटम संख्याएँ निम्नलिखित जानकारियाँ देती हैं:

(i) n से कोश का बोध होता है। यह कक्षक का आकार और काफी हद तक ऊर्जा निर्धारित करता है।

(ii) n^{th} कोश में n उप-कोश होते हैं। l कक्षक की आकृति बताता है। प्रत्येक प्रकार के उप-कोश में (2l+1) कक्षक होते हैं, अर्थात प्रत्येक के उप-कोश में एक s कक्षक (l=0), तीन p कक्षक (l=1) और 5d कक्षक (l=2) हो सकते हैं। l कुछ हद तक बह-ुइलेक्ट्रॉनों परमाणु के कक्षक की ऊर्जा का भी निधार्रण करता है।

(iii) ml कक्षक के अभिविन्यास को प्रदर्शित करता है। l के दिए गए किसी मान के लिए उस के (2l+1) मान होते हैं। इतनी ही संख्या प्रत्येक उप-कोश में कक्षकों की होती है। इसका अर्थ यह है कि कक्षकों की सख्ंया उनके अभिविन्यासों के तरीकों के बराबर होती है।

(iv) इलेक्ट्रॉन के प्रचक्रण के अभिविन्यास को ms बताता है।

कक्षा, कक्षक एवं इनका महत्त्व

'कक्षा' तथा 'कक्षक' का अर्थ समान नहीं है। कक्षा (जिसे बोर ने प्रतिपादित किया) नाभिक के चारों ओर एक वृत्ताकार पथ होता है, जिसमें इलेक्ट्रॉन गति करता है। 'हाइजेनबर्ग के अनिश्चितता सिद्धांत' के अनुसार, इलेक्ट्रॉन के इस पथ का सही निर्धारण करना असंभव है। अत: बोर की कक्षाओं का कोई वास्तविक अर्थ नहीं है। इनके अस्तित्व को कभी भी प्रयोगों द्वारा दशार्या नहीं जा सकता। इसके विपरीत कक्षक एक क्वांटम यांत्रिकीय धारणा है। यह परमाणु में किसी एक इलेक्ट्रॉन के तरंग-फलन ψ का वर्णन करता है। इसे तीन क्वांटम संख्याओं (n, l और m_l) द्वारा प्रदर्शित किया जा सकता है। इसका मान इलेक्ट्रॉन के निर्देशांकों पर निभर्र करता है। वैसे तो ψ का कोई भौतिक अर्थ नहीं होता है, परंतु तरंग-फलन के वर्ग अथार्त $|\psi|^2$ का भौतिक अर्थ होता है, किसी परमाणु के किसी बिंदु पर $|\psi|^2$ उस बिंदु पर प्रायिकता घनत्व का मान देता है, प्रायिकता घनत्व $|\psi|^2$ प्रति इकाई आयतन प्रायिकता का मान होता है। $|\psi|^2$ और एक छोटे आयतन (जिसे आयतन अवयव कहा जाता है) का गुणनफल इलेक्ट्रॉन के उस आयतन के पाए जाने की प्रायिकता को व्यक्त करता है। (यहाँ कम आयतन लेने का एक कारण यह है कि $|\psi|^2$ का मान त्रिविम में एक क्षेत्र से दूसरे क्षेत्र में बदला रहता है, परंतु एक छोटे आयन अवयव में इसके मान को स्थिर माना जा सकता है)। किसी दिए गए निश्चित आयतन में इलेक्ट्रॉन के पाए जाने की कुल प्रायिकता $|\psi|^2$ और सगंत आयतन अवयवों के समस्त गुणनफलों को जोड़कर प्राप्त की जा सकती है। इस प्रकार किसी कक्षक में संभावित इलेक्ट्रॉन वितरण का पता लगाना संभव है।

प्रश्न 1:

मुख्य क्वांटम संख्या n = 3 से संबंधित कक्षकों की कुल संख्या क्या होती है?

हल:

n = 3 के लिए, ल के 0, 1 तथा 2 मान संभव हैं।

इसलिए एक 3s कक्षक होता है, जिसके लिए, n = 1, l = 0 और ml = 0) होते हैं; तीन 3p कक्षक होते हैं, जिनके लिए n = 3, l = 1 और ml = -1, 0, +1) होते हैं। इसी प्रकार, पाँच 3d कक्षक होते हैं, जिनके लिए n = 3, l = 2 और ml = -2, -1, 0, +1, +2) हो सकता है। इसलिए कक्षकों की कुल संख्या = 1 + 3 + 5 = 9

कक्षकों की संख्या = n2, अर्थात् 32 = 9 संबंध का उपयोग करके भी समान मान प्राप्त किए जा सकते हैं।

प्रश्न 2:

s, p, d, f संकेतन का प्रयोग करके निम्नलिखित क्वांटम संख्याओं वाले कक्षक के बारे में बताइए:

1. n = 2, l = 1, (ख) n = 4, l = 0, (ग) n = 5, l = 3, (घ) n = 3, l = 2

हल:

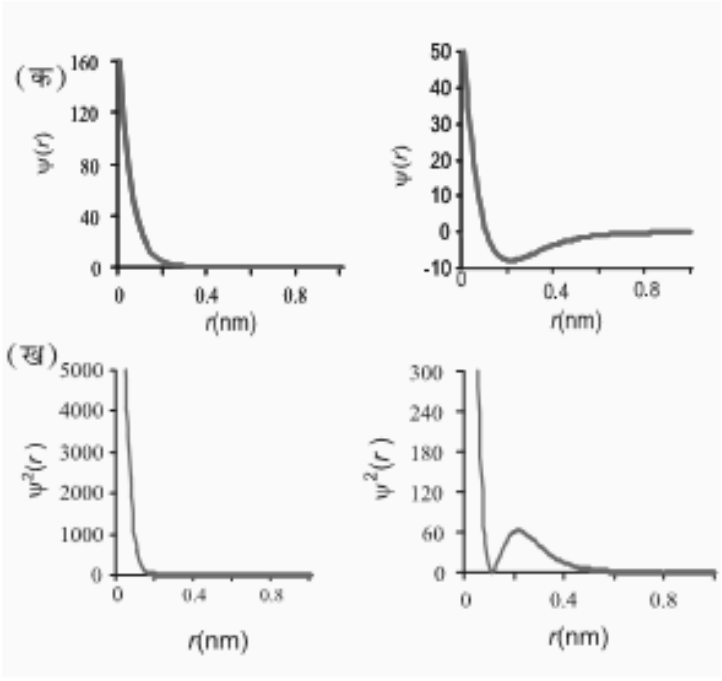
	N	*L*	कक्षक
क)	2	1	2p
ख)	4	0	4s
ग)	5	3	5f
घ)	3	2	3d

4.5 परमाणु कक्षकों की आकृतियाँ

किसी परमाणु में इलेक्ट्रॉन के कक्षक तरंग-फलन अथवा ψ का अपने आपमें कोई भौतिक अर्थ नहीं होता है। यह केवल इलेक्ट्रॉन के निर्देशांकों (coordinates) का गणितीय फलन होता है। यद्यपि विभिन्न कक्षकों के लिए r (नाभिक से दूरी) के फलन के रूप में संगत तरंग-फलन आरेख भिन्न होते हैं। (चित्र 1(क) 1s (n = 1. l = 0) तथा 2s (n = 2, l = 0) कक्षकों के इस प्रकार के आरेख को व्यक्त करता है।

जर्मन भौतिक विज्ञानी मेक्स बोर्न ने बताया कि किसी बिंदु पर तरंग-फलन का वर्ग (अर्थात् ψ^2) उस बिंदु पर इलेक्ट्रॉन के घनत्व की प्रायिकता को दर्शाता है। चित्र 1(ख) में 1s तथा 2s कक्षक के लिए ψ^2 के परिवर्तन को r के फलन के रूप में दर्शाया गया है। यहाँ आप देख सकते हैं कि 1s तथा 2s के वक्र भिन्न हैं। यह देखा जा सकता है कि कक्षक प्रायिकता घनत्व नाभिक पर अधिकतम है, जो नाभिक से दूर जाने पर घटता जाता है। दूसरी ओर, 2s कक्षक के लिए प्रायिकता घनत्व पहले तेजी से शून्य तक घटता है, फिर बढ़ना प्रारंभ होता है। जैसे-जैसे r का मान बढ़ता है, वैसे-वैसे एक लघु अधिकतम (small maxima) के पश्चात् यह पुनः शून्य के निकट तक घटता है। वह क्षेत्र, जहाँ यह प्रायिकता घनत्व शून्य हो जाता है,

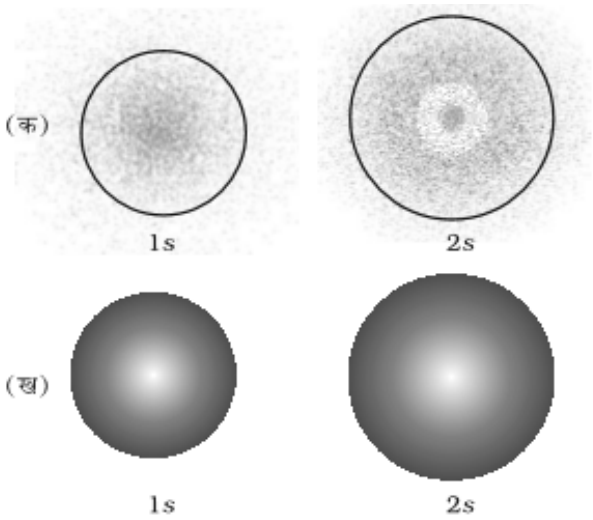
'नोडल सतह'(nodal surface) या 'नोड' (node) कहलाता है। सामान्यतः ns कक्षक के (n-1) नोड होते हैं, अर्थात् मुख्य क्वांटम संख्या n के साथ नोडों की संख्या बढ़ जाती है। दूसरे शब्दों में, 2s कक्षक के लिए नोडों की संख्या एक तथा 3s के लिए दो होती है। आगे के कक्षकों के लिए भी यह इसी प्रकार बढ़ती है।



चित्र 1 (क) कक्षकीय तरंग-फलन ψ(r) के आरेख (ख) 1s एवं 2s कक्षकों के लिए r के फलन के रूप में प्रायिकता घनत्व $\psi^2(r)$ में परिवर्तन के आरेख।

ये प्रायिकता घनत्व परिवर्तन आवेश - अभ्र के पदों में समझे जा सकते हैं (चित्र 2(क))। इन चित्रों में बिंदुओं (dots) का घनत्व उस क्षेत्र में इलेक्ट्रॉन प्रायिकता घनत्व दर्शाता है। कक्षकों की आकृति को विभिन्न कक्षकों के लिए स्थिर प्रायिकता घनत्व वाले सीमा-सतह आरेखों (boundary surface diagrams) द्वारा काफी सही ढंग से प्रदर्शित किया जा सकता है। इस निरूपण में किसी कक्षक के लिए एक ऐसी परिसीमा-सतह या परिपृष्ठ (contour surface) को आरेखित किया जाता है, जिसपर प्रायिकता घनत्व $|\psi|^2$ का मान स्थिर है।

सैद्धांतिक रूप में, किसी कक्षक के लिए ऐसे कई परिसीमा-सतह आरेख संभव होते हैं, परंतु किसी दिए गए कक्षक के लिए स्थिर प्रायिकता घनत्व' वाले केवल वे परिसीमा-सतह आरेख ही कक्षक की आकृति के अच्छे निरूपण माने जाते हैं, जिनके द्वारा निर्धारित क्षेत्र या आयतन में इलेक्ट्रॉन के पाए जाने की प्रायिकता काफी अधिक (जैसे 90%) होती है। 1s एवं 2s कक्षकों के लिए परिसीमा-सतह आरेखों को चित्र 2(ख) में दशार्या गया है।



चित्र 2.(क) 1s एवं 2s परमाणु कक्षकों के लिए प्रायिकता घनत्त्व आरेख बिंदुओं का घनत्व उस क्षेत्र में इलेक्ट्रॉन पाए जाने के प्रायिकता-घनत्व को दर्शाता है। (ख) 1s एवं 2s कक्षकों के लिए परिसीमा-सतह आरेख

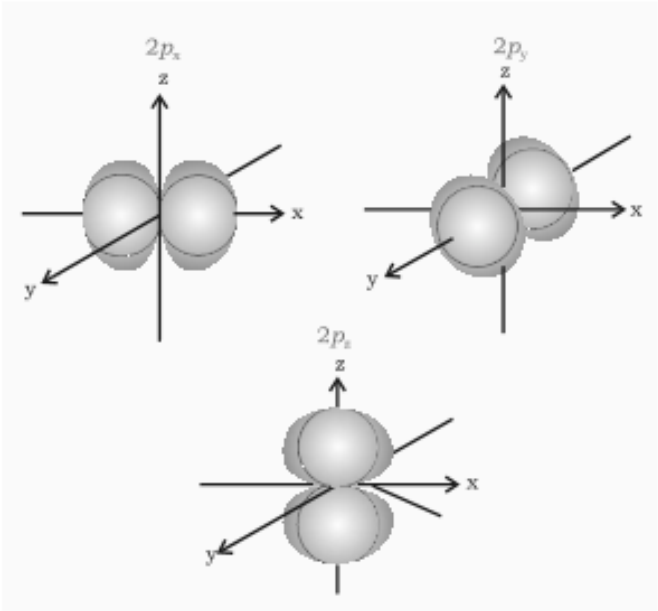
आप पूछ सकते हैं कि हम ऐसा परिपृष्ठ आरेख क्यों नहीं बनाते हैं, जिसमें इलेक्ट्रॉन पाए जाने की प्रायिकता 100% हो? इसका उत्तर यह है कि नाभिक से किसी निश्चित दूरी पर भी इलेक्ट्रॉन के पाए जाने की कुछ प्रायिकता अवश्य होती है, भले ही उसका मान बहुत कम क्यों न हो। इसलिए निश्चित आकार के ऐसे परिसीमा-सतह आरेखों को बनाना संभव नहीं है, जिनके अंदर इलेक्ट्रॉन के पाए जाने की प्रायिकता 100% हो। s कक्षक के लिए परिसीमा सतह का आरेख गोलीय होता है, जिसके केंद्र में नाभिक है।

दो विमाओं में यह गोला एक वृत्त की तरह दिखाई देता है। इस गोले की परिसीमा के अंदर इलेक्ट्रॉन के पाए जाने की प्रायिकता 90% होती है।

इस प्रकार 1s तथा 2s कक्षक गोलीय आकृति के हैं। वास्तव में सभी s कक्षक गोलीय सममिति के होते हैं। ऐसा भी देखा गया है कि n बढ़ने के साथ कक्षक का आकार भी बढ़ जाता है, अर्थात् 4s > 3s > 2s> 1s और मुख्य क्वांटम संख्या के बढ़ने के साथ इलेक्ट्रॉन नाभिक से दूर हो जाता है।

चित्र 3 में तीन 2p कक्षकों (l = 1) के परिसीमा सतह आरेख दिखाए गए हैं। इन आरेखों में नाभिक मूल बिंदु पर होता है यहाँ कक्षकों के विपरीत, परिसीमा सतह आरेख गोलाकार नहीं होते हैं। इसकी अपेक्षा प्रत्येक p के दो भाग होते हैं, जिन्हें 'पालियाँ' (lobes) कहा जाता है। ये नाभिक से गुजरने वाले तल के दोनों ओर स्थित हैं। जहाँ दोनों पालियाँ एक दूसरे को स्पर्श करती हैं, उस तल पर प्रायिकता घनत्व फलन शून्य होता है। तीनों p कक्षकों की आकृति और ऊर्जा एक समान होती है। ये कक्षक केवल पालियों के अभिविन्यासों में आपस में भिन्न होते हैं, क्योंकि ये पालियाँ x, y या z अक्षों की ओर निर्दिष्ट मानी जा सकती हैं, इसलिए उन्हें 2px, 2py तथा 2pz द्वारा दर्शाया जाता है। यहाँ यह उल्लेखनीय है कि ml के

मानों (–1, 0 और +1) और तथा x, y और z अक्षों के बीच कोई संबंध नहीं है। हमारे लिए यह याद रखना पर्याप्त है कि चूँकि ml के तीन संभव मान होते हैं, अत: तीन p कक्षक होंगे, जिनके अक्ष आपस में एक दूसरे के लंबवत होते हैं। s कक्षकों की तरह, p कक्षकों के लिए भी मुख्य क्वांटम संख्या के बढ़ने के साथ कक्षकों का आकार और ऊर्जा बढ़ते हैं। अत: विभिन्न p कक्षकों का आकार और ऊर्जा 4p > 3p > 2p क्रम में होते हैं। इसके अतिरिक्त s कक्षकों के समान, p कक्षकों के प्रायिकता घनत्व फलन भी शून्य से गुजरते हैं। नोडों (nodes) की संख्या n –2 द्वारा दी जाती है, अर्थात् 3p कक्षक के लिए त्रिज्य नोड (radial node) एक, 4p के लिए दो और इससे आगे भी इसी क्रम में होते हैं।



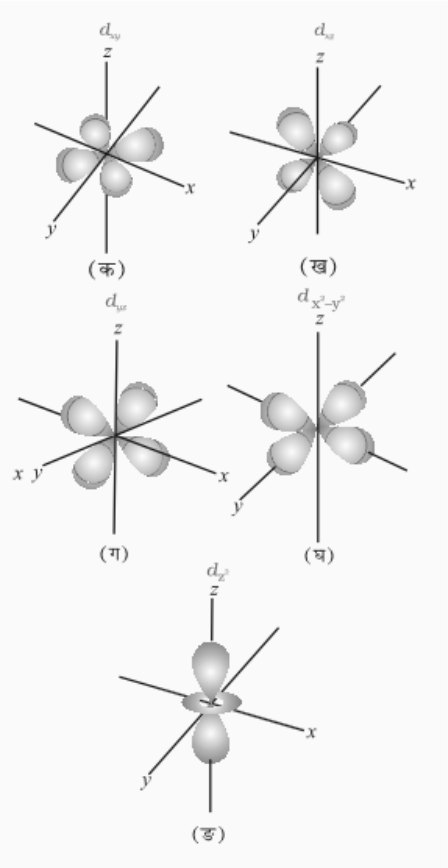
चित्र 3: तीन 2p कक्षकों के सीमा सतह आरेख।

n = 2 के लिए कक्षक, d कक्षक कहलाता है और मुख्य क्वांटम संख्या (n) का मान 3 होता है, क्योंकि n का मान n-1 से अधिक नहीं हो सकता है। इसमें ml के पाँच मान होते हैं (-2, -1, 0, +1 और +2) और इस प्रकार पाँच d कक्षक होते हैं। d कक्षकों के परिसीमा-सतह आरेख चित्र 4 में दिखाए गए हैं।

पाँच d कक्षकों को dxy, dyz, dxz, $dx^2–y^2$ तथा dz^2 कहा जाता है। पहले चार d कक्षकों की आकृति एक जैसी होती है और पाँचवें dz2 की भिन्न होती है, लेकिन पाँचों कक्षकों की ऊर्जा बराबर होती है। n > 3 वाले d कक्षकों (4d, 5d…..) की समान आकृतियाँ होती हैं लेकिन ऊर्जा तथा आकार भिन्न होते हैं।

त्रिज्य नोडों (अर्थात् जब प्रायिकता-घनत्व फलन शून्य हो) के अलावा np और nd कक्षकों के लिए प्रायिकता-घनत्व फलन तल पर शून्य होते हैं। यह नाभिक से गुजरते हुए तल पर निर्भर करता है। उदाहरण के लिए, pz कक्षक में xy तल नोडल तल है। dxy कक्षक में नाभिक से गुजरते हुए और z अक्ष पर xy तल को भेदते हुए दो नोडल तल होते हैं। इन्हें 'कोणीय नोड' (angular node) कहा जाता है और कोणीय नोडों की संख्या l से दी जाती है, अर्थात् p कक्षकों के लिए एक, d कक्षकों के लिए दो तथा अन्य के

लिए इसी प्रकार कोणीय नोड होते हैं। नोडों की कुल संख्या (n-1), अर्थात् कोणीय नोड l और त्रिज्य नोड (n-l-1) का योग होगी।



चित्र 4: पांच 3d कक्षकों की सीमा सतह आरेख

सारांश

- श्रोडिंगर समीकरण इलेक्ट्रॉन वितरण और परमाणु में अनुमत ऊर्जा स्तर का वर्णन करता है।
- इलेक्ट्रॉनों के क्वांटित उर्जा-स्तर और संगत तरंग फलन की विशेषता तीन क्वांटम संख्याओं के एक सेट द्वारा की जाती है।
- मुख्य क्वांटम संख्या (n) आकार और काफी हद तक एक कक्षा की ऊर्जा को निर्धारित करती है।
- दिगंशी क्वांटम संख्या (l) को कक्षीय कोणीय संवेग के रूप में भी जाना जाता है और कक्षक के त्रिविम आकार को परिभाषित करता है।
- चुंबकीय क्वांटम संख्या (ml) कक्षक के स्थानिक (spatial) अभिविन्यास के बारे में जानकारी देता

है।

- इलेक्ट्रॉन प्रचक्रण (स्पिन) क्वांटम संख्या (s) किसी इलेक्ट्रॉन के स्पिन को प्रतिनिधित्व करता है और इसमें +1/2 या -1/2 का मान हो सकता है।
- वह क्षेत्र जहाँ प्रायिकता घनत्व फलन शून्य है, नोडल सतह या नोड कहलाता है।