1. मॉड्यूल और इसकी संरचना का विवरण

मॉड्यूल विस्तार	
विषय शीर्षक	रसायन विज्ञान
पाठ्यक्रम शीर्षक	रसायन विज्ञान 01 (कक्षा XI, सेमेस्टर -1)
मॉड्यूल नाम / शीर्षक	रासायनिक आबंधन तथा आण्विक संरचना : भाग 4
मॉड्यूल आईडी	kech_10404
शर्तें	परमाणु संरचना, आबंधो की ध्रुवीयता, इलेक्ट्रॉनिक विन्यास के बारे में ज्ञान
उद्देश्य	इस पाठ का अध्यन करने के पश्च्यात शिक्षार्थी निम्न लिखित को समझने में सक्षम होंगे: • आण्विक कक्षक सिद्धांत • परमाणु-कक्षकों का रैखिक संयोग (LCAO) • आबंध कोटि और इसकी गणना • अणु की स्थिरता एवं चुंबकीय गुण • विभिन्न अणुओं और आयनों की तुलनातमक स्थिरता • समनाभिकीय द्विपरमाणुक अणुओं का आण्विक कक्षक सिद्धांत • हाइड्रोजन आबंधन
संकेतक	आण्विक कक्षक सिद्धांत, एल. सी. ऐ. ओ. (LCAO), आबंध कोटि, अनुचुम्बकत्वता और अनुचुम्बकत्वता, हाइड्रोजन आबंधन

2. विकास दल

पद	नाम	सम्बद्ध
राष्ट्रीय MOOC समन्वयक (NMC)	प्रो० अमरेन्द्र पी. बेहरा	CIET, NCERT, नई दिल्ली
कार्यक्रम संचालक	डॉ० मो० मामुर अली	CIET, NCERT, नई दिल्ली
पाठ्यक्रम समन्वयक (CC) / PI	प्रो० आर० के० पाराशर	DESM, NCERT, नई दिल्ली
पाठ्यक्रम सह-समन्वयक / Co-PI	डॉ एरुम खान	CIET, NCERT, नई दिल्ली
विषय वस्तु विशेषज्ञ (SME)	प्रीति किरण	केंद्रीय विद्यालय नंबर 1, एएफएस, हिंडन, जीजेडबी
समीक्षा दल	डॉ. सुलेखा चंद्रा डॉ एरुम खान	जाकिर हुसैन कॉलेज, नई दिल्ली सी. आई. ई. टी.
अनुवादक	डॉ. राम बाबू पचवार्या	सहायक आचार्य ,मोतीलाल नेहरू महाविद्यालय, दिल्ली विश्वविद्यालय साउथ प्रांगण, बीजेएम, धौलाकुआँ

विषय सूची :

1. **आण्विक कक्षक सिद्धांत**
2. **समनाभिकीय द्विपरमाणुक अणुओं में आबंधन**
3. **हाइड्रोजन आबंधन, हाइड्रोजन आबंध बनने का कारण, हाइड्रोजन आबंधों के प्रकार**
4. **हाइड्रोजन आबंधो के लिए शर्ते**
5. **सारांश**

1. **आण्विक कक्षक सिद्धांत**

आण्विक कक्षक सिद्धांत एफ़ हुंड एवं ऐस. मुलिकेन सन् 1932 में विकसित किया गया। इस सिद्धांत के मुख्य लक्षण निम्नलिखित हैं:

(i) जिस प्रकार परमाणु में इलेक्ट्रॉन विभिन्न परमाणु कक्षकों में उपस्थित रहते हैं, उसी प्रकार अणु में इलेक्ट्रॉन विभिन्न आण्विक कक्षकों में उपस्थित रहते हैं।

(ii) आण्विक कक्षक तुल्य ऊर्जाओं एवं उपयुक्त सममिति परमाणु कक्षकों के संयोग से बनते हैं।

(iii) परमाणु कक्षक में कोई इलेक्ट्रॉन केवल एक ही नाभिक के प्रभाव में रहता है, जबकि आण्विक कक्षक

(iv) में उपस्थित इलेक्ट्रॉन दो या दो से अधिक नाभिकों द्वारा प्रभावित होता है। यह संख्या अणु में परमाणुओं की संख्या पर निर्भर करती है। इस प्रकार परमाणु कक्षक एकल केद्रीय होता है, जबकि आण्विक कक्षक बहुकेद्रीय होता है।

(v) बने हुए आण्विक कक्षकों की संख्या संयोग करने वाले परमाणु कक्षकों की संख्या के बराबर होती है। जब दो परमाणु कक्षकों को मिलाया जाता है, तो दो आण्विक कक्षक प्राप्त होते हैं। इनमें से एक '**आबंधन** आण्विक कक्षक' और दूसरा '**प्रतिआबंधन**' आण्विक कक्षक कहा जाता है।

(vi) आबंधन आण्विक कक्षक की ऊर्जा कम होती है। अत: उसका स्थायित्व संगत प्रतिआबंधन आण्विक कक्षक से अधिक होता है।

(vii) जिस प्रकार किसी परमाणु के नाभिक के चारों ओर इलेक्ट्रॉन प्रायिकता वितरण परमाणु कक्षक द्वारा दिया जाता है, उसी प्रकार किसी अणु में नाभिकों के समूह के चारों ओर इलेक्ट्रॉन प्रायिकता वितरण आण्विक कक्षक द्वारा दिया जाता है।

(viii) परमाणु कक्षकों की भाँति आण्विक कक्षकों को भी पाउली सिद्धांत तथा हुंड के नियम का पालन करते हुए ऑफबाऊ नियम के अनुसार भरा जाता है।

आण्विक कक्षकों का निर्माण: परमाणु-कक्षकों का रैखिक संयोग (LCAO)

जैसा आप जानते हैं, तरंग यांत्रिकी (Wave Mechanics) के अनुसार परमाणु कक्षक को एक तरंग फलन (ψ) के रूप में दर्शाया जा सकता है। यह फलन इलेक्टॉन तरंग के आयाम (Amplitude) को दर्शाता है तथा इसे श्रोडिंजर समीकरण के हल द्वारा प्राप्त किया जाता है, परंतु एक से अधिक इलेक्टॉन वाले निकाय के लिए श्रोडिंजर समीकरण का हल नहीं किया जा सकता। इसलिए आण्विक कक्षक, जो अणुओं के लिए एक इलेक्टॉन तरंग फलन है, को श्रोडिंजर समीकरण के हल से सीधे प्राप्त करना कठिन है। इस कठिनाई का निराकरण एक सन्निकट विधि (Approximate Method) के सहारे किया जाता है। इस विधि को 'परमाणु कक्षकों का रैखिक संयोग' (Linear Combination Of Atomic Orbitals or LCAO) कहते हैं।

आइए, हम एक समनाभिकीय द्वि परमाणुक अणु, H_2 पर इस विधि का अनुप्रयोग करें। मान लें कि हाइड्रोजन अणु दो हाइड्रोजन परमाणुओं A तथा B से बना है। दोनों परमाणु एक समान ही हैं, केवल सुविधा

के लिए उन्हें A तथा A से चिन्हित किया गया है। प्रत्येक हाइड्रोजन परमाणु की मूल अवस्था में उसके 1s कक्षक में एक इलेक्टॉन होता है। इन परमाणु कक्षकों को हम तरंग फलनों ψ_A तथा ψ_B द्वारा प्रदर्शित कर सकते हैं। गणितीय रूप से आण्विक कक्षकों को परमाणु कक्षकों के रैखिक संयोग व्यक्तिगत परमाणु कक्षकों के तरंग फलनों ψ_A तथा ψ_B के योग या अंतर द्वारा किया जाता है, जैसा नीचे दर्शाया गया है।

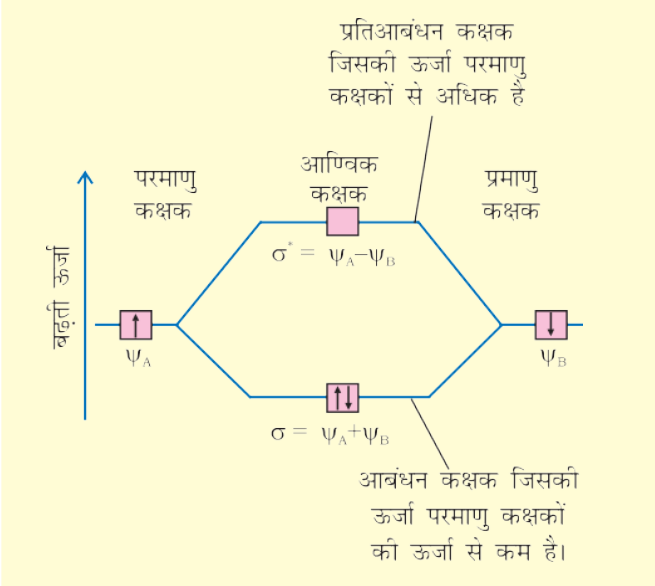
$\psi_{MO} = \psi_A + \psi_B$

इस प्रकार दो आण्विक कक्षक σ तथा σ* तथा प्राप्त होते हैं।

$\sigma = \psi_A + \psi_B$

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

परमाणु कक्षकों के योग से बनने वाले आण्विक कक्षक σ को आबंधन आण्विक कक्षक तथा परमाणु कक्षकों के अंतर से बनने वाले आण्विक कक्षक, σ* को 'प्रतिआबंधन आण्विक कक्षक' कहते हैं जैसा की चित्र 1 में दर्शाया ।



चित्र 1. दो परमाणु क्रमशः A तथा B पर केंद्रित परमाणु कक्षकों ψ_A तथा ψ_B के रैखिक संयोग से आबंधन **(σ)** तथा प्रतिआबंधन **(σ*)** आण्विक कक्षकों का निर्माण।

गुणात्मक तौर पर आण्विक कक्षकों का बनना संयोग करने वाले परमाणुओं के इलेक्टॉन तरंगों के रचनात्मक तथा विनाशी व्यतिकरण (Constructive Or Destructive Interference) के रूप में समझा जा सकता है। आबंधन आण्विक कक्षक के निर्माण में आबंधी परमाणुओं की दो इलेक्टॉन तरंगें एक दूसरे को प्रबलित करती हैं, अर्थात् इनमें रचनात्मक व्यतिकरण होता है। दूसरी ओर प्रतिआबंधन आण्विक कक्षक के निर्माण में ये इलेक्टॉन तरंगें एक-दूसरे को निरस्त करती हैं, अर्थात् इनमें विनाशी व्यतिकरण होता है। इनके परिणामस्वरूप आबंधन आण्विक कक्षक में अधिकांश इलेक्टॉन घनत्व आबंधित परमाणुओं के बीच अवस्थित होता है। नाभिकों के बीच प्रतिकर्षण बहुत कम होता है, जबकि प्रतिआबंधी आण्विक कक्षक में अधिकांश इलेक्टॉन घनत्व दोनों नाभिकों के बीच के क्षेत्रा से दूर अवस्थित होता है। वास्तव में दोनों नाभिकों के मध्य एक निस्पंद तल (Nodal Plane) होता हैं, जहाँ पर इलेक्टॉन घनत्व शून्य होता है। अतः नाभिकों के बीच उच्च प्रतिकर्षण होता है। आबंधी आण्विक कक्षकों में उपस्थित इलेक्टॉन नाभिकों को परस्पर बांधे रखने की प्रवृत्ति रखते हैं। अतः ये अणु को स्थायित्व प्रदान करते हैं। इस प्रकार एक आबंधन आण्विक कक्षक उन परमाणु कक्षकों से

सदैव कम ऊर्जा रखता है, जिनके संयोग से वह बनता है। इसके विपरीत प्रतिआबंधन आण्विक कक्षक में इलेक्टॉन अणु को अस्थायी कर देते हैं। इलेक्ट्रॉनो एवं नाभिकों के बीच आकर्षण इस कक्षक में इलेक्ट्रॉनो के बीच परस्पर प्रतिकर्षण से कम होता है और इससे ऊर्जा में सकल वृद्धि होती है।
यहाँ ध्यान देने योग्य बात यह है कि प्रतिआबंधन कक्षक की ऊर्जा संयोग करने वाले परमाणु कक्षकों की ऊर्जा से उतनी मात्रा में अधिक हो जाती है, जितनी मात्रा में आबंधन आण्विक कक्षक की ऊर्जा कम होती है। इस प्रकार दोनों आण्विक कक्षकों की कुल ऊर्जा वही रहती है, जो दो मूल परमाणु - कक्षकों की होती है।

परमाणु कक्षकों के संयोग की शर्तें

परमाणु कक्षकों के रैखिक संयोग से आण्विक कक्षकों के निर्माण के लिए निम्नलिखित शर्तें अनिवार्य हैं :
1. संयोग करने वाले परमाणु कक्षकों की ऊर्जा समान या लगभग समान होनी चाहिए। इसका तात्पर्य यह है कि एक 1S कक्षक दूसरे 1S कक्षक से संयोग कर सकता है परंतु 2S कक्षक से संयोग नहीं कर सकता, क्योंकि 2S कक्षक की ऊर्जा 1S कक्षक की ऊर्जा से कहीं अधिक होती है।
यह सत्य नहीं है यदि परमाणु भिन्न प्रकार के हैं।
2. संयोग करने वाले परमाणु कक्षकों की आण्विक अक्ष के परितः समान सममिति होनी चाहिए। परिपाटी के अनुसार z-अक्ष को आण्विक अक्ष मानते हैं। यहाँ यह तथ्य महत्त्वपूर्ण है कि समान या लगभग समान ऊर्जा वाले परमाणु कक्षक केवल तभी संयोग करेंगे, जब उनकी सममिति समान है, अन्यथा:
नहीं। उदाहरणार्थ : $2p_z$ परमाणु-कक्षक दूसरे परमाणु के $2p_z$ कक्षक से संयोग करेगा, परंतु $2p_x$ या $2p_y$ कक्षकों से नहीं, क्योंकि उनकी सममितियाँ समान नहीं हैं।
3. संयोग करने वाले परमाणु कक्षकों को अधिकतम अतिव्यापन करना चाहिए। जितना अधिक अतिव्यापन होगा, आण्विक कक्षकों के नाभिकों के बीच इलेक्टॉन घनत्व उतना ही अधिक होगा।

आण्विक कक्षकों के प्रकार

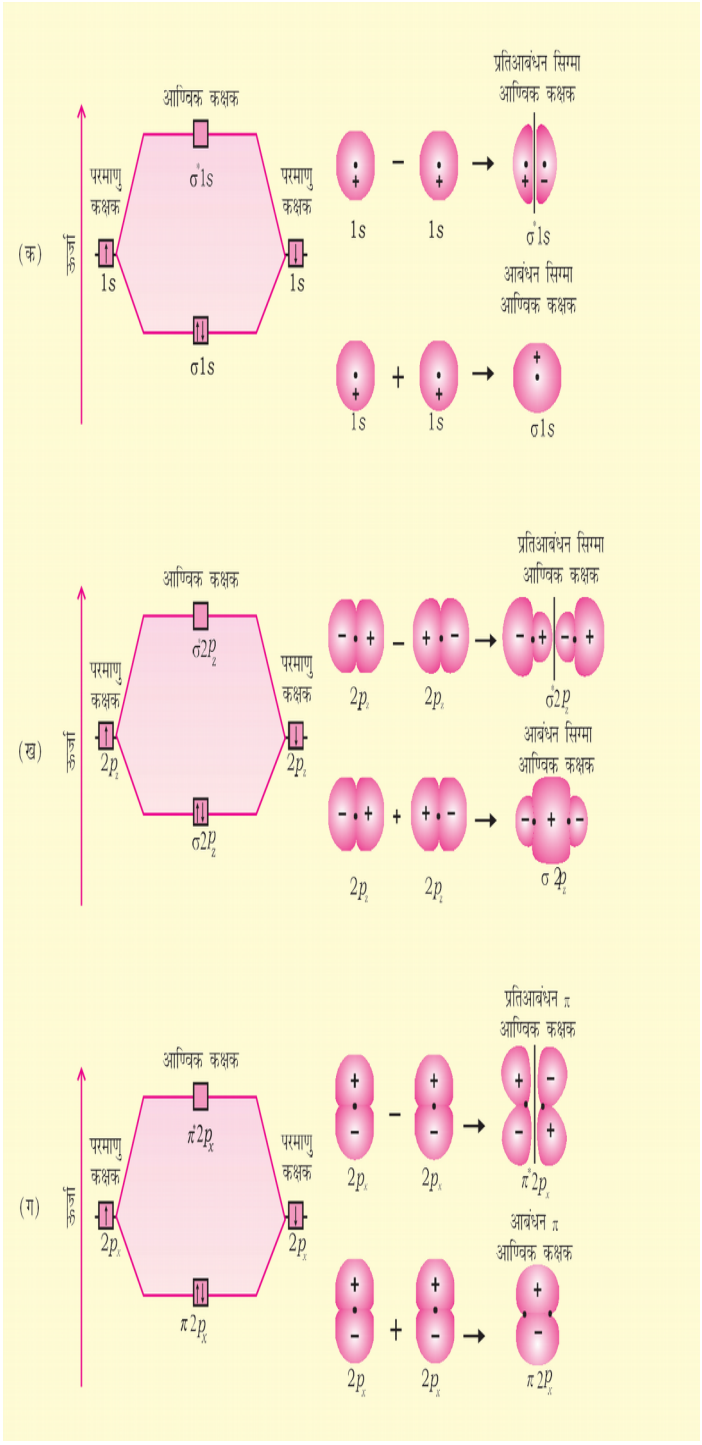
द्वि-परमाणुक अणुओं के आण्विक कक्षकों को **σ** (सिग्मा), **π** (पाई), **δ** (डेल्टा) आदि द्वारा नामित किया जाता है।

इस नामकरण में **(σ)** सिग्मा आण्विक कक्षक आबंध अक्ष के परितः सममित होते हैं, जबकि **(π)** आण्विक कक्षक सममित नहीं होते।
उदाहरण के लिए : दो नाभिकों पर केंद्रित 1s कक्षकों का रैखिक संयोग दो आण्विक कक्षकों को उत्पन्न करता है। जो आबंध अक्ष के परितः सममित होते हैं। इन्हें **σ 1s** तथा **σ* 1s** आण्विक कक्षक कहते हैं [चित्र 2 -(क)] ।
यदि अंतरनाभिकीय अक्ष को **z**-दिशा में लिया जाए, तो यह देखा जा सकता है कि दो परमाणुओं के ***2p*$_z$** कक्षकों के रैखिक संयोग से भी दो सिग्मा आण्विक कक्षक उत्पन्न होंगे। इन्हें **σ *2p*$_z$** तथा **σ* *2p*$_z$** से निरूपित करते हैं [चित्र 2 (ख)]।
2p$_x$ तथा **2p$_y$** कक्षकों के अतिव्यापन से मिलने वाले आण्विक कक्षक आबंध कक्ष के परितः सममित नहीं होते।

ऐसा आण्विक तल के ऊपर धनात्मक लोब तथा आण्विक तल के नीचे ऋणात्मक लोब होने के कारण होता है। ऐसे आण्विक कक्षकों को **π** औ **π*** द्वारा चिन्हित करते हैं [चित्र 2(ग)]।
एक **π** आबंधन आण्विक कक्षक में अंतरानाभिक अक्ष के ऊपर एवं नीचे अधिकतम इलेक्टॉन घनत्व रहता है, परंतु प्रतिबंधन आण्विक कक्षक **π*** में नाभिकों के मध्य एक नोड़ होता है।

आण्विक कक्षकों का ऊर्जा-स्तर आरेख

हमने देखा कि दो परमाणुओं पर उपस्थित 1s परमाणु कक्षक संयोग द्वारा दो आण्विक कक्षकों का निर्माण करते हैं, जिन्हें σ 1s तथा σ* 1s’नामित किया जाता है। इसी प्रकार दो परमाणुओं के आठ परमाणु कक्षक 2s तथा 2p संयोग द्वारा निम्नलिखित आठ आण्विक कक्षकों का निर्माण करते हैं :



चित्र 2. (क) 1s परमाणु कक्षकों (ख) $2p_z$ परमाणु कक्षकों तथा (ग) $2p_x$ परमाणु कक्षकों के संयोगों से बने आबंधन एवं प्रतिआबंधन आण्विक कक्षकों की रूपरेखा तथा उनकी ऊर्जाएँ
प्रतिआबंधी आण्विक कक्षक MO sσ* 2sσ* 2pz π * 2pxπ * 2py

आबंधी आण्विक कक्षक: **σ2s σ2pz π2px π2py**
इन आण्विक कक्षकों के ऊर्जा-स्तर प्रायोगिक तौर पर स्पेक्ट्रमी विधि द्वारा प्राप्त किए जाते हैं। द्वितीय आवर्त के तत्त्वों के समनाभिकीय द्विपरमाणुक अणुओं **O_2** तथा **F_2** के आण्विक
कक्षकों की ऊर्जा का बढ़ता क्रम इस प्रकार है :

$\sigma 1s<\sigma^*1s<\sigma 2s<\sigma^*2s<\sigma 2p_z<(\pi 2p_x=\pi 2p_y)<(\pi^*2p_x=\pi^*2p_y)<\sigma^*2p_z$
द्वितीय आवर्त के शेष अणुओं जैसे: **Li_2, Be_2, B_2, C_2, N_2)** के द्विपरमाणुक अणुओं के लिए आण्विक कक्षकों की ऊर्जा का क्रम ऊपर दिए गए क्रम से भिन्न होता है।

उदाहरण के लिए : **B_2, C_2, N_2** आदि द्विपरमाणुक अणुओं के आण्विक कक्षकों का प्रायोगिक तौर पर निर्धारित ऊर्जा-क्रम इस प्रकार है :
$\sigma 1s<\sigma^*1s<\sigma 2s<\sigma^*2s<(\pi 2p_x=\pi 2p_y)<\sigma 2p_z<(\pi^*2p_x=\pi^*2p_y)<\sigma^*2p_z$

आणिवक कक्षकों की ऊर्जा के क्रमों में महत्त्वपूर्ण अंतर यह है कि ***$\sigma 2p_z$*** कक्षक की ***$\pi 2p_x$*** तथा ***$\pi 2p_y$*** आण्विक कक्षकों से अधिक होती है।

इलेक्ट्रानी विन्यास तथा आण्विक व्यवहार
विभिन्न आण्विक कक्षकों में इलेक्ट्रॉनो का वितरण इलेक्ट्रॉनिक विन्यास' कहलाता है। इलेक्ट्रॉनो को कक्षकों की ऊर्जा के बढ़ते हुए क्रम में भरा जाता है। अणु के इलेक्ट्रॉनिक विन्यास से अणु के बारे में महत्त्वपूर्ण सूचना प्राप्त हो सकती है, जैसा आगे विवेचित है।
अणुओं का स्थायित्व: यदि आबंधी आण्विक कक्षकों में उपस्थित इलेक्ट्रॉनो की संख्या N_b तथा प्रतिआबंधन कक्षकों में संख्या N_a हो, तो

(i) अणु स्थायी होगा, यदि N_b बड़ा हो N_a से तथा
(ii) अणु अस्थायी होगा, यदि N_b छोटा हो N_a से

परिस्थिति (i) में आबंधन इलेक्ट्रॉनो की संख्या अधिक होने के कारण आबंधी प्रभाव प्रबलतम होता है, जिससे एक स्थायी अणु प्राप्त होता है। दूसरी ओर (ii) में प्रति-आबंधन प्रभाव प्रबल होता है, जिस के परिणामस्वरूप अणु अस्थायी होता है।

आबंध कोटि (*Bond order*)
आबंध कोटि को आबंधी आण्विक कक्षकों एवं प्रति-आबंधी आण्विक कक्षकों में उपस्थित इलेक्ट्रॉनो की संख्या के अंतर के आधे के रूप में परिभाषित किया जाता है:
आबंध कोटि (B.O.) = ½ (N_b–N_a)

आबंध कोटि किसी अणु में उपस्थित सहसंयोजी आबंधों की संख्या बताती है। यदि (यदि $N_b>N_a$) हो, तो आबंध कोटि धनात्मक होगी तथा अणु स्थायी होगा और यदि आबंध कोटि ऋणात्मक ($N_b<N_a$) या शून्य ($N_b= N_a$) हो, तो अणु अस्थायी होगा।

आबंध की प्रकृति

जैसा बताया गया है, आबंध-कोटि किसी अणु में उपस्थित सहसंयोजी आबंधों की संख्या बताती है।
उदाहरणार्थ : यदि आबंध कोटि 1, 2 या 3 हो, तो उसमें क्रमशः एकल, द्वि अथवा त्रि आबंध होंगे।

आबंध-लंबाई सामान्यतः

किसी अणु में दो परमाणुओं के बीच आबंध कोटि आबंध लंबाई का एक सन्निकट माप होता हैं। आबंध लंबाई, आबंध-कोटि के व्युत्क्रमानुपी होती है। जैसे-जैसे आबंध कोटि बढ़ती है, वैसे-वैसे आबंध लंबाई घटती जाती है।

चुंबकीय स्वभाव

यदि किसी अणु के सभी आण्विक कक्षक द्वि-पूरित युग्मित हों, तो पदार्थ प्रतिचुंबकीय (Diamagnetic) होता है। ऐसे अणु चुंबकीय क्षेत्रा में प्रीतिकर्षित होते हैं, परंतु यदि किसी अणु के एक या अधिक आण्विक कक्षकों में अयुग्मित इलेक्टॉन हों, तो वह अणु अनुचुंबकीय (Paramagnetic) होता है। ऐसे अणु चुंबकीय क्षेत्रा में आकर्षित होते हैं।

समनाभिकीय द्विपरमाणुक अणुओं में आबंधन

इस खंड में हम कुछ समनाभिकीय अणुओं में आबंधन की चर्चा करेंगे ।

1. हाइड्रोजन अणु (H_2): यह हाइड्रोजन के दो परमाणुओं के संयोजन से बनता है। प्रत्येक हाइड्रोजन के 1s कक्षक में एक इलेक्ट्रॉन होता है। अतः हाइड्रोजन के अणु में कुल दो इलेक्ट्रॉन होंगे, जो σ1s आण्विक कक्षक में उपस्थित होंगे। हाइड्रोजन अणु का इलेक्ट्रॉनिक विन्यास होगा।

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

हाइड्रोजन अणु की आबंध कोटि को इस प्रकार परिकलित किया जा सकता है।

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

इसका अर्थ यह है कि हाइड्रोजन अणु में हाइड्रोजन के दो परमाणु एक-दूसरे से **एकल सहसंयोजी आबंध** द्वारा आबंधित होते हैं। हाइड्रोजन अणु की वियोजन ऊर्जा 438 kJ mol^{-1} पाई गई है तथा आबंध लंबाई का प्रायोगिक मान 74 pm है। चूँकि हाइड्रोजन अणु में कोई **अयुग्मित इलेक्ट्रॉन नहीं** है, इसलिए यह **प्रतिचुंबकीय** है।

2. हीलियम अणु (He_2): हीलियम परमाणु का इलेक्ट्रॉनिक विन्यास $1s^2$ है। प्रत्येक हीलियम परमाणु में दो इलेक्ट्रॉन होते हैं, अर्थात् He_2 अणु में कुल चार इलेक्ट्रॉन होंगे। ये इलेक्ट्रॉन σ1s तथा σ*1s आण्विक कक्षकों में भरे जाएँगे तथा He_2 का इलेक्ट्रॉनिक विन्यास होगा।

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

तथा

He_2 की आबंध कोटि $\frac{1}{2}(2-2) = 0$

चूँकि He_2 के लिए आबंध कोटि शून्य है, अतः यह अणु अस्थायी होगा तथा इसका अस्तित्व नहीं होगा!

इसी प्रकार यह दर्शाया जा सकता है कि **Be_2** अणु **$(\sigma 1s)^2 (\sigma^* 1s)^2 (\sigma 2s)^2 (\sigma^* 2s)^2$** भी नहीं बनेगा।

3.लीथियम अणु (Li_2): लीथियम का इलेक्ट्रॉनिक विन्यास $1s^2, 2s^1$ है। लीथियम के प्रत्येक परमाणु में तीन इलेक्ट्रॉन होंगे। इसलिए Li_2 अणु का इलेक्ट्रॉनिक विन्यास होगा :

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

इस विन्यास को **KK($\sigma 2s)^2$** द्वारा भी प्रदर्शितकिया जाता है, जहाँ **KK** पूर्ण **K** कोश रचना **($\sigma 1s)^2(\sigma^*1s)^2$.** दर्शाता है।

Li_2 अणु के इलेक्ट्रॉनिक विन्यास से स्पष्ट है कि इसमें चार इलेक्ट्रॉन आबंधी आण्विक कक्षकों में तथा दो इलेक्ट्रॉन प्रतिआबंधी आण्विक कक्षक में उपस्थित हैं। अत: इसकी आबंध ½ **(4 – 2) = 1** होगी। इसका अभिप्राय यह है कि Li_2 अणु स्थायी है। चूँकि इसमें कोई अयुग्मित इलेक्ट्रॉन नही है, इसलिए यह प्रतिचुंबकीय होगा। वास्तव में यह पाया गया है कि वाष्प प्रावस्था में Li_2 अणुओं का अस्तित्व होता है, जो प्रतिचुंबकीय होते हैं।

4. कार्बन अणु (C_2): कार्बन का इलेक्ट्रॉनिक विन्यास $1s^2 2s^2 2p^2$ है। C_2 के अणु में कुल 12 इलेक्ट्रॉन होंगे। तथा इसका इलेक्ट्रॉनिक विन्यास होगा।

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

या

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

तथा

C_2 को प्रतिचुंबकीय होना चाहिए! वस्तुत: वाष्प अवस्था में C_2 प्रतिचुंबकीय है C_2 के अणुओं में दोनों आबंध पाई-आबंध होते है, क्योंकि दो पाई आबंधन आण्विक कक्षकों में
चार इलेक्ट्रॉन उपस्थित होते हैं। अधिकांश अन्य अणुओं में द्वि-आबंध, एक सिग्मा तथा एक पाई आबंध से बना होता है। समान रूप से N_2 अणु में आबंधन को समझाया जा सकता है।

5. ऑक्सीजन अण (O_2): ऑक्सीजन परमाण **O_2** का इलेक्ट्रॉनिक विन्यास $1s^2 2s^2 2p^4$ है। चूँकि प्रत्येक ऑक्सीजन परमाणु में 8 इलेक्ट्रॉन होते हैं, ऑक्सीजन अणु में कुल 16 इलेक्ट्रॉन होंगे।

O_2 अणु का इलेक्ट्रॉनिक विन्यास होगा :

1. $$\left(\pi 2p_x^2 \equiv \pi 2p_y^2\right)\left(\pi^* 2p_x^1 \equiv \pi^* 2p_y^1\right)$$

या

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

2. के इलेक्ट्रॉनिक विन्यास से यह स्पष्ट है कि इसमें 10 इलेक्ट्रॉन आबंधन आण्विक कक्षकों में तथा 6 इलेक्ट्रॉन प्रतिआबंधन आण्विक कक्षकों में उपस्थित होते हैं। अत: इसकी आबंध-कोटि होगी :

आबंध-कोटि $= \frac{1}{2}[N_b - N_a] = \frac{1}{2}[10-6] = 2$

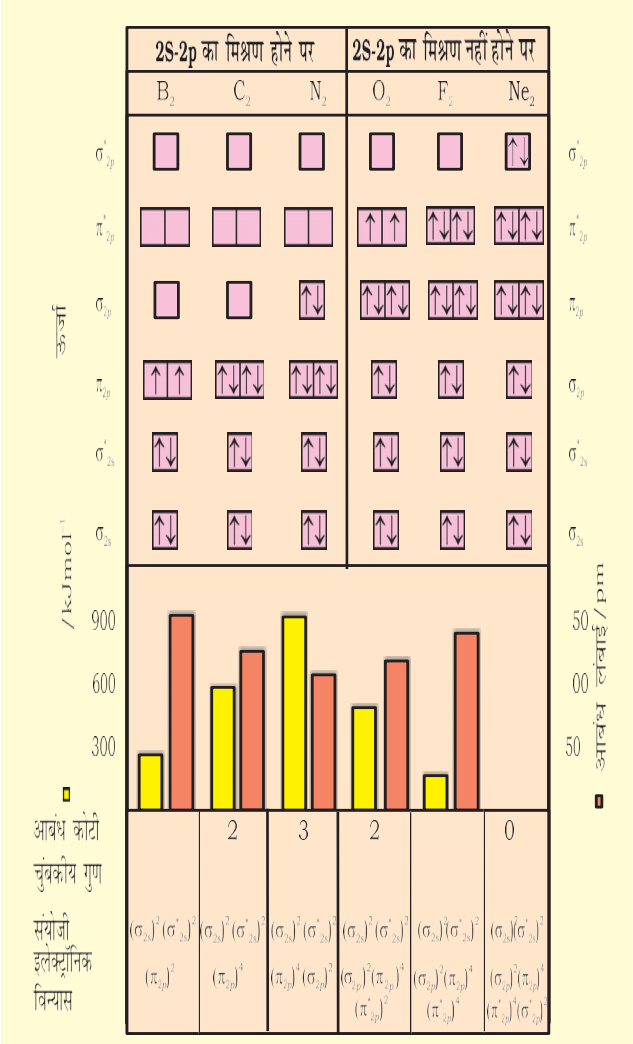
इसलिए O_2 के अणु में ऑक्सीजन परमाणु एक द्वि-आबंध द्वारा जुड़े होते हैं। इसके ऑक्सीजन π^*2p_x तथा π^*2p_y आण्विक कक्षकों में एक-एक अयुग्मित इलेक्ट्रॉन उपस्थित होते हैं। इसके अनुसार, **ऑक्सीजन अणु को अनुचुंबकीय होना चाहिए। ऐसा प्रायोगिक तौर पर पाया भी गया है**। इस प्रकार आण्विक कक्षक सिद्धांत ऑक्सीजन के अनुचुंबकीय व्यवहार की व्याख्या करने में समर्थ है।

इसी प्रकार आवर्त सारणी के द्वितीय आवर्त के अन्य समनाभिकीय द्विपरमाणुक अणुओं के इलेक्ट्रॉनिक

विन्यास लिखे जाकते हैं। B_2 से Ne_2 तक के अणुओं के लिए आण्विक कक्षक विन्यास तथा आण्विक गुण चित्र 3. में दिए गए हैं।

आण्विक कक्षकों का क्रम तथा उनमें इलेक्ट्रॉनों की संख्या दर्शाई गई है। आबंध-ऊर्जा, आबंध-कोटि, चुंबकीय गुण तथा संयोजी इलेक्ट्रॉन विन्यास कक्षक आरेखों के नीचे प्रदर्शित हैं।

चित्र 3. B_2 से Ne तक के लिए आण्विक कक्षक तथा आण्विक गुण



3. हाइड्रोजन आबंधन

नाइट्रोजन, ऑक्सीजन तथा फ्लुओरीन : ये तीन अत्यधिक विद्युत् ऋणात्मक तत्त्व जब परमाणु सहसंयोजक आबंध द्वारा हाइड्रोजन परमाणु से जुड़े होते हैं, तब सहसंयोजी आबंध के इलेक्ट्रॉन अधिक विद्युत् ऋणात्मक तत्त्व की ओर स्थानांतरित हो जाते हैं। फलस्वरूप प्राप्त आंशिक धनावेशित हाइड्रोजन परमाणु किसी दूसरे विद्युत् ऋणात्मक परमाणु के साथ एक नया आबंध बनाता है। इस आबंध को '**हाइड्रोजन आबंध' (**Hydrogen Bond) कहते हैं। यह आबंध सहसंयोजी आबंध से दुर्बल होता है। उदाहरणार्थ : HF में एक अणु के हाइड्रोजन परमाणु तथा दूसरे अणु के फ्लुओरीन परमाणु के बीच हाइड्रोजन आबंध बनता है। इसे इस प्रकार दर्शाया जा सकता है:

(H^+– F^-– H^+– F) यहाँ पर हाइड्रोजन आबंध दो परमाणुओं के बीच एक सेतु का कार्य करता है, जो एक

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

परमाणु को सहसंयोजक आबंध तथा दूसरे को हाइड्रोजन आबंध द्वारा जोड़कर रखता है। हाइड्रोजन आबंध को डॉट रेखा (.....) द्वारा दर्शाते हैं, जबकि सहसंयोजन आबंध को ठोस रेखा द्वारा दर्शाते हैं। इस प्रकार हाइड्रोजन आबंध को उस आकर्षण बल के रूप में परिभाषित किया जा सकता है, जो एक अणु के हाइड्रोजन परमाणु को दूसरे अणु के विद्युत् ऋणात्मक परमाणु (F, O या N) से बांधता है।

हाइड्रोजन आबंध बनने का कारण

जब हाइड्रोजन परमाणु किसी प्रबल विद्युत् ऋणात्मक तत्त्व 'X' से आबंधित होता है, तो सहभाजित इलेक्ट्रॉन युग्म हाइड्रोजन परमाणु से दूर हो जाता है। परिणामस्वरूप हाइड्रोजन परमाणु दूसरे परमाणुओं 'X' के सापेक्ष अत्यधिक विद्युत् धनात्मक हो जाता है। चूँकि इलेक्ट्रॉन 'X' परमाणु की ओर स्थानांतरित हो जाते हैं, इसलिए हाइड्रोजन परमाणु आंशिक धनात्मक आवेश (δ^+) गह्रण करता है जबकि परमाणु पर 'X' आंशिक ऋणात्मक आवेश (δ^-) आ जाता है। इससे एक द्विध्रुवी अणु प्राप्त होता है, जिसके बीच स्थिर वैद्युत बल होता है। इसे इस प्रकार दर्शाया जा सकता है :

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

हाइड्रोजन आबंध का परिमाण यौगिक की भौतिक अवस्था पर निर्भर करता है। ठोस अवस्था में यह अधिकतम होता है तथा गैसीय अवस्था में न्यूनतम। इस तरह से हाइड्रोजन आबंध यौगिकों की संरचना तथा गुणधर्मों को प्रबलता से प्रभावित करते हैं।

हाइड्रोजन आबंधों के प्रकार

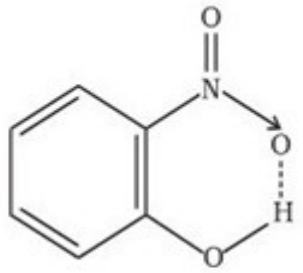
हाइड्रोजन आबंध दो प्रकार के होते हैं :

(i) अंतर-अणुक हाइड्रोजन आबंध

(ii) अंतरा-अणुक हाइड्रोजन आबंध

(1) अंतर-अणुक हाइड्रोजन आबंध : ये आबंध समान अथवा विभिन्न यौगिकों के दो अलग-अलग अणुओं के बीच बनते हैं। उदाहरणार्थ : HF अणु, एल्कोहल या जल के अणुओं के बीच हाइड्रोजन आबंध।

(2) अंतरा-अणुक हाइड्रोजन आबंध : ये आबंध एक ही अणु में उपस्थित हाइड्रोजन परमाणु तथा अधिक विद्युत् ऋणात्मक परमाणु (F, O, N) के बीच बनता है। उदाहरणार्थ : o-नाइट्रो फिनॉल में हाइड्रोजन, जो दो ऑक्सीजन के मध्य रहता है।



o-नाइट्रोफीनॉल अणु में अंतर-अणुक हाइड्रोजन आबंध

o-नाइट्रो फिनॉल अणु में अंतर-अणुक हाइड्रोजन आबंध

4. हाइड्रोजन आबंधन बनने की शर्ते
हाइड्रोजन आबंधन बनने के लिए कुछ आव्यशक
निम्न लिखित शर्ते

i) **हाइड्रोजन से आबन्धित परमाणु की उच्च ऋणात्मकत।**
अणु में हाइड्रोजन परमाणु से आबन्धित अणु की ऋणातमकता उच्च होनी चाहिए जैसे F, O या N उदाहरण के लिए HF, H_2O तथा NH_3

ii) ऋणात्मक अणु का छोटा आकार :
ऋणात्मक परमाणु का आकार बहुत छोटा होना चाहिए। ऋणात्मक परमाणु का आकार जितना छोटा होगा वह उतने ही ज्यादा प्रभाव से आबन्धित इलेक्ट्रान युग्म को आकर्षित करेगा। इसके परिणाम स्वरुप अणु में H तथा ऋणात्मक परमाणु के मध्य बहुत ज्यादा धुर्वीयता विकसित हो जाएगी फलत: एक मजबूत हाइड्रोजन आबंध का निर्माण होगा।
उदाहरणत:NH_3 में हाइड्रोजन आबंध बनता है जबकि HCl में नहीं, हालांकि N तथा Cl दोनों पर की ही विध्युत ऋणात्मकता (3.0) सामान है। क्लोरीन का आकर नाइट्रोजन की तुलना में बहुत बड़ा होता है इस कारण वह हाइड्रोजन आबंध नहीं बनता ।

हाइड्रोजन आबंध एवं सहसंयोजक आबंध के मध्य अंतर।
हाइड्रोजन आबंध एवं सहसंयोजक आबंध के मध्य निम्न लिखित मुख्य अंतर है :

हाइड्रोजन आबंध	**सहसंयोजक आबंध**
हाइड्रोजन आबंध द्विधुर्व-द्विधुर्व आकर्षण बल पर आधारित होता है।	**सहसंयोजक आबंध इलेक्ट्रॉन सांझा होने आधारित होता है।**
इसका निर्माण हाइड्रोजन परमाणु एवं उच्च विद्युत ऋणात्मकता (N,O,F) वाले परमाणुओं के मध्य होता है।	**सहसंयोजक आबंध का निर्माण दो विद्युत ऋणात्मक परमाणुओं के मध्य होता है जो सामान या विभिन्न तत्वों के हो सकते है।**
हाइड्रोजन आबंध बहुत कमजोर होते है जैसे H-F आबंध की शक्ति	**सहसंयोजक आबंध पर्याप्तरूप से मजबूत होते है। उदाहरण के लिए H-H आबंध**

41.83kJ/ mol है । **शक्ति 41.83 kJ/ mol है ।**

हाइड्रोजन आबंधो वाले यौगिकों के उदाहरण
कुछ योगिक जो हाइड्रोजन आबंध बनाते है का विवरण निचे दिया गया है:

1. **हाइड्रोजन फ्लोराइड** : ठोस अवस्था में हाइड्रोजन फ्लोराइड के बहुतसारे अणु हाइड्रोजन आबंधो द्वारा एक टेढ़ी मेढ़ी लम्बी श्रृंखला बनते है। इसी कारण हम हाइड्रोजन फ्लोराइड अणु को $(HF)_n$ के रूप में दर्शाते है। जबकि द्रव्य या गैसीय अवस्था में सीधी शृंखला बन जाती है।

2. जल । जल के अणुओं में भी हाइड्रोजन आबंध उपस्थित होते है। जल में दो सहसंयोजक (O-H) आबंधो अलावा के अतिरिक्त, ऑक्सीजन परमाणु दो हाइड्रोजन आबंध बनाता है। हाइड्रोजन आबंधो के परिणामस्वरूप, प्रत्येक ऑक्सीजन चतुष्कोणीय रूप से चार हाइड्रोजन परमाणुओं से घिरा होता है, दो सहसंयोजक आबंधो द्वारा और दो हाइड्रोजन आबंधो द्वारा। संबंधित जल के अणुओं को (H2O) के रूप में व्यक्त किया जा सकता है।

3. अमोनिया। अमोनिया के अणु में तीन हाइड्रोजन परमाणु एक विधुत ऋणात्मक नाइट्रोजन परमाणु से आबन्धित होते है। नाइट्रोजन और हाइड्रोजन के बीच विधुत ऋणात्मकता में अंतर के कारण प्रत्येक हाइड्रोजन परमाणु पर धनात्मक आवेश विकसित हो जाता है । इस प्रकार अणु में एक ऋणात्मक धुर्व और तीन धनात्मक धुर्व होते हैं ताकि अमोनिया के अणु हाइड्रोजन आबंधन के माध्यम से लंबी श्रृंखला बनाते सके।

गुणों पर हाइड्रोजन आबंध का प्रभाव।
हाइड्रोजन आबंधान का कई भौतिक गुणों जैसे कि सिद्धांत कक बिंदु, क्वथनांक बिंदु (Boiling Point) और यौगिकों की घुलनशीलता पर महत्वपूर्ण प्रभाव पड़ता है। हाइड्रोजन आबंधन वाले यौगिकों की मुख्य विशेषताएं नीचे दी गई हैं।

1. संगति (**Association)**

अंत: आणविक हाइड्रोजन आबंधो के कारण एक यौगिक के दो या अधिक अणु संगति अणुओं के रूप में मौजूद होते हैं। उदाहरण के लिए कार्बोक्जिलिक अम्ल वाष्प की स्थिति में भी द्वि-अणुक के रूप में रहता है।

2. उच्च सिद्धांत कक (Melting)और क्वथनांक (Boiling)।

हाइड्रोजन आबंधन वाले यौगिकों का उच्च सिद्धांत कक और क्वथनांक होता हैं। यह इस कारण है कि, हाइड्रोजन आबंधन के कारण अणुओं में आकर्षण का विद्युत्स्थैतिक (Electrostatic) बल बढ़ जाता है। नतीजतन इन अणुओं को पिघलाने या उबालने से पहले उन्हें अलग करने के लिए बहुत ऊर्जा की आवश्यकता होती है। सिद्धांत कक और क्वथनांक पर हाइड्रोजन आबंधन के प्रभाव को समूहों 14,15,16,17 के तत्वों के हाइड्राइड के सिद्धांत कक और क्वथनांक की तुलना से समझा जा सकता है।

हाइड्राइड (HYDRIDE)	सिद्धांत कक M.P. (K)	क्वथनांक B.P.(K)
CH_4	89.0	111.5
NH_3	195.5	239.6
H_2O	273.0	373.0
HF	180.7	292.4

इन समूह के तत्वों के हाइड्राइड के सिद्धांत क और क्वथनांक बिंदु तथा उनके आणविक द्रव्यमान के बिच में वक्र आलेखित किये गये हैं। समूह 14 में जैसे-जैसे आणविक द्रव्यमान बढ़ता जाता है वैसे-वैसे सिद्धांत क और क्वथनांक बिंदु बढ़ते जाते हैं। यह मुख्य रूप से इस कारण है कि जैसे-जैसे 14 वे समूह के तत्वों का आकार बढ़ता है, इलेक्ट्रॉनों की संख्या भी बढ़ जाती है। नतीजतनए वान डर वाल्स बलों में भी वृद्धि होती है और परिणामस्वरूप सिद्धांत क और क्वथनांक बिंदु बढ़ जाते हैं। हालांकि समूह 15, 16 और 17 के हाइड्रोजन इस प्रवृत्ति को नहीं दिखाते हैं। बढ़ता है। NH_3 (समूह 15), H_2O (समूह 16) और HF (समूह 17) में असामान्य रूप से उच्च सिद्धांत कक और क्वथनांक होते हैं।

प्रत्येक समूह के पहले सदस्य का अपेक्षाकृत उच्च सिद्धांत कक और क्वथनांक इन यौगिकों द्वारा दिखाए गए अंतरआणविक हाइड्रोजन आबंधन के कारण होता है। उदाहरण के लिए, H-F का क्वथनांक उच्च हाइड्रोजन आबंधन के कारण H-Cl की तुलना में बहुत अधिक है।

इसी आधार पर हम NH_3 तथा H_2O का अपने समूह में उच्च क्वथनांक बिंदु को समझ सकते हैं। इसी आधार पर हम NH_3 और H_2O का अपने समूह में उच्च क्वथनांक को समझ सकते हैं।

यह ध्यान देने योग्य है कि HF में हाइड्रोजन आबंध H_2O से अधिक मजबूत है। हालांकि, HF की तुलना में जल (H_2O) अधिक तापमान पर उबलता है। यह इस कारण से है कि प्रत्येक H_2O अणु हाइड्रोजन आबंधन के माध्यम से चार अन्य H_2O के अणुओं से बंधे होते हैं जबकि प्रत्येक HF अणु हाइड्रोजन आबंधन के माध्यम से दो अन्य HF अणु से बंधे होते हैं।

3. भौतिक अवस्था पर प्रभाव।

हाइड्रोजन आबंधन पदार्थों की भौतिक अवस्था (ठोस, द्रव्य या गैस) को भी प्रभावित करता है। उदाहरण के लिएए O और S दोनों एक ही समूह के हैं लेकिन H_2O साधारण तापमान पर एक तरल है जबकि H_2S एक गैस है। इसे वैद्युतीयऋणात्मकता के मान के आधार पर समझा जा सकता है।
H_2O अणुओ में
O की वैद्युतीयऋणात्मकता = 3.5
H की वैद्युतीयऋणात्मकता = 2.1.
H_2S अणु

वैद्युतीयऋणात्मकता S= 2.5
वैद्युतीयऋणात्मकता H = 2.1
जल में ऑक्सीजन की वैद्युतीयऋणात्मकता अत्यधिक है इसलिए यहां हाइड्रोजन आबंध बनता है। परिणामस्वरूप, H_2O के अणु एक दूसरे से जुड़ जाते हैं और इससे पानी का क्वथनांक बढ़ जाता है। नतीजतन, पानी कमरे के तापमान पर तरल रूप में मौजूद होता है। दूसरी ओर, H_2S में परमाणुओं में वैद्युतीयऋणात्मकता का अंतर कम है और H_2S में हाइड्रोजन आबंधन लगभग नगण्य है। परिणामस्वरूप H_2S संबद्ध(Associated) नहीं है और कमरे के तापमान पर गैस के रूप में मौजूद होता है।

4. घुलनशीलता : हाइड्रोजन आबंधन एक पदार्थ की दूसरेपदार्थ में घुलनशीलता को भी प्रभावित करता है। उदाहरण के लिए एलकोहल पानी के अणुओं के साथ हाइड्रोजन आबंधन के कारण पानी में अत्यधिक घुलनशील है।

5. वाष्पशीलता (**Volatility**): हाइड्रोजन आबंधनो के कारण विभिन्न अणुओं जैसे NH_3, H_2O और HF के क्वथनांक बहुत उच्च होते हैं। इसलिएए वे अपने समूहों के अन्य संबंधित सदस्यों के यौगिक के रूप में कम वाष्पशील होते हैं। इनकी वाष्पीकरण की एन्थेलपी भी लगभग उसी स्वरुप का अनुसरण करती हैं जैसा की उनके सिद्धांत क और क्वथनांक बिंदु ।

उदाहरण स्वरुप समूह 17 में वाष्पीकरण की एन्थेलपी के घटने का क्रम हैं।
HCl<HBr< HI < HF

इसी तरह समूह 15 और 16 की प्रवृत्ति इस प्रकार हैं
$H_2S < H_2Se < H_2Te < H_2O$
$PH_3 < AsH_3 < SbH_3 < N_H3$

प्रश्न: निम्नलिखित को अपने क्वथनांक HF, HCl, HBr बिंदु के घटते क्रम में व्यवस्थित करें।
उत्तर : HF>HBr>HCl

प्रश्न. क्या O-नाइट्रोफेनॉल और P-नाइट्रोफेनॉल के अणुओं में हाइड्रोजन आबंधन है बताइए दोनों में से किसका क्वथनांक अधिक है ?

उत्तर. दोनों में हाइड्रोजन आबंधन है। O-नाइट्रोफेनोल में अंतर आणविक हाइड्रोजन आबंध होते हैं। लेकिन P-नाइट्रोफेनोल में $–NO_2$ और –OH समूहों के बीच दूरी के कारण ऐसा कोई आबंधन नहीं बनता है।

5. सारांश
आण्विक कक्षक सिद्धांत परमाणु कक्षकों के संयोग एवं व्यवस्था से संपूर्ण अणु से सम्बद्ध आण्विक कक्षकों के बनने के रूप में आबंधन का वर्णन करता है। आण्विक कक्षकों की संख्या संयोग करनेवाले परमाणु कक्षकों की संख्या के बराबर होती है। आबंधी आण्विक कक्षक नाभिकों के मध्य इलेक्ट्रॉन घनत्व बढ़ा देते हैं तथा इनकी ऊर्जा व्यक्तिगत परमाणु कक्षकों की ऊर्जा से कम होती है। प्रतिआबंधी आण्विक कक्षक में नाभिकों के मध्य शून्य इलेक्ट्रॉन घनत्व होता है। इन कक्षकों की ऊर्जा व्याक्तिगत परमाणु कक्षकों की अपेक्षा उच्च होती है। अणुओं का इलेक्ट्रॉन विन्यास आण्विक कक्षकों में इलेक्ट्रॉनों को ऊर्जा के बढ़ते क्रम में भरते हुए लिखा जाता है। परमाणुओं की तरह यहाँ भी पॉउली अपवर्जन नियम तथा हुंड के नियम लागू होते हैं। यदि अणु के आबंधी आण्विक कक्षकों में इलेक्ट्रॉनों की संख्या प्रति-आबंधी आण्विक कक्षकों में उपस्थित इलेक्ट्रॉनों

की संख्या से अधिक होती है, तो अणु स्थायी होता है।
जब एक हाइड्रोजन परमाणु दो अत्यंत विद्युत् ऋणात्मक परमाणुओं F, O तथा N के बीच होता है, तो उसमें **हाइड्रोजन आबंध** बनाता है। यह अंतर-अणुक (समान या भिन्न अणुओं के अलग-अलग अणुओं के बीच या अंतरा-अणुक (एक ही अणु में) प्रकार का हो सकता है। हाइड्रोजन आबंध कई यौगिकों की संरचनाओं तथा गुणधर्मों पर प्रबलकारी प्रभाव डालते हैं।