

வேதிப்பிணைப்பும் மூலக்கூறுகட்டமைப்பும்

அறிவியலர்கள் புதிய சேர்மங்களை கண்டுபிடித்துவருகின்றனர்; அவற்றைப்பற்றிய உண்மைகளை முறையாக ஒழுங்குறுத்தி இப்போதுள்ள அறிவால் அவற்றை விளக்க முயல்கின்றனர். அந்த அறிவை மாற்றியமைத்தும் புதிய கண்டறிதல்களை விளக்குவதற்காக புதிய கோட்பாடுகளை உருவாக்கியும் வருகின்றனர்.

அடைநோக்குகள்

இந்த அலகை கற்றபின் உங்களால் இயலக்கூடியவை

- வேதிப்பிணைப்புக்கான கோசல்லாயியின் அணுகுமுறையை அறிந்துகொள்ளல்
- எண்வலிதியையும் அதன் செல்வரம்புகளையும் விளக்குதல்; எளிய மூலக்கூறுகளின் நூயிக்கட்டமைப்புகளை எழுதுதல்
- வெவ்வேறு வகையான பிணைப்புகள் உண்டாவதை விளக்குதல்
- பிவெசோவிக்கோட்பாட்டை விளக்குதல்; எளிய மூலக்கூறுகளின் வடிவங்களை முன்னறிதல்
- உடன்பிணைப்புகள் உண்டாவதற்கான பிணைவு அணுகுமுறையை விளக்குதல்
- உடன்பிணைப்புகளின் திசையப்பண்புகளை முன்னறிதல்
- s , p , d ஆகிய பரிதியங்கள் பங்குபெறும் வெவ்வேறு வகையான கலப்பினமாதல்களை விளக்குதல்; எளிய உடன்பிணைவு மூலக்கூறுகளின் வடிவங்களை வரைதல்
- ஒப்பீரணுமூலக்கூறுகளின் மூலக்கூறுப்பரிதியக்கோட்பாட்டை விவரித்தல்
- ஐதரசப்பிணைப்பு என்ற கருத்துருவை விளக்குதல்

பருப்பொருள் ஒரேவகையான தனிமங்களாலோ பலவகையான தனிமங்களாலோ ஆனது. மந்தவளிமங்களைத்தவிர வேறெந்தத் தனிமமும் இயற்கையின் இயல்பான நிலைமைகளில் தனியணுவாக இருப்பதில்லை. மாறாக, சில அணுக்களாலான தொகுதி சிறப்புப் பண்புகளுள்ள ஒரு வேதியினமாக இருப்பதை காணலாம். வேதியணுக்களின் இவ்வகையான தொகுதியை மூலக்கூறு என்கிறோம். இந்த அணுக்களை மூலக்கூறில் ஒன்றுசேர்த்து வைத்திருக்கும் ஒரு விசை இருக்கவேண்டும் என்பது வெளிப்படை. வெவ்வேறு மூலக்கூறுகளில் அணுக்கள், அயனிகள் போன்ற

வெவ்வேறு உள்ளடங்குகளை ஒன்றுசேர்த்து வைத்திருக்கும் ஈர்ப்புவிசையை வேதிப்பிணைப்பு என்று அழைக்கிறோம். வெவ்வேறு தனிமங்களின் அணுக்கள் வெவ்வேறு வகைகளில் இணைந்து வேதிச்சேர்மங்களை உண்டாக்குவதில் பல கேள்விகள் எழுகின்றன. அணுக்கள் ஏன் இணைகின்றன? சில சேர்க்கைகளை சாத்தியமாவது ஏன்? சில அணுக்கள் சேர்வதும் வேறு சில சேராததும் ஏதனால்? மூலக்கூறுகளுக்கு திட்டவட்டமான வடிவங்கள் இருப்பது ஏன்? இதுபோன்ற கேள்விகளுக்கு விடையளிக்க வெவ்வேறு கோட்பாடுகளும் கருத்துருகளும் அவ்வப்போது முன்வைக்கப்பட்டுள்ளன. இவற்றுள் சில

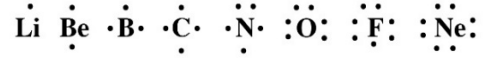
கோசல்லாயியின் அணுகுமுறை, பிணைவுமக் கூட்டின் எதிர்மின்னிச்சோடிவிலக்கல் (பிவெசோவி) என்ற கோட்பாடு, உடன்பிணைப்புக்கோட்பாடு, மூலக்கூறுபரிதியக்கோட்பாடு ஆகியவை. பிணைவுமையின் பல்வேறு கோட்பாடுகளின் படிமலர்ச்சியும் வேதிப்பிணைப்புகளின் தன்மையைப்பற்றிய விளக்கங்களும் அணுவின் அமைப்பையும் தனிமங்களின் எதிர்மின்னியமைவடிவங்களையும் தனிமங்களின் சீரொழுங்கட்டவணையையும் புரிந்துகொள்வதில் ஏற்பட்டுள்ள வளராக்கங்களுடன் நெருக்கமான தொடர்புள்ளவை. ஒவ்வொரு அமைப்பும் நிலைப்புமையை அடையும் போக்கு உள்ளது; ஆற்றலைக்குறைத்து நிலைப்புமையை அதிகரிக்க இயற்கைகையாளும் ஒரு வழி வேதிப்பிணைப்பு.

4.1 வேதிப்பிணைப்புக்கான கோசல்லாயியின் அணுகுமுறை

வேதிப்பிணைப்புகள் உண்டாவதை எதிர்மின்னிகளால் விளக்க பல முயற்சிகள் மேற்கொள்ளப்பட்டன; ஆனால் 1916இலே கோசலும் நூயியிம் மனநிறைவான விளக்கத்தை தருவதில் தனித்தனியாக வெற்றியடைந்தனர். இவர்களே பிணைவுமையின் விளக்கத்தை மந்தவளிமங்களின் மந்தத்தன்மையின் அடிப்படையில் முதன்முதலில் வழங்கியவர்கள்.

நூயி அணுவை ஒரு நேர்மமின்மமுள்ள உட்பகுதியாகவும் ஒரு வெளியோடாகவும் கருதினார். உட்பகுதியில் அணுக்கருவும் உள்ளோட்டு எதிர்மின்னிகளும் உள்ளன; வெளியோட்டில் மீளவாக எட்டு எதிர்மின்னிகள் இருக்கலாம். இந்த எட்டு எதிர்மின்னிகளும் உட்பகுதியைச் சுற்றி ஒரு கனசதுரத்தின் மூலைகளில் இருப்பதாகவும் எடுகொண்டார். இவ்வாறு, சோடியத்தின் வெளிப்புற ஒற்றை எதிர்மின்னிகனசதுரத்தின் ஒரு மூலையில் இருக்க, ஒரு மந்தவளிமத்தில் கனசதுரத்தின் எல்லா மூலைகளிலும் எதிர்மின்னிகள் இருக்கின்றன. எதிர்மின்னிகளின் இந்த எண்வம் அதிக நிலைப்பான எதிர்மின்னியடுக்கலை குறிக்கிறது. அணுக்கள் வேதிப்பிணைப்புகளால் தொடுக்கப்படும்போது அவை நிலைப்பான இந்த எண்வத்தை அடைகின்றன என்ற உரைகோளை நூயி வழங்கினார். சோடியத்திலும் குளோரினிலும் ஒரு எதிர்மின்னியை சோடியத்திலிருந்து குளோரினுக்கு மாற்றி Na^+, Cl^- அயனிகளை உண்டாக்குவதன் மூலம் இந்த எண்வத்தை அடையலாம். மற்ற சில மூலக்கூறுகளில், சான்றாக Cl_2, H_2, F_2 முதலியனவற்றில், அணுக்களிடையில் ஒரு எதிர்மின்னிச்சோடியை பகிர்வதன்மூலம் ஒரு பிணைப்பு ஏற்படுகிறது. இந்த நிகழ்முறையில் ஒவ்வொரு அணுவும் நிலைப்பான வெளிக்கூட்டெதிர்மின்னியெண்வத்தை பெறுகின்றது.

நூயியடையாளங்கள்: ஒரு மூலக்கூறு உருவாகும்போது வெளிக்கூட்டெதிர்மின்னிகளே வேதிப்பிணைப்புகளில் பங்குபெறுகின்றன. இவற்றை பிணைவும எதிர்மின்னிகள் என்கிறோம். உள்ளோட்டு எதிர்மின்னிகள் பொதுவாக பிணைப்பில் ஈடுபடாமல் ஒதுங்கி இருக்கின்றன. ஒரு அணுவிலுள்ள பிணைவும எதிர்மின்னிகளை குறிக்க கி. நி. நூயி என்ற அமெரிக்க வேதியிலர் ஒரு எளிய குறிப்பீட்டை அறிமுகமாக்கினார். இந்த குறிப்பீடுகளை நூயியடையாளங்கள் என்று அழைக்கிறோம். சான்றாக, இரண்டாம் சீரொழுங்குத்தனிமங்களின் நூயியடையாளங்கள் பின்வருமாறு:

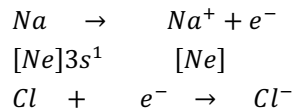


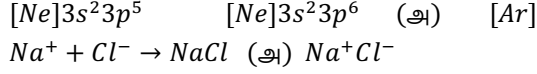
நூயியடையாளங்களின் பொருளுடைமை: அடையாளத்தைச்சுற்றியுள்ள புள்ளிகளின் எண்ணிக்கை பிணைவும எதிர்மின்னிகளின் எண்ணிக்கையை குறிக்கிறது. பிணைவும எதிர்மின்னிகளின் இந்த எண் ஒரு தனிமத்தின் பொதுவான பிணைவுமையை, அதாவது தொகுதிப்பிணைவுமையை கணக்கிட உதவுகிறது. ஒரு தொகுதியிலுள்ள தனிமங்களின் பிணைவுமை அதன் நூயியடையாளதிலுள்ள புள்ளிகளின் எண்ணிக்கையாகவோ எட்டிலிருந்து அதன் வேறுபாடாகவோ இருக்கிறது.

வேதிப்பிணைப்புகளின் கீழ்க்காணும் உண்மைகளை கோசல் சுட்டிக்காட்டினார்:

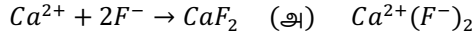
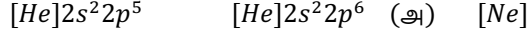
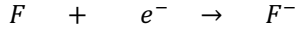
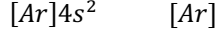
- சீரொழுங்கட்டவணையில் அதிக மின்னெதிர்மமான உட்பாக்கிகளுக்கும் அதிக மின்னேர்மமான காரமாழைகளுக்கும் இடையில் மந்தவளிமங்கள் உள்ளன.
- ஒரு உட்பாக்கியிலிருந்து எதிரயனியும் ஒரு காரமாழையிலிருந்து நேரயனியும் உண்டாவது அந்தந்த அணு ஒரு எதிர்மின்னியை இழப்பதாலோ பெறுவதாலோ நடைபெறுகிறது.
- இவ்வாறு உருவான நேர்மவயனியோ எதிர்மவயனியோ மந்தவளிமத்தின் எதிர்மின்னியமைவடிவத்தை அடைகிறது. ஈரெதிர்மின்னியுள்ள ஈலியத்தைத்தவிர, மற்றெல்லா மந்தவளிமங்களிலும் எட்டு (எண்வம்) எதிர்மின்னிகளுள்ள ns^2np^6 என்ற நிலைப்பான வெளிக்கூடுகள் உள்ளன.
- எதிரயனிகளும் நேரயனிகளும் மின்னிலைம ஈர்ப்பால் நிலைப்படகின்றன.

சான்றாக, சோடியத்திலிருந்தும் குளோரினிலிருந்தும் $NaCl$ உருவாவதை மேற்கண்ட வரைதிட்டத்தின்படி கீழ்க்காணுமாறு விளக்கலாம்.





இதைப்போல, கால்சியப்புகளாரைடு உருவாவதை கீழ்க்காணுமாறு காட்டலாம்.



இவ்வாறு நேர்மவயனிக்கும் எதிர்ம வயனிக்குமிடையான மின்னிலைம ஈர்ப்பால் உண்டாகும் பிணைப்பை மின்ம உடன்பிணைப்பு என்கிறோம். இவ்வாறு, மின்பிணைவுமை அயனியிலுள்ள மின்ம அலகுகளின் எண்ணிக்கைக்கு சமம். கால்சியத்தின் நேர்ம மின்பிணைவுமை இரண்டு என்றும் புளோரினின் எதிர்ம மின்பிணைவுமை ஒன்று என்றும் சொல்கிறோம்.

கோசலின் உரைகோள்கள் எதிர்மின்னி மாற்றலால் அயனிகள் உருவாவதையும் அதிலிருந்து அயனிப்படிக்கச்சேர்மங்கள் உருவாவதையும் பற்றிய அடிப்படைக்கருத்துருவாக விளங்குகின்றன. அயனிச்சேர்மங்களை புரிந்துகொண்டு அமைமுறையாக்குவதில் அவரது கருத்துகள் மிகுந்த பயனுள்ளவை. அதேநேரத்தில் பெரும் எண்ணிக்கையான சேர்மங்கள் இந்த கருத்துகளுடன் பொருந்த வில்லை என்பதையும் அவர் உணர்ந்தார்.

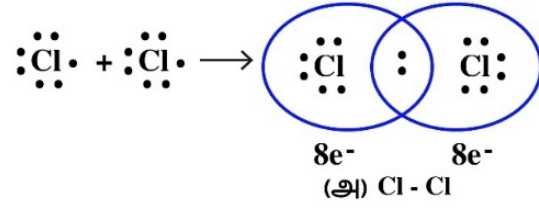
4.1.1 எண்வலிதி

கோசலும் நாயியும் 1916இல் அணுக்களிடையான வேதிச்சேர்க்கைகளைப்பற்றி வேதிப்பிணைப்புகளின் எதிர்மின்னிக்கோட்பாடு என்ற முக்கியமான கோட்பாட்டை வளராக்கினர். இதன்படி, அணுக்கள் பிணைவுமை எதிர்மின்னிகளை ஒரு அணுவிலிருந்து மற்றொரு அணுவுக்கு மாற்றுவதன்மூலமோ பிணைவுமை எதிர்மின்னிகளை பகிர்வதன்மூலமோ தங்கள் பிணைவுமைக்கூடுகளை எண்வலமாக்குகின்றன. இதை எண்வலிதி என்கிறோம்.

4.1.2 உடன்பிணைப்பு

இலாங்குமிர் (1919) எண்வலம் கனசதுரத்தில் நிலையாக அடுக்கப்பட்டிருக்கும் கருத்தை கைவிட்டு உடன்பிணைப்பு என்ற சொல்லை அறிமுகமாக்கினார். நாயிலாங்குமிரின் கோட்பாட்டை அறிந்துகொள்ள குளோரின்மூலக்கூறு (Cl_2) உருவாகும் விதத்தை கருதுவோம். குளோரினணுவின் $[Ne]3s^23p^5$ என்ற எதிர்மின்னியமைவடிவம் ஆர்கானின் அமைவடிவத்தைவிட ஒரு எதிர்மின்னி குறைவானது. குளோரின்மூலக்கூறு உருவாவதை இரண்டு குளோரினணுக்கள் ஒவ்வொன்றும் ஒவ்வொரு எதிர்மின்னியை மற்றதுடன் பகிர்வதாக புரிந்துகொள்ளலாம்.

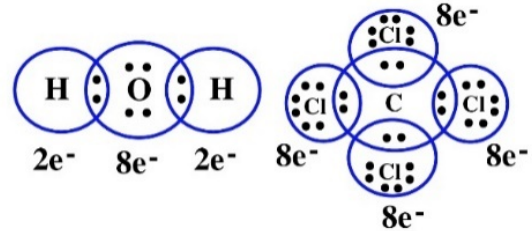
இவ்வாறு இரண்டு குளோரினணுக்களும் அருகிலுள்ள மந்தவளிமான ஆர்கானின் எண்வலவளிக்கூட்டை அடைகின்றன.



இங்கு புள்ளிகள் எதிர்மின்னிகளை குறிக்கின்றன. இவ்வகையான கட்டமைப்புகளை நாயிப்புள்ளிக்கட்டமைப்புகள் என்கிறோம்.

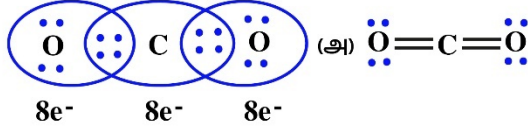
சேரும் அணுக்கள் ஒரேவகையாகவோ வெவ்வேறு வகையாகவோ இருக்கும் மற்ற மூலக்கூறுகளுக்கும் நாயிப்புள்ளிக்கட்டமைப்புகளை எழுதலாம். இதற்கான முக்கிய வரைக்கட்டுகள்:

- ஒவ்வொரு பிணைப்பும் அணுக்கள் ஒரு எதிர்மின்னிச்சோடியை தங்களிடையில் பகிர்வதால் உண்டாகிறது.
- ஒவ்வொரு பிணையும் அணுவும் பகிரப்படும் சோடிக்கு ஒரு எதிர்மின்னியையாவது வழங்குகிறது.
- எதிர்மின்னிகளை பகிர்வதன் விளைவாக பிணையும் அணுக்கள் மந்தவளிமங்களின் வெளிக்கூட்டு எதிர்மின்னியமைவடிவங்களை பெறுகின்றன.
- இவ்வாறு, நீர்மூலக்கூறிலும் கரிமநாற் குளோரைட்டின் மூலக்கூறிலும் உடன்பிணைப்பு உருவாவதை கீழ்க்காணுமாறு குறிக்கலாம்.

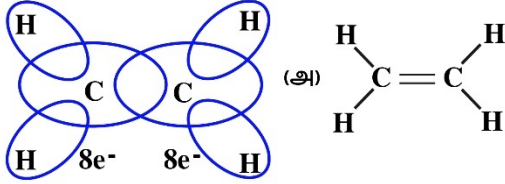


இவ்வாறு, இரண்டு அணுக்கள் ஒரு எதிர்மின்னிச்சோடியை பகிரும்போது அவை ஒரு ஒற்றை உடன்பிணைப்பால் இணைவதாக சொல்கிறோம். பல சேர்மங்களில் அணுக்களிடையில் பன்மப்பிணைப்புகள் உள்ளன. பன்மப்பிணைப்பு உருவாவதை ஒன்றுக்கு மேற்பட்ட எதிர்மின்னிச்சோடிகளை அணுக்கள் பகிர்வதாக நாம் எண்ணலாம். இரண்டு அணுக்கள் இரண்டு எதிர்மின்னிச்சோடிகளை பகிர்ந்தால் அதை இரட்டைப்பிணைப்பு என்கிறோம். சான்றாக, கரிமவீராக்குசைட்டின் மூலக்கூறில் கரிமவணுவுக்கும் ஒவ்வொரு ஆக்குசிசவணுவுக்குமிடையில் ஒரு இரட்டைப்

பிணைப்பு உள்ளது. அதைப்போல், ஈத்தீன்மூலக் கூறில் இரண்டு கரிமவணுக்களும் ஒரு இரட்டைப்பிணைப்பால் பிணைந்திருக்கின்றன.

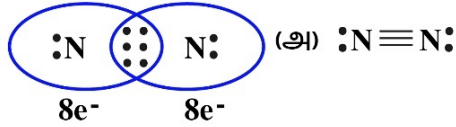


CO_2 மூலக்கூறில் இரட்டைப்பிணைப்புகள்

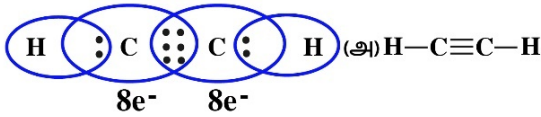


C_2H_4 மூலக்கூறு

இணையும் அணுக்கள் மூன்று எதிர்மின்னிச் சோடிகளை பகிரும்போது ஒரு மும்மப் பிணைப்பு உண்டாகிறது. சான்றாக, N_2 மூலக் கூறிலுள்ள இரண்டு நைற்றசவணுக்களிடையிலும் ஈத்தைநின் இரண்டு கரிமவணுக்கிடையிலும் இவ்வாறு நிகழ்கிறது.



N_2 மூலக்கூறு



C_2H_2 மூலக்கூறு

4.1.3 எளிய மூலக்கூறுகளின் நூயிக்குறிப்பீடு (நூயிக்கட்டமைப்புகள்)

நூயிப்புள்ளிக்கட்டமைப்பு மூலக்கூறுகளிலும் அயனிகளிலுமுள்ள பிணைப்புகளின் சித்திரத்தை பகிர்ந்த எதிர்மின்னிகளையும் எண்வலிதியையும் பயன்படுத்தி தருகிறது. இது மூலக்கூறின் பிணைப்பையும் நடத்தையையும் முற்றிலும் விளக்காவிடினும், மூலக்கூறுகள் உருவாவதையும் அதன் பண்புகளையும் புரிந்துகொள்வதில் பெரிதும் உதவுகிறது. எனவே மூலக்கூறுகளின் நூயிப்புள்ளிக்கட்டமைப்புகளை எழுதுவது மிகவும் பயனுள்ளது. கீழ்க்காணும் படிகளை பின்பற்றி நூயிப்புள்ளிக்கட்டமைப்புகளை எழுதலாம்.

- இணையும் அணுக்களின் பிணைவு எதிர்மின்னிகளை கூட்டி கட்டமைப்பை எழுதத்தேவையான மொத்த எதிர்மின்னிகளின் எண்ணிக்கையை பெறுகிறோம்.

சான்றாக, CH_4 மூலக்கூறில் கரிமத்திலிருந்து நான்கும் ஒவ்வொரு ஐதரசனிலிருந்து ஒன்றுமாக மொத்தம் எட்டு எதிர்மின்னிகள் பிணைப்பில் ஈடுபடுகின்றன.

- எதிர்மவயனிகளின் ஒவ்வொரு எதிர்ம மின்மமும் ஒரு எதிர்மின்னி கூடுவதை காட்டுகிறது; நேர்மவயனிகளில் ஒவ்வொரு நேர்ம மின்மமும் ஒரு எதிர்மின்னி குறைவதை காட்டுகிறது. சான்றாக, CO_3^{2-} அயனியில் நடுவணுத்தொகுதியில் இருப்பதைவிட இரண்டு எதிர்மின்னிகள் அதிகமாயிருப்பதை அதன் எதிர்ம மின்மம் காட்டுகிறது. NH_4^+ அயனியில் நடுவணுத்தொகுதியில் இருப்பதைவிட ஒரு எதிர்மின்னி குறைவாயிருக்கிறது.
- இணையும் அணுக்களின் வேதியடையாளங்களைப்பற்றியும் சேர்மத்தின் சட்டக்கட்டமைப்பைப்பற்றியுமான நம் அறிவை பயன்படுத்தி, எல்லா எதிர்மின்னிகளையும் பிணையும் எதிர்மின்னிச்சோடிகளாக பிணைப்புகளின் விழுக்காட்டில் அணுக்களிடையில் நிரப்புவது எளிது. சேர்மத்தின் சட்டக்கட்டமைப்பை நாம் பரிசோதனைகளிலிருந்தோ காரணங்களுடன் ஊகித்தோ அறிந்திருக்கலாம்.

அட்டவணை 4.1 சில மூலக்கூறுகளின் நூயிக்குறிப்பீடுகள்

மூலக்கூறு/அயனி	நூயிக்குறிப்பீடு	நூயிக்குறிப்பீடு
H_2	$\text{H}:\text{H}^*$	$\text{H}-\text{H}$
O_2	$:\ddot{\text{O}}::\ddot{\text{O}}:$	$:\ddot{\text{O}}=\ddot{\text{O}}:$
O_3	$:\ddot{\text{O}}::\overset{+}{\text{O}}::\ddot{\text{O}}^-:$	$:\ddot{\text{O}}=\overset{+}{\text{O}}-\ddot{\text{O}}^-:$
NF_3	$:\ddot{\text{F}}::\overset{+}{\text{N}}::\ddot{\text{F}}::\ddot{\text{F}}^-:$	$:\ddot{\text{F}}-\overset{+}{\text{N}}-\ddot{\text{F}}-\ddot{\text{F}}^-:$
CO_3^{2-}	$[\ddot{\text{O}}::\overset{+}{\text{C}}::\ddot{\text{O}}::\ddot{\text{O}}:]^{2-}$	$[\ddot{\text{O}}::\overset{+}{\text{C}}-\ddot{\text{O}}::\ddot{\text{O}}:]^{2-}$
HNO_3	$:\ddot{\text{O}}::\overset{+}{\text{N}}::\ddot{\text{O}}::\ddot{\text{O}}^-::\text{H}^+$	$:\ddot{\text{O}}::\overset{+}{\text{N}}-\ddot{\text{O}}::\ddot{\text{O}}^-::\text{H}^+$

- பொதுவாக, மீக்குறைவாக மின்னெதிர்மையான அணு மூலக்கூறிலோ அயனியிலோ மையவிடத்தில் இருக்கிறது. சான்றாக, NF_3 இலும் CO_3^{2-} இலும் முறையே நைற்றசனும் கரிமமும் மையவிடங்களிலும் புளோரினும் ஆக்குசிசனும் நுனியிடங்களிலும் இருக்கின்றன.
- ஒற்றைப்பிணைப்புகளுக்கு தேவையான எதிர்மின்னிச்சோடிகளை கணக்கிலெடுத்த பின், எஞ்சியிருக்கும் எதிர்மின்னிகள்

பன்மப்பிணைப்பாகவோ தனிச்சோடிகளாகவோ ஆகின்றன. ஒவ்வொரு பிணைந்த அணுவும் எதிர்மின்னிகளின் எண்வத்தை அடைவதே அடிப்படை வேட்கோள் (ஐதரசனுக்கு இருவம்).

சில மூலக்கூறுகளுக்கும் அயனிகளுக்குமான நூயிக்குறிப்பீடுகளை அட்டவணை 4.1 காட்டுகிறது.

சிக்கல் 4.1

CO மூலக்கூறின் நூயிப்புள்ளிக்கட்டமைப்பை எழுதுக.

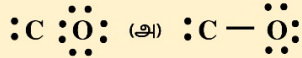
தீர்வு

படி 1. கரிமவணுவிலும் ஆக்குசிசவணுவிலும் உள்ள மொத்த எதிர்மின்னிகளை எண்ணுவோம். இவற்றின் வெளிக்கூட்டு (பிணைவுமக்கூட்டு) அமைவடிவங்கள் முறையே $2s^2sp^2$, $2s^22p^4$. எனவே மொத்த பிணைவு எதிர்மின்னிகள்

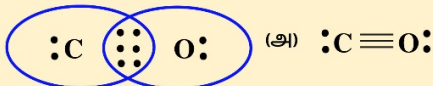
$$4 + 6 = 10$$

படி 2. கரிமவொற்றையாக்குசைட்டின் சட்டகக்கட்டமைப்பை $C O$ என்று எழுதுவோம்.

படி 3. கரிமத்துக்கும் ஆக்குசிசனுக்கும் இடையில் ஒரு ஒற்றைப்பிணைப்பை (ஒரு பகிரந்த எதிர்மின்னிச்சோடி) வரைந்து ஆக்குசிசனில் எண்வத்தை நிரப்புவோம். எஞ்சியிருக்கும் இரண்டு எதிர்மின்னிகளும் கரிமத்தில் தனிச்சோடியாகின்றன.



இது கரிமத்தில் எண்வத்தை நிறைவாக்கவில்லை. அதனால் நாம் பன்மப்பிணைப்பை நாடவேண்டும். இங்கு இது கரிமத்துக்கும் ஆக்குசிசனுக்குமிடையான மும்மப்பிணைப்பு.



இது இரண்டு அணுக்களிலும் எண்வத்தை நிறைவாக்குகிறது.

சிக்கல் 4.2

NO_2^- என்ற நைற்றைற்றையனியின் நூயிக்கட்டமைப்பை எழுதுக.

தீர்வு

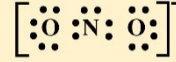
படி 1. நைற்றைற்றையனுவிலும் ஆக்குசிசவணுவிலும் உள்ள மொத்த எதிர்மின்னிகளையும் எதிர்மின்மத்துக்கு தேவையான ஒரு எதிர்மின்னியையும் சேர்த்துக்கூட்டுவோம்.

$$N(2s^22p^3), O(2s^22p^4)$$

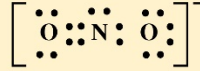
$$5 + (2 \times 6) + 1 = 18 \text{ எதிர்மின்னிகள்}$$

படி 2. NO_2^- இன் சட்டகக்கட்டமைப்பை $O N O$ என்று எழுதுவோம்.

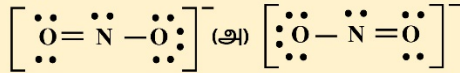
படி 3. நைற்றைற்றையனுக்கும் ஒவ்வொரு ஆக்குசிசனுக்குமிடையில் ஒரு ஒற்றைப்பிணைப்பை (ஒரு பகிரந்த எதிர்மின்னிச்சோடியை) வரைந்து ஆக்குசிசன்களில் எண்வத்தை நிரப்புவோம். எஞ்சியிருக்கும் இரண்டு எதிர்மின்னிகளும் நைற்றைற்றைற்றையனில் தனிச்சோடியானாலும் இது நைற்றைற்றையனில் எண்வத்தை நிறைவாக்கவில்லை.



அதனால் நாம் பன்மப்பிணைப்பை நாடவேண்டும். இங்கு இது நைற்றைற்றையனுக்கும் ஒரு ஆக்குசிசனுக்குமிடையிலான இருமப்பிணைப்பு. இதனால் கீழ்க்காணும் நூயிப்புள்ளிக்கட்டமைப்பை பெறுகிறோம்.



(அ)



இவை மூன்று அணுக்களிலும் எண்வத்தை நிறைவாக்குகின்றன.

4.1.4 வடிவு மின்மம்

பொதுவாக, நூயிப்புள்ளிக்கட்டமைப்புகள் மூலக்கூறுகளின் வடிவங்களை குறிப்பிடுவதில்லை. பலவணுவயனிகளில் நிகர மின்மம் குறிப்பிட்ட அணுவில் இல்லாமல் அயனிமுழுவதிலும் இருக்கின்றது. எனினும் ஒவ்வொரு அணுவுக்கும் ஒரு வடிவு மின்மத்தை நாம் ஒப்படைக்கலாம். ஒரு பலவணுமூலக்கூறிலோ அயனியிலோ ஒரு அணுவின் வடிவு மின்மத்தை அந்த அணுவின் தனித்த நிலையில் அதற்கு இருக்கும் பிணைவு எதிர்மின்னியின் எண்ணிக்கைக்கும் நூயிக்கட்டமைப்பில் அந்த அணுவுக்கு ஒப்படைத்த எதிர்மின்னிகளின் எண்ணிக்கைக்குமுள்ள வேறுபாடாக வரையறுக்கலாம். அதாவது

நூயிக்கட்டமைப்பில் அணுவின் வடிவு மின்மம் = தனித்த அணுவில் பிணைவு எதிர்மின்னிகளின் எண்ணிக்கை - தனிச்சோடி (பிணைவுறாத) எதிர்மின்னிகளின் எண்ணிக்கை - $\frac{1}{2}$ [பிணைவுறு (பகிரந்த) எதிர்மின்னிகளின் எண்ணிக்கை]

இந்த எண்ணிக்கை மூலக்கூறிலுள்ள ஒரு அணுவுக்கு ஒவ்வொரு பகிரந்த சோடியின் ஒரு எதிர்மின்னியும் தனிச்சோடியின் இரண்டு எதிர்மின்னிகளும் சொந்தம் என்ற அடிப்படையிலானது.

போன்ற பல சேர்மங்களை உண்டாக்குகின்றன.

- இந்த கோட்பாடு மூலக்கூறுகளின் வடிவங்களை விளக்கவில்லை.
- ஒரு மூலக்கூறின் ஆற்றலைப்பற்றி இது ஒன்றும் சொல்லாததால், மூலக்கூறுகளின் ஒப்பும நிலைப்புமையை இது விளக்கவில்லை.

4.2 அயனிப்பிணைப்பு என்ற மின் உடன்பிணைப்பு

கோசலும் நூயியும் அயனிப்பிணைப்பு உண்டாவதை விளக்கியதிலிருந்து அயனிச் சேர்மங்கள் உண்டாவது கீழ்க்காண்பவற்றை சார்ந்திருக்கும் என்று பெறுகிறோம்.

- அந்தந்த நடுவ அணுவிலிருந்து நேரயனியோ எதிரயனியோ உண்டாகும் எளிமை
- நேரயனிகளும் எதிரயனிகளும் திண்மத்தில் அடுக்கியிருப்பது; அதாவது, படிகச்சேர்மத்தின் அணிக்கட்டு

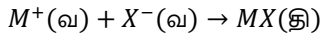
நேரயனி நடுவ அணுவிலிருந்து எதிர்மின்னியை நீக்குவதால் உண்டாகிறது; எதிரயனி நடுவ அணுவடன் ஒரு எதிர்மின்னியை சேர்ப்பதால் உண்டாகிறது.

$M(வ)$

$\rightarrow M^+(வ) + e^-$; அயனியாதலகவெப்பம்

$X(வ) + e^- \rightarrow X^-$; எதிர்மின்னிபெறுமவக

வெப்பம்



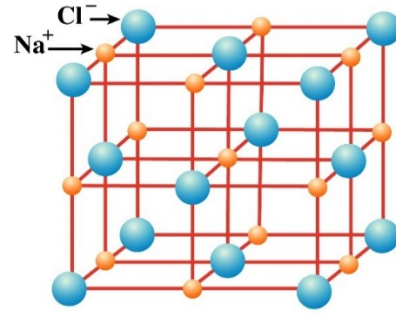
எதிர்மின்னிபெறுவகவெப்பம் $\Delta_{எபெ}H$ என்பது வளிமநிலையிலுள்ள ஒரு அணு அதன் தரையிலையில் ஒரு எதிர்மின்னியை பெறும் போது ஏற்படும் அகவெப்பமாற்றம் (**Error! Reference source not found.**). எதிர்மின்னியைப்பெறும் நிகழ்முறை வெப்பங்கொள்வதாகவோ வெப்பமுமிழ்வதாகவோ இருக்கலாம். இதன் மறுபக்கமாக, அயனியாதல் எப்போதும் வெப்பங்கொள்வது. எதிர்மின்னி பெறுமத்தின்போது ஏற்படும் ஆற்றன்மாற்றத்தின் எதிர்மத்தை எதிர்மின்னிநாட்டம் என்கிறோம்.

இதிலிருந்து, ஒப்பளவில் குறைந்த அயனியாதலகவெப்பமுள்ள தனிமங்களுக்கும் ஒப்பளவில் அதிகமான எதிர்மின்னிபெறுவகவெப்பமுள்ள தனிமங்களுக்குமிடையில் அயனிப்பிணைப்பு எளிதில் உண்டாகும் என்று அறிகிறோம்.

பெரும்பான்மையான அயனிச்சேர்மங்களில் மாழைத்தனிமங்களிலிருந்து வருவித்த நேரயனிகளும் அன்மாழைத்தனிமங்களிலிருந்து வருவித்த எதிரயனிகளும் உள்ளன.

இரண்டு அன்மாழைத்தனிமங்களாலான அம்மோனிய அயனி (NH_4^+) ஒரு விதிவிலக்கு.

படிகநிலையிலுள்ள அயனிச்சேர்மங்களில் நேரயனிகளும் எதிரயனிகளும் கூலுமீர்ப்பால் ஒன்றுசேர்ந்து ஒழுங்கான முப்பருமான அடுக்கத்தில் இருக்கின்றன. அயனிகளின் அளவுகளையும் அவற்றின் அடுக்கங்களையும் மற்ற காரணிகளையும் சார்ந்து இந்த சேர்மங்கள் வெவ்வேறு படிகக்கட்டமைப்புகளில் படிகமாகின்றன. சான்றாக, சோடியக் குளோரைட்டின் ($NaCl$, பாறையுப்பு) படிகக் கட்டமைப்பு கீழ்க்காணுமாறு உள்ளது.



பாறையுப்பின் கட்டமைப்பு

அயனித்திண்மங்களில் எதிர்மின்னிபெறும் வகவெப்பமும் அயனியாதலகவெப்பமும் சேர்ந்த கூட்டுத்தொகை நேர்மமாயிருக்கலாம்; எனினும், படிக அணிக்கட்டு உருவாகும்போது வெளியாகும் ஆற்றலால் படிகக்கட்டமைப்பு நிலைப்படைகிறது. சான்றாக, வளிம சோடியத்திலிருந்து சோடியவயனி உண்டாவதற்கான அயனியாதலகவெப்பம் $495.8 \text{ kJ mol}^{-1}$; வளிமக்குளோரினுடன் ஒரு எதிர்மின்னி சேர்ந்து குளோரைட்டயனி உண்டாவதற்கான எதிர்மின்னிபெறுவகவெப்பம் $-348.7 \text{ kJ mol}^{-1}$ மட்டுமே. இவற்றின் கூட்டுத்தொகையான 147 kJ mol^{-1} ஆற்றலை சோடியக்குளோரைட்டின் அணிக்கட்டு உருவாவதன் அகவெப்பமான -788 kJ mol^{-1} தாராளமாக ஈடுசெய்து விடுகிறது. எனவே, இந்த நிகழ்முறையில் உட்கொள்ளப்படும் ஆற்றலைவிட வெளியாகும் ஆற்றல் அதிகம். இவ்வாறாக, அணிக்கட்டு உருவாதலின் அகவெப்பமே ஒரு அயனிச் சேர்மத்தின் நிலைப்புமையின் பண்பிய அளவீட்டை தருகிறது; வளிமநிலையில் அயனியினங்களைச்சுற்றி எண்வ எதிர்மின்னிகளை அடைவது முக்கியப்பங்கை வகிக்கவில்லை.

அணிக்கட்டின் அகவெப்பம் அயனிச் சேர்மங்கள் உருவாவதில் முக்கியப்பங்கை வகிப்பதால் அதைப்பற்றி நாம் மேலும் அறிந்துகொள்வோம்.

4.2.1 அணிக்கட்டகவெப்பம்

ஒரு மோல் அளவான திண்ம அயனிச் சேர்மத்தை அதன் வளிம உள்ளடங்கியயனி

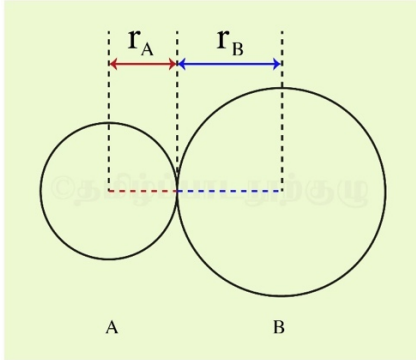
களாக முற்றிலும் பிரிக்கத்தேவையான ஆற்றலை அந்த அயனித்திண்மத்தின் அணிக்கட்டகவெப்பம் என்கிறோம். சான்றாக, $NaCl$ இன் அணிக்கட்டகவெப்பம் 788 kJ mol^{-1} . அதாவது, ஒரு மோல் திண்ம $NaCl$ ஐ ஒரு மோல் Na^+ (வ) ஆகவும் ஒரு மோல் Cl^- (வ) ஆகவும் முடிவிலி தொலைவுக்கு பிரிக்க 788 kJ mol^{-1} ஆற்றல் தேவைப்படுகிறது.

இந்த நிகழ்முறையில் எதிரெதிர் மின்மங்களுள்ள அயனிகளிடையான ஈர்ப்புவிசைகளும் ஒத்த மின்மங்களுள்ள அயனிகளிடையான விலக்கல்விசைகளும் பங்குபெறுகின்றன. திண்மப்படிசம் முப்பருமானமானதால், ஈர்ப்பும் விலக்கலுமான இடைவினைகளிலிருந்து மட்டுமே அணிக்கட்டகவெப்பத்தை நேரடியாக கணக்கிடவியலாது; அதற்கு படிசத்தின் வடிவத்துடன் தொடர்பான காரணிகளையும் கணக்கிடுவதே வேண்டும்.

4.3 பிணைப்பின் அளபுருக்கள்

4.3.1 பிணைப்புநீளம்

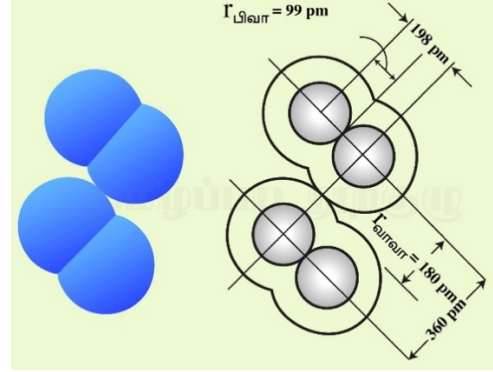
ஒரு மூலக்கூறில் பிணைப்புண்ட இரண்டு அணுக்கருக்களிடையிலான தொலைவை பிணைப்புநீளம் என்று வரையறுக்கிறோம். பிணைப்புநீளங்களை நிறநிரலியல், ஊடுகதிர் விளிம்புவளைவு, எதிர்மின்னிவிளிம்புவளைவு போன்ற செய்துட்பங்களால் அளவிடலாம். இவற்றைப்பற்றி நீங்கள் உயர்வகுப்புகளில் படிப்பீர்கள். பிணைப்புண்ட சோடியின் ஒவ்வொரு அணுவும் பிணைப்புநீளத்துக்கு பங்களிக்கிறது (படம் 4.1). ஒரு உடன்பிணைப்பில் ஒவ்வொரு அணுவின் பங்களிப்பையும் அந்த அணுவின் உடன்பிணைப்பாரம் என்கிறோம்.



படம் 4.1 AB என்ற பிணைவு மூலக்கூறில் பிணைப்புநீளம்

பிணைந்த நிலைமையில் ஒரு அணுவை அண்டைய அணுவின் உள்வத்தை தொட்டுக் கொண்டிருக்கும் ஒரு கோளமாக தோராயமாக்குவதன்மூலம் உடன்பிணைப்பாரத்தை அளக்கிறோம். உடன்பிணைப்பாரம் என்பது ஒரே மூலக்கூறில் உடன்பிணைப்பால் இணைந்த ஒத்த அணுக்களிடையான தொலைவில் பாதி.

வாண்டர்வால்சின் ஆரம் என்பது பிணைப்புறா நிலைமையில் பிணைவுமக்கூட்டையும் சேர்த்து அணுவின் மொத்த அளவை குறிக்கிறது. மேலும், வாண்டர்வால்சாரம் திண்மத்தின் வெவ்வேறு மூலக்கூறுகளிலுள்ள இரண்டு ஒத்த அணுக்களிடையான தொலைவில் பாதி. குளோரின் உடன்பிணைப்பாரத்தையும் வாண்டர்வால்சாரத்தையும் படம் 4.2 காட்டுகிறது.



படம் 4.2 குளோரின்மூலக்கூறில்

உடன்பிணைப்பாரமும் வாண்டர்வால்சாரமும். உள்வட்டங்கள் குளோரின் அணுக்களுக்கு நிகரானவை. $r_{வாவா}$, $r_{பிவா}$ முறையே வாண்டர்வால்சாரத்தையும் உடன்பிணைப்பாரத்தையும் குறிக்கின்றன.

சில வழக்கமான ஒற்றை, இரட்டை, மும்மப் பிணைப்புகளின் சராசரியான பிணைப்புநீளங்களை அட்டவணை 4.2 காட்டுகிறது. சில வழக்கமான மூலக்கூறுகளின் பிணைப்புநீளங்களை அட்டவணை 4.3 காட்டுகிறது. சில வழக்கமான தனிமங்களின் உடன்பிணைப்பாரங்களை அட்டவணை 4.4 காட்டுகிறது.

அட்டவணை 4.2 சில ஒற்றை, இரட்டை, மும்மப்பிணைப்புகளின் சராசரியான பிணைப்புநீளங்கள்

பிணைப்பின் வகை	உடன்பிணைப்புநீளம் (pm)
O - H	96
C - H	107
N - O	136
C - O	143
C - N	143
C - C	154
C = O	121
N = O	122
C = C	133
C = N	138
C ≡ N	116

$C \equiv C$	120
--------------	-----

அட்டவணை 4.3 சில வழக்கமான மூலக்கூறுகளில் பிணைப்புநீளங்கள்

மூலக்கூறு	பிணைப்புநீளம் (pm)
$H_2 (H - H)$	74
$F_2 (F - F)$	144
$Cl_2 (Cl - Cl)$	199
$Br_2 (Br - Br)$	228
$I_2 (I - I)$	267
$N_2 (N \equiv N)$	109
$O_2 (O = O)$	121
$HF (H - F)$	92
$H - Cl (H - Cl)$	127
$HBr (H - Br)$	141
$HI (H - I)$	160

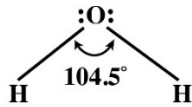
அட்டவணை 4.4 உடன்பிணைப்பாரங்கள்,

$r_{பிவா}/(pm)$

H	37						
C	77(1)	N	74(1)	O	66(1)	F	64
	67(2)		65(2)		57(2)		Cl
	60(3)		55(3)				
		P	110	S	104(1)	Br	114
					95(2)		
		As	121	Se	104	I	133
		Sb	141	Te	137		

4.3.2 பிணைப்புக்கோணம்

இது ஒரு மூலக்கூறிலோ அயனியிலோ மையவணுவைச்சுற்றி பிணையும் எதிர்மின்னிச்சோடிகள் இருக்கும் பரிதியங்களுக்கிடையான கோணம் என்று வரையறுக்கப்படுகிறது. பிணைப்புக்கோணங்களை பாகையில் சொல்லலாம். இவற்றை நிறநிரலியமுறைகளில் பரிசோதனை களால் அறியலாம். இது மூலக்கூறிலோ அயனியிலோ மையவணுவைச்சுற்றி பரிதியங்கள் விரவியிருப்பதன் ஒரு சித்திரத்தை தந்து, அதன் வடிவத்தை தீர்மானிக்க உதவுகிறது. சான்றாக, நீரில் $H - O - H$ பிணைப்புக்கோணத்தை கீழ்க்காணுமாறு விவரிக்கலாம்.

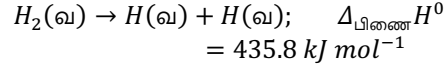


4.3.3 பிணைப்பகவெப்பம்

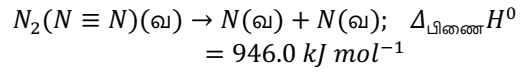
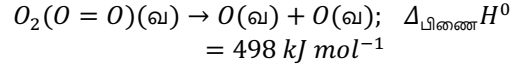
வளிமநிலையில் இரண்டு அணுக்களிடையில் ஒரு மோல் அளவுள்ள ஒரு குறிப்பிட்ட

வகையான பிணைப்பை உடைக்கத்தேவையான ஆற்றலின் அளவாக இதை வரையறுக்கிறோம். பிணைப்பகவெப்பத்தின் அலகு $kJ mol^{-1}$. சான்றாக, ஐதரச மூலக்கூறில் $H - H$ பிணைப்பின் அகவெப்பம்

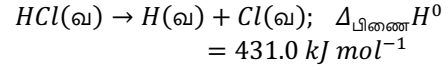
$435.8 kJ mol^{-1}$. அதாவது



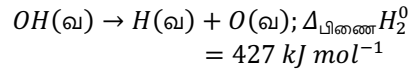
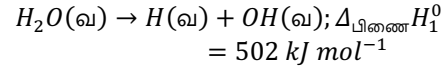
இதைப்போலவே, பன்மப்பிணைப்புகளுக்கும் பிணைப்பகவெப்பத்தை காணலாம். சான்றாக, O_2 , N_2 ஆகிய மூலக்கூறுகளுக்கு இவை பின்வருமாறு உள்ளன.



பிணைப்புப்பிரிகையின் அகவெப்பம் அதிகரிக்கும்போது மூலக்கூறிலுள்ள பிணைப்பு வலுவானதாகிறது என்பது முக்கியமாக கருதவேண்டியது. HCl போன்ற வேற்றீரணு மூலக்கூறிலும் இவ்வாறே.



பலவணுமூலக்கூறுகளில் பிணைப்புகளின் வலிமையை அளவிடுவது மேலும் சிக்கலானது. சான்றாக, H_2O மூலக்கூறில் இரண்டு $H - O$ பிணைப்புகளையும் முறிக்க தேவையான அகவெப்பளவுகள் சமமல்ல.



இரண்டாம் பிணைப்பு உடைவது வேறுபட்ட வேதிச்சூழலில் நடைபெறுவதை $\Delta_{பிணை} H^0$ மதிப்புகளிலுள்ள வேறுபாடு காட்டுகிறது. இதுவே நீர், ஈத்தனால் போன்ற வெவ்வேறு மூலக்கூறுகளிலுள்ள $O - H$ பிணைப்புகளின் ஆற்றல் வேறுபடுவதற்கும் காரணம். எனவே, பலவணுமூலக்கூறுகளில் சராசரி பிணைப்பகவெப்பம் என்ற சொல்லை பயன்படுத்துகிறோம். இதைப்பெற மொத்த பிணைப்பகவெப்பத்தை பிணைப்புகளின் எண்ணிக்கையால் வகுக்கிறோம். எனவே நீரின் சராசரி பிணைப்பகவெப்பம்

$$= \frac{502 + 427}{2} = 464.5 kJ mol^{-1}$$

4.3.4 பிணைப்புமுறைமை

உடன்பிணைப்பின் நூயிவிவரிப்பில், ஒரு மூலக்கூறிலுள்ள இரண்டு அணுக்களிடையான பிணைப்புகளின் எண்ணிக்கையை பிணைப்பு முறைமை என்கிறோம். சான்றாக, H_2 , O_2 , N_2

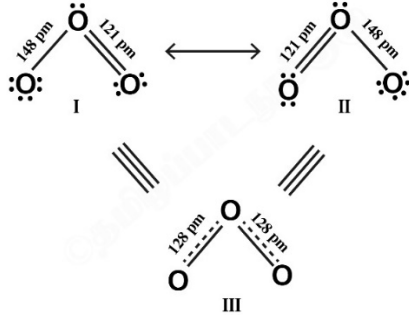
ஆகிய மூலக்கூறுகளில் முறையே ஒற்றை, இரட்டை, மும்மச்சோடிகள் பகிரப்படுவதால் இவற்றில் பிணைப்புமுறைமைகள் முறையே 1, 2, 3. இதைப்போல், COஇல் C, O ஆகிய அணுக்களிடையில் மூன்றுசோடி பகிர்ந்த எதிர்மின்னிகள் இருப்பதால் இங்கு பிணைப்பு முறைமை 3. நெற்றசமூலக்கூறின் மும்மப் பிணைப்புக்கு $\Delta_{\text{பிணை}} H^0 = 946 \text{ kJ mol}^{-1}$. இது ஈரணுமூலக்கூறுகளுள் மீயதிசுமமானவற்றுள் ஒன்று.

சமவெதிர்மின்னிய மூலக்கூறுகளிலும் அயனிகளிலும் பிணைப்புமுறைமை சமம்; சான்றாக, F_2 இலும் O_2^{2-} இலும் பிணைப்பு முறைமை 1; N_2 , CO , NO^+ ஆகியவற்றில் பிணைப்புமுறைமை 3.

மூலக்கூறுகளின் நிலைப்புமையை அறிந்து கொள்வதில் பயன்படும் ஒரு பொதுவான உடனுறவு என்னவென்றால், பிணைப்புமுறைமை அதிகரிக்கும்போது பிணைப்பகவெப்பம் அதிகரித்து பிணைப்புநீளம் குறைகிறது.

4.3.5 ஒத்தலைவுக்கட்டமைப்புகள்

பலநேரங்களில் பரிசோதனைகளால் கண்டறிந்த அளவுகளுடன் இணங்கும்வகையில் ஒரு மூலக்கூற்றை குறிப்பிட ஒரேயொரு நூயிக்கட்டமைப்பு போதவில்லை என்பதை காண்கிறோம். சான்றாக, ஒசோனின் (O_3) மூலக்கூறை கீழ்க்காணும் I என்ற கட்டமைப்பாலும் குறிக்கலாம்; IIஆலும் குறிக்கலாம்.



படம் 4.3 O_3 மூலக்கூறில் ஒத்தலைவு. I, II

ஆகிய கட்டமைப்புகள் முறையேற்புவடிவங்களை குறிக்கின்றன; III என்ற கட்டமைப்பு ஒத்தலைவுக்கலப்பினம்).

இரண்டு கட்டமைப்புகளிலும் ஒரு $O-O$ ஒற்றைப்பிணைப்பும் ஒரு $O=O$ இரட்டைப்பிணைப்பும் உள்ளன. இயல்பான $O-O$, $O=O$ பிணைப்புகளின் நீளங்கள் முறையே 148 pm, 121 pm. ஒசோன்மூலக்கூறில் இரண்டு பிணைப்புகளும் 128 pm மதிப்புடன் சமநீளமாக இருப்பதை பரிசோதனைகளால் கண்டறிக்கிறோம். இவ்வாறு ஒசோனின் ஆக்குசிசனிடைப்பிணைப்பு ஒற்றைப்பிணைப்புக்கும் இரட்டைப்

பிணைப்புக்கும் இடைப்பட்டதாகிறது. இதை மேற்காட்டிய எந்த நூயிக்கட்டமைப்பாலும் குறிக்கவியலாது என்பது தெளிவு.

ஒசோன் போன்ற மூலக்கூறுகளின் சரியான கட்டமைப்புகளை குறிப்பதில் ஏற்படும் இவ்வகையான இடர்களை கையாள ஒத்தலைவு என்ற கருத்துரு அறிமுகமானது. ஒத்தலைவுக் கருத்துருவின்படி, ஒரு மூலக்கூறை ஒரே நூயிக்கட்டமைப்பால் விவரிக்க இயலாதபோது, ஆற்றல், அணுக்கருக்களின் இடநிலைகள், எதிர்மின்னிகளின் பிணைப்புச்சோடிகள், பிணைப்பிலாச்சோடிகள் ஆகியவை ஒத்திருக்கும்படியான பல கட்டமைப்புகளை கலப்பினத்தின் முறையேற்புக்கட்டமைப்புகளாக எடுக்கிறோம். இந்த கலப்பினக்கட்டமைப்பு மூலக்கூறை சரியாக விவரிக்கிறது. இவ்வாறு, ஒசோனுக்கு மேலே காட்டிய I, II ஆகிய கட்டமைப்புகள் முறையேற்புக் கட்டமைப்புகளும் III கலப்பினக்கட்டமைப்பும் ஆகின்றன. இந்த கலப்பினக்கட்டமைப்பு ஒசோனின் கட்டமைப்பை மேலும் சரியாக குறிப்பிடுகிறது. இதை ஒத்தலைவுக்கலப்பினம் என்கிறோம். ஒத்தலைவை இரட்டைத்தலையுள்ள அம்புக் குறியால் குறிக்கிறோம்.

கரிமமிலேட்டயனியும் கரிமவீராக்குசைடின் மூலக்கூறும் ஒத்தலைவுக்கட்டமைப்புக்கு மற்ற சான்றுகள். பொதுவாக, நாம் இவ்வாறு கூறலாம்:

- ஒத்தலைவுக்கலப்பினக்கட்டமைப்பின் ஆற்றல் எந்தவொரு முறையேற்புக்கட்டமைப்பின் ஆற்றலையும்விட குறைந்திருப்பது ஒத்தலைவு மூலக்கூறை நிலைப்பிக்கிறது.
- பிணைப்பின் சிறப்பியல்புகளை ஒத்தலைவு சராசரியாக்குகிறது.

இவ்வாறு, படம் 4.3இல் காட்டிய ஒசோனின் ஒத்தலைவுக்கலப்பினத்தின் ஆற்றல் I, II ஆகிய முறையேற்புக்கட்டமைப்புகளைவிட குறைந்தது.

ஒத்தலைவைப்பற்றி நிலவும் பல தவறான கருத்துகளை விலக்கவேண்டும். கீழ்க்காண்பவற்றை நினைவுகொள்க.

- முறையேற்புவடிவங்கள் உண்மையில் இருப்பவை அல்ல.
- மூலக்கூறு சிலநேரங்களில் ஒரு முறையேற்புவடிவத்திலும் மற்றநேரங்களில் மற்ற முறையேற்புவடிவங்களிலும் இருப்பதில்லை.
- இடமாற்றியங்களிடையில் (கீற்றோவீனால், அதாவது, கீற்றோவுக்கும் ஈனாலுக்கு மிடையில்) இருப்பதுபோல் முறையேற்பு வடிவங்களிடையில் சமநிலை இல்லை.
- மூலக்கூறுக்கு ஒரே கட்டமைப்பு உள்ளது. இந்த கட்டமைப்பு முறையேற்புவடிவங்க

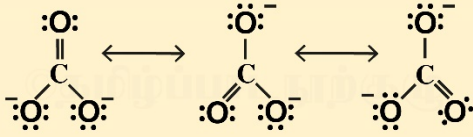
ளின் ஒத்தலைவுக்கலப்பினம். இதை ஒரு நூயிக்கட்டமைப்பால் குறிக்கவியலாது.

சிக்கல் 4.3

CO_3^{2-} அயனியின் கட்டமைப்பை ஒத்தலை வால் விளக்குக.

தீர்வு

கரிமவணுவுக்கும் ஆக்குசிவணுவுக்கு மிடையில் இரண்டு ஒற்றைப்பிணைப்புகளும் ஒரு இரட்டைப்பிணைப்பும் என்ற அடிப்படையிலான ஒரு நூயிக்கட்டமைப்பு மூலக்கூறை சரியாகக் குறிப்பிட போதாது. ஏனெனில், இந்த கட்டமைப்புகளில் சமானமற்ற பிணைப்புகள் உள்ளன. பரிசோதனைக்கண்டறிதல்களின் படி CO_3^{2-} இன் மூன்று பிணைப்புகளும் சமானமானவை. எனவே, கரிமமிலேட்டயனியை கீழ்க்காணும் மூன்று முறையேற்புக் கட்டமைப்புகளாலான ஒத்தலைவுக்கலப்பினமாக குறிக்கிறோம்.



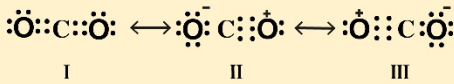
படம் 4.4 CO_3^{2-} இல் ஒத்தலைவு. மூன்று முறையேற்புவடிவங்கள்.

சிக்கல் 4.4

CO_2 மூலக்கூறின் கட்டமைப்பை விளக்குக.

தீர்வு

CO_2 மூலக்கூறில் பரிசோதனைகளால் கண்டறிந்த கரிமவாக்குசிப்பிணைப்புநீளம் 115 pm . இயல்பான கரிமவாக்குசி இரட்டைப்பிணைப்பின் நீளம் 121 pm ; மும்மப்பிணைப்பின் நீளம் 110 pm . CO_2 இல் கண்ட பிணைப்புநீளம் $C = O$, $C \equiv O$ ஆகிய பிணைப்புகளுக்கு இடைப்பட்டது. எனவ இதை ஒற்றை நூயிக்கட்டமைப்பால் குறிக்கவியலாத தால் ஒன்றுக்கு மேற்பட்ட நூயிக்கட்டமைப்புகள் தேவையாகின்றன. CO_2 இன் கட்டமைப்பை கீழ்க்காணும் மூன்று ஒத்தலைவுக்கட்டமைப்புகளின் கலப்பினமாக சிறப்பாக குறிக்கலாம்.



படம் 4.5 CO_2 மூலக்கூறில் ஒத்தலைவு. I, II, III ஆகியவை மூன்று முறையேற்புவடிவங்களை குறிக்கின்றன.

4.3.6 பிணைப்புகளின் முனைமை

நூற்றுக்குநூறு அயனிப்பிணைப்போ உடன்பிணைப்போ இருப்பது ஒரு நல்லியல்பான நிலைமையை குறிக்கிறது. உண்மையில், எந்தப்பிணைப்பும் முற்றிலும் அயனிப்பிணைப்பாகவோ முற்றிலும் உடன்பிணைப்பாகவோ இருப்பதில்லை. இரண்டு ஐதரசவணுக்களிடையான உடன்பிணைப்பிலும் சற்று அயனித்தன்மை இருக்கவேசெய்கிறது (5.1 \AA ம் பகுதியை காண்க).

H_2 , O_2 , Cl_2 , N_2 , F_2 போன்ற இரண்டு ஒத்த அணுக்களிடையில் உடன்பிணைப்பு உருவாகும் போது, பகிர்ந்த எதிர்மின்னிகளை இரண்டு அணுக்களும் சமமாக ஈர்க்கின்றன. இதன் விளைவாக, எதிர்மின்னிச்சோடி முற்றொருமையான இரண்டு அணுக்கருக்களிடையில் அமைகிறது. இவ்வாறு உருவாகும் பிணைப்பை முனையமற்ற உடன்பிணைப்பு என்கிறோம். இதற்கு மாறாக, HF போன்ற வேற்றீரணு மூலக்கூறில், குளோரினின் மின்னெதிர்மை ஐதரசனுடையதைவிட மிக அதிகமாதலால் (Error! Reference source not found.), பகிர்ந்த எதிர்மின்னிச்சோடி குளோரினணுவின் அருகில் இருக்கிறது. இதனால் விளையும் உடன்பிணைப்பு முனையவுடன்பிணைப்பு.

முனையுறலின் விளைவாக, மூலக்கூறில் இருமுனைத்திருப்புமை உள்ளது. இருமுனைத்திருப்புமையை மின்மத்தின் பருமனளவையும் நேர்மமின்மத்தின் மையத்துக்கும் எதிர்மமின்மத்தின் மையத்துக்குமிடையான தொலைவையும் பெருக்கிய தொகையாக வரையறுக்கலாம். இதை μ என்ற கிரேக்க எழுத்தால் குறிப்பது வழக்கம். அதாவது,

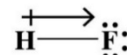
இருமுனைத்திருப்புமை (μ) = மின்மம் (Q) \times பிரிவுத்தொலைவு (r)

இருமுனைத்திருப்புமையை வழக்கமாக திபை (D) என்ற அலகுகளில் குறிக்கிறோம். அலகுகளுக்கிடையான மாற்றமைத்தற்காரணி

$$1D = 3.33564 \times 10^{-30} \text{ C m}$$


இங்கு, C கூலும், m மீட்டர்.

இருமுனைத்திருப்புமை ஒரு திசையன். இதை ஒரு அம்புக்குறியால், தலை நேர்ம மையத்தை நோக்கியும் வால் எதிர்மமையத்தை நோக்கியும் இருக்குமாறு, குறிப்பது வழக்கம். ஆனால், வேதியியலில் நூயிக்கட்டமைப்பில் ஒரு குறுக்கு வெட்டிய அம்புக்குறியால் (\rightarrow), குறுக்குவெட்டு நேர்ம முனையிலும் தலை எதிர்ம முனையிலும் இருக்குமாறு, குறிப்பது வழக்கம். அதாவது, அம்புக்குறி எதிர்மின்னிகள நகர்ந்துள்ள திசையை குறிக்கிறது. சான்றாக, HF இன் இருமுனைத்திருப்புமையை

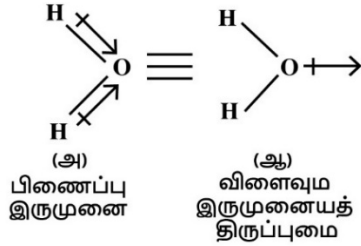


என்று குறிக்கிறோம். அதாவது, அம்புக்குறி எதிர்மின்னியடர்வு நகர்வதை குறிக்கிறது. இது வழக்கமான இருமுனைத்திருப்புமைத்திசையின் திசைக்கு எதிரானது என்பதை நோக்குக.

பீட்டர் திபை என்ற நெதரி லாந்திய வேதியியலர் ஊடுகதிர் விளிம்புவளைவிலும் இருமுனைத்திருப்புமையிலும் தான் செய்த பணிக்காக 1936இல் நோபல் பரிசை பெற்றார். இருமுனைத்திருப்புமையின் பருமளவை இவரது பெயரிலான திபை அலகுகளால் வழங்குகிறோம்.

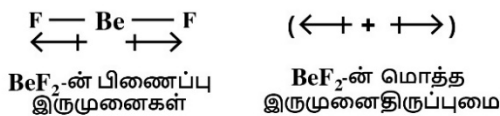


பலவணுமூலக்கூறுகளில், இருமுனைத்திருப்புமை பிணைப்பிருமுனை எனப்படும் தனித்தனியான பிணைப்புகளின் இருமுனைகளை மட்டுமல்லாமல் வெவ்வேறு பிணைப்புகள் வெளியில் அடுக்கப்பெறுவதையும் சார்ந்திருக்கிறது. இவ்வாறிருக்கும்போது ஒரு மூலக்கூறின் இருமுனைத்திருப்புமை பல்வேறு பிணைப்புகளின் இருமுனைத்திருப்புமைகளின் திசையக் கூட்டல் ஆகிறது. சான்றாக, வளைந்த கட்டமைப்புள்ள H_2O மூலக்கூறில் இரண்டு $H-O$ பிணைப்புகளும் ஒன்றுக்கொன்று 104.5° கோணத்திலுள்ளன.



நிகர இருமுனைத்திருப்புமையான $1.85 D$ இரண்டு $H-O$ பிணைப்புகளின் இருமுனைத்திருப்புமைகளின் விளைவுமம். இது $6.17 \times 10^{-30} C m$ என்ற மதிப்புக்கு சமம்; ஏனெனில் $1D = 3.33564 \times 10^{-30} C m$

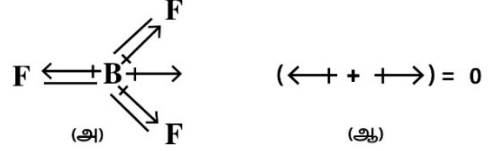
BeF_2 இன் இருமுனைத்திருப்புமை சுழியம்; ஏனெனில், இரண்டு பிணைப்பிருமுனைகளும் எதிரெதிர் திசைகளை நோக்கியிருப்பதால் அவை ஒன்றையொன்று நீக்கிவிடுகின்றன.



அட்டவணை 4.5 சில மூலக்கூறுகளின் இருமுனைத்திருப்புமைகள்

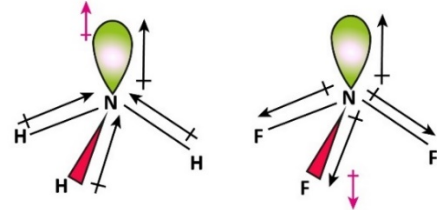
மூலக்கூறுவகை	சான்று	இருமுனைத்திருப்புமை (μ/D)	வடிவம்
AB	HF	1.78	நேர்
	HCl	1.07	நேர்
	HBr	0.79	நேர்
			நேர்

BF_3 போன்ற நாலணுமூலக்கூறில் $B-F$ பிணைப்புகள் ஒன்றுக்கொன்று 120° இல் இருப்பினும், நிகர இருமுனைத்திருப்புமை சுழியமாகிறது; ஏனெனில், ஏதாவது இரண்டு பிணைப்புகளின் விளைவுமம் மூன்றாவதற்கு சமமாகவும் எதிர்த்திசையிலும் இருப்பதால் மூன்று பிணைப்புகளின் விளைவுமம் சுழியமாகிறது.



BF_3 மூலக்கூறு; (அ) பிணைப்பிருமுனைகளின் குறிப்பீடு; (ஆ) மொத்த இருமுனைத்திருப்புமை

NH_3 , NF_3 ஆகிய மூலக்கூறுகளின் ஆர்வமான கதையை கருதுவோம். இரண்டு மூலக்கூறுகளும் பிரமிடு வடிவமானவை; நைற்றசவணுவில் ஒரு எதிர்மின்னித்தனிச்சோடி இருக்கிறது. புளோரின் நைற்றசனைவிட அதிக மின்னெதிர்மையானது எனினும், NH_3 இன் விளைவு இருமுனைத்திருப்புமை ($4.90 \times 10^{-30} C m$); இது NF_3 இனுடையதைவிட ($0.8 \times 10^{-30} C m$ ஐவிட) அதிகம். இது எதனாலென்றால், NH_3 இல் தனிச்சோடியால் ஏற்படும் பரிதிய இருமுனை மூன்று $N-H$ பிணைப்புகளின் இருமுனைத்திருப்புமைகளின் விளைவுமத்தின் திசையிலே இருக்கிறது; ஆனால், NF_3 இல் பரிதிய இருமுனை $N-F$ பிணைப்பிருமுனைகளின் விளைவுமத்தின் எதிர்த்திசையில் இருக்கிறது. தனிச்சோடியின் பரிதிய இருமுனை $N-F$ பிணைப்புத்திருப்புமைகளின் விளைவும விளைவை குறைக்கிறது. இதன் விளைவு கீழ்க்காட்டியவாறு NF_3 இன் குறைந்த இருமுனைத்திருப்புமை.



NH_3 இல் விளைவு இருமுனைத்திருப்புமை $4.90 \times 10^{-30} C m$; NF_3 இல் $0.80 \times 10^{-30} C m$

	HI	0.38	நேர்
	H_2	0	
AB_2	H_2O	1.85	வளைவு
	H_2S	0.95	வளைவு
	CO_2	0	நேர்
AB_3	NH_3	1.47	முக்கோண இருபிரமிடு
	NF_3	0.23	முக்கோண இருபிரமிடு
	BF_3	0	முக்கோணத்தளம்
AB_4	CH_4	0	நான்முகி
	$CHCl_3$	1.04	நான்முகி
	CCl_4	0	நான்முகி

சில மூலக்கூறுகளின் இருமுனைத்திருப்புமைகளை அட்டவணை 4.5 காட்டுகிறது.

எல்லா உடன்பிணைப்புகளிலும் சற்று அயனித்தன்மை இருப்பதுபோலவே, அயனிப்பிணைப்புகளிலும் சற்று உடன்பிணைவுமத்தன்மை இருக்கிறது. அயனிப்பிணைப்புகளின் உடன்பிணைவுமையை கீழ்க்காணும் விதிகளின்மூலம் பயான்சு உரையளித்தார்.

- நேரயனியின் அளவு சிறிதாகவோ எதிரயனியின் அளவு பெரிதாகவோ இருக்கும்போது அயனிப்பிணைப்பின் உடன்பிணைவுமத்தன்மை அதிகம்.
- நேரயனியின் மின்மம் அதிகமாயிருக்கும் போது அயனிப்பிணைப்பின் உடன்பிணைவுமத்தன்மை அதிகம்.
- ஒரே அளவும் மின்மமுள்ள நேரயனிகளுக்கு, இடைமாழைகளில் பொதுவாக காணப்படும் $(n-1)d^nns^0$ என்ற எதிர்மின்னியமைவடிவமுள்ள அயனி காரமாழைகளிலும் காரமண்மாழைகளிலும் பொதுவாக காணப்படும் ns^2np^6 என்ற மந்தவளிம அமைவடிவமுள்ள அயனியைவிட அதிக முனையுறக்கூடியது. நேரயனி எதிரயனியை முனையுறச்செய்து, எதிர்மின்னிகளின் மின்மத்தை தன்பக்கம் இழுத்து, அவற்றுக்கிடையிலுள்ள மின்மத்தை அதிகரிக்கிறது. அணுக்கருக்களுக்கிடையில் இதுபோன்ற மின்ம அதிகரிப்பே உடன்பிணைப்பு ஏற்படக்காரணமானது. இவ்வாறு அயனிப்பிணைப்பு உடன்பிணைப்புத் தன்மையை பெறுகிறது. நேரயனியின் முனையுறுத்துமை, எதிரயனியின் முனையுறுமை, எதிரயனியின் பிறழ்ச்சியளவு (முனையுறலளவு) ஆகிய காரணிகள் அயனிப்பிணைப்பின் நூற்றுவித உடன்பிணைவுமத்தன்மையை தீர்மானிக்கின்றன.

4.4 பிணைவுமக்கூட்டின் எதிர்மின்னிச்சோடிவிலக்கற் கோட்பாடு (பிவெசோவிக் கோட்பாடு)

நூயியின் கருத்துரு மூலக்கூறுகளின் வடிவங்களை விளக்கவில்லை என்பதை ஏற்கனவே பார்த்தோம். சிடுவிக்கும் பாவலும் 1940இல் அணுக்களின் பிணைவுமக்கூட்டிலுள்ள எதிர்மின்னிச்சோடிகளின் விலக்கலிடைவினைகளின் அடிப்படையில் ஒரு எளிய கோட்பாட்டை முன்வைத்தனர். பிறகு இதை 1957இல் நைகோமும் கில்லெசுப்பியும் மேலும் வளராக்கி மேம்படுத்தினர். இந்த கோட்பாடு பிணைவும மூலக்கூறுகளின் வடிவங்களை முன்னறிய ஒரு எளிய செய்முறையை தருகிறது.

பிவெசோவிக் கோட்பாட்டின் முதன்மையான உரைகோள்கள் பின்வறுமாறு:

- ஒரு மூலக்கூறின் வடிவம் மையவணுவைச் சுற்றியுள்ள பிணைவுமக்கூட்டெதிர்மின்னிகளின் (பிணைந்தவையும் பிணையாதவையும்) எண்ணிக்கையை சார்ந்திருக்கிறது.
- பிணைவுமக்கூட்டிலுள்ள எதிர்மின்னிச்சோடிகள் தங்கள் எதிர்மின்மத்தால் ஒன்றை யொன்று விலக்குகின்றன.
- இவ்வாறான விலக்கல்விசையால் எதிர்மின்னிச்சோடிகள் தங்களுக்கிடையான தொலைவுகள் மீப்பெருமமாகும்வகையில் வெளியில் திசையமைகின்றன.
- பிணைவுமக்கூட்டை ஒரு கோளமாக கொண்டால், எதிர்மின்னிச்சோடிகள் அந்த கோளத்தின் பரப்பில் ஒன்றுக்கொன்று மீயதிகத்தொலைவுகளில் பரவிக்கொள்கின்றன.
- பன்மப்பிணைப்புகளை ஒற்றைப்பிணைப்பைப்போலவே கையாள்கிறோம்; பன்மப்பிணைப்பிலுள்ள இரண்டோ மூன்றோவான

எதிர்மின்னிச்சோடிகளை ஒரு பெருந்திரளாக கருதுகிறோம்.

- ஒன்றுக்கு மேற்பட்ட ஒத்தலைவுக்கட்டமைப்புகள் ஒரு மூலக்கூற்றை குறிப்பிடும் போது, இவ்வாறான எந்தவொரு கட்டமைப்புக்கும் பிவெசோவிக் கோட்பாடு பயனாகிறது.

எதிர்மின்னிச்சோடிகளின் விலக்கலிடைவினைகள் கீழ்க்காணும் முறைகளில் குறைகின்றன:

- > தனிச்சோடிக்கும் தனிச்சோடிக்குமிடையில்
- > தனிச்சோடிக்கும் பிணைச்சோடிக்குமிடையில்
- > பிணைச்சோடிக்கும் பிணைச்சோடிக்குமிடையில்

நைகோமும் கில்லெசுப்பியும் (1957) தனிச்சோடியெதிர்மின்னிகளுக்கும் பிணைப்புச்சோடிகளுக்குமிடையான முதன்மையான வேறுபாடுகளை விளக்குவதன்மூலம் பிவெசோவியொப்புருவை மேம்படுத்தினர். தனிச்சோடியெதிர்மின்னிகள் மையவணுவில் அருகிடமாயிருக்கின்றன; ஒவ்வொரு பிணைப்புண்ட எதிர்மின்னிச்சோடியையும் இரண்டு அணுக்கள் பகிர்கின்றன. இதன்விளைவாக, பிணைப்புச்சோடிகளைவிட தனிச்சோடிகள் அதிக இடத்தை எடுத்துக்கொள்கின்றன. இதனால் தனிச்சோடிக்கும் பிணைப்புச்சோடிக்குமுள்ள விலக்கலையும்விட தனிச்சோடிக்கும் தனிச்சோடிக்குமுள்ள விலக்கல் அதிகமாகிறது. இந்த விலக்குவிளைவுகளால் மூலக்கூறுகளின் வடிவங்களும் பிணைப்புக்கோணங்களும் நல்லியல்பான மதிப்புகளிலிருந்து மாறுபடுகின்றன.

மூலக்கூறுகளின் வடிவங்களை பிவெசோவிக் கோட்பாட்டின் உதவியால் முன்னறிய, மூலக்கூறுகளை

(அ) மைய அணுவில் தனிச்சோடிகள் இல்லாதவை

(ஆ) மைய அணுவில் ஒன்றோ பலவோவான தனிச்சோடிகள் உள்ளவை

என்ற இரண்டு வகைகளாக பிரித்துக்கொள்வது வசதியாகிறது.

தனிச்சோடிகள் இல்லாத A என்ற மையவணுவைச்சுற்றி எதிர்மின்னிகள் அடுக்கமுறுவதை

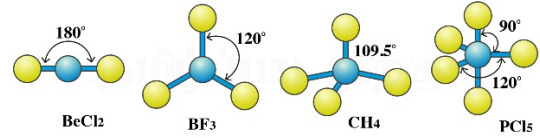
அட்டவணை 4.6 காட்டுகிறது.

மையவணுவைச்சுற்றி தனிச்சோடிகள் உள்ள சில எளிய மூலக்கூறுகளுக்கும் அயனிகளுக்கும் வடிவங்களை

அட்டவணை 4.7 காட்டுகிறது.

மூலக்கூறுகளின் வடிவங்கள் பிறழ்ச்சியறுவதன் காரணங்களை அட்டவணை 4.8 காட்டுகிறது.

அட்டவணை 4.6இல் காட்டியபடி, AB_2 , AB_3 , AB_4 , AB_5 , AB_6 வகையான மூலக்கூறுகளில், மையவணுவான A யைச்சுற்றி B யணுக்களும் எதிர்மின்னிச்சோடிகளும் முறையே நேரியம், முக்கோணத்தளம், நான்முகி, முக்கோண விருபிரமிடு, எண்முகி ஆகிய வடிவங்களில் அடுக்கமுறுகின்றன. இவ்வாறான அடுக்கங்களை BCL_2 (AB_2), BF_3 (AB_3), CH_4 (AB_4), PCl_5 (AB_5) ஆகிய மூலக்கூறுகளில் காணலாம். இவற்றின் பந்துக்குச்சியொப்புருக்கள் பின்வருமாறு:


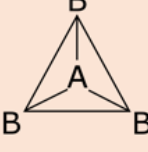
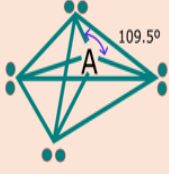
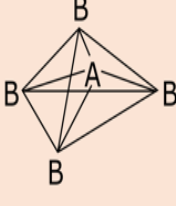
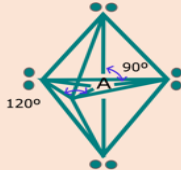
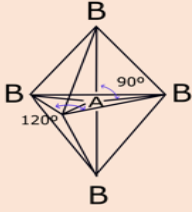

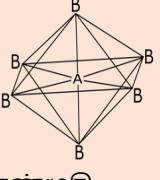


படம் 4.6 மையவணுவில் தனிச்சோடி இல்லாத சில மூலக்கூறுகளின் வடிவங்கள்

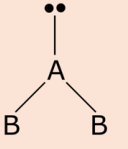
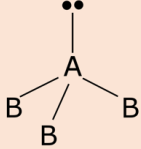
பிவெசோவிக் கோட்பாடு பெரும் எண்ணிக்கையிலான மூலக்கூறுகளின் வடிவங்களை, முக்கியமாக p க்கட்டத்தனிமங்களின் மூலக்கூறு வடிவங்களை, சரியாக முன்னறிகிறது. சாத்தியமான கட்டமைப்புகளின் ஆற்றல்வேறுபாடுகள் மிகச்சிறியனவாக இருக்கும்போதும் வடிவங்களை தீர்மானிப்பதில் இது நன்கு வெற்றியடைகிறது. எனினும் இதன் கோட்பாட்டடிப்படை இன்னும் ஐயத்துக்குரியதாகவே இருக்கிறது.

அட்டவணை 4.6 மையவணுவில் தனிச்சோடியெதிர்மின்னிகள் இல்லாத சில மூலக்கூறுகளின் வடிவங்கள்

எதிர்மின்னிச்சோடிகளின் எண்ணிக்கை	எதிர்மின்னிச்சோடிகளின் அடுக்கம்	மூலக்கூறின் வடிவம்	சான்றுகள்
2	<p>நேரியம்</p>	$B - A - B$ நேரியம்	$BeCl_2, HgCl_2$

3	 <p>முக்கோணச்சமத்தளம்</p>	 <p>முக்கோணச்சமத்தளம்</p>	BF_3
4	 <p>நான்முகி</p>	 <p>நான்முகி</p>	CH_4, NH_4^+
5	 <p>முக்கோணவிருபிரமிடு</p>	 <p>முக்கோணவிருபிரமிடு</p>	PCl_5
6	 <p>எண்முகி</p>	 <p>எண்முகி</p>	SF_6

அட்டவணை 4.7 மையவணுவில் தனிச்சோடியெதிர்மின்னிகள் உள்ள சில எளிய மூலக்கூறுகளுக்கும் அயனிகளுக்கும்மான வடிவங்கள் (வடிவியல்கள்)

மூலக்கூறு வகை	பிணைசோடிகளின் எண்ணிக்கை	தனிச் சோடிகளின் எண்ணிக்கை	எதிர்மின்னிச் சோடிகளின் அடுக்கம்	வடிவம்	சான்றுகள்
AB_2E	2	1		முறிவு	SO_2, O_3
AB_3E	3	1		முக்கோணப் பிரமிடு	NH_3

AB_3E_2	2	2		முறிவு	H_2O
AB_4E	4	1		ஊசற்கட்டை	SF_4
AB_3E_2	3	2		T-வடிவம்	ClF_3
AB_5E	5	1		சதுரப் பிரமிடு	BrF_5
AB_4E_2	4	2		சதுரத் தளம்	XeF_4

அட்டவணை 4.8 பிணைப்புச்சோடிகளும் தனிச்சோடிகளும் உள்ள மூலக்கூறுகளின் வடிவங்கள்

மூலக்கூறு வகை	உடன்பிணைப் பெண்ணிக்கை	தனிச்சோடி எண்ணிக்கை	எதிர்மின்னி யமைப்பு	வடிவம்	வடிவத்துக்கான காரணம்
AB_2E	4	1		முறிவு	இரண்டு பிணைப்புச்சோடிகளும் (பி) ஒரு தனிச்சோடியும் (த) சமப்பக்க முக்கோணமாக இருப்பதை எதிர்பார்ப்போம். தபிவிலக்கல் பிபிவிலக்கலைவிட வலிமையானதால் பிணைப்புக்கோணம் 120° க்குப்பதிலாக 119.5° யாக உள்ளது.
AB_3E	3	1		முக்கோணப்பிரமிடு	தவ்வுக்குப்பதிலாக பி இருந்தால் நான்முகியாயிருக்கும். தபிவிலக்கல் பிபிவிலக்கலைவிட அதிகமானதால், பிணைப்புக்கோணங்கள் 109.5° க்குப்பதிலாக 107° ஆகின்றன.

AB_2E_2	2	2		முறிவு	எல்லாம் பியாயிருந்தால் நான்முகியாயிருக்கும். இரண்டு தக்கள் இருப்பதால் பிறழ்நான்முகியாகிறது. காரணம் ததவிலக்கல் தபவிலக்களைவிடவும் தபவிலக்கம் பபவிலக்களைவிடவும் அதிகமானதும். இதனால் பிணைப்புக்கோணம் 109.5° க்குப்பதிலாக 104.5° ஆகிறது.
AB_4E	4	1		ஊசற் கட்டை (அதிக நிலைப்புமை)	(அ)வில் அச்சிய த இருப்பதால், மூன்று தபி விலக்கல்கள் 90° யில் உள்ளன. (ஆ)வில் நடுக்கோட்டு த இருப்பதால் இரண்டு தபிவிலக்கல்கள் உள்ளன. எனவே, (ஆ) அதிக நிலைப்புள்ளது. (ஆ)வின் வடிவத்தை பிறழ்நான்முகி, மடிந்த சதுரம், ஊசற்கட்டை ஆகிய பெயர்களால் அழைக்கிறோம்.
AB_3E_2	3	2		Tவடிவம்	(அ)வில் தனிச்சோடிகள் நடுக்கோட்டு இடநிலையில் இருப்பதால், அவை அச்சிய இடநிலையில் இருக்கும் மற்றவற்றின் ஒப்பீட்டில் தபிவிலக்கல் குறைவு. எனவே (அ)விலுள்ள Tவடிவக்கட்டமைப்பு மீநிலைப்பானது.

4.5 உடன்பிணைப்புக்கோட்பாடு

நூயியின் அணுகுமுறை மூலக்கூறுகளின் கட்டமைப்புகளை எழுத உதவுகிறது; ஆனால் வேதிப்பிணைப்பு உண்டாவதை விளக்கவில்லை; H_2 , F_2 போன்ற மூலக்கூறுகளில் அணுக்கள் எதிர்மின்னிச்சோடிகளை பகிர்வதன் மூலம் உடன்பிணைப்பு உண்டாகிறதெனினும், அவற்றிடையில் பிணைப்புப்பிரிகையின் அகவெப்பங்களிலும் (முறையே $435.8 \text{ kJ mol}^{-1}$, 155 kJ mol^{-1}) பிணைப்பு நீளங்களிலும் (முறையே 74 pm , 144 pm) வேறுபாடுகள் இருப்பதை விளக்கவில்லை. பலவணுமூலக்கூறு

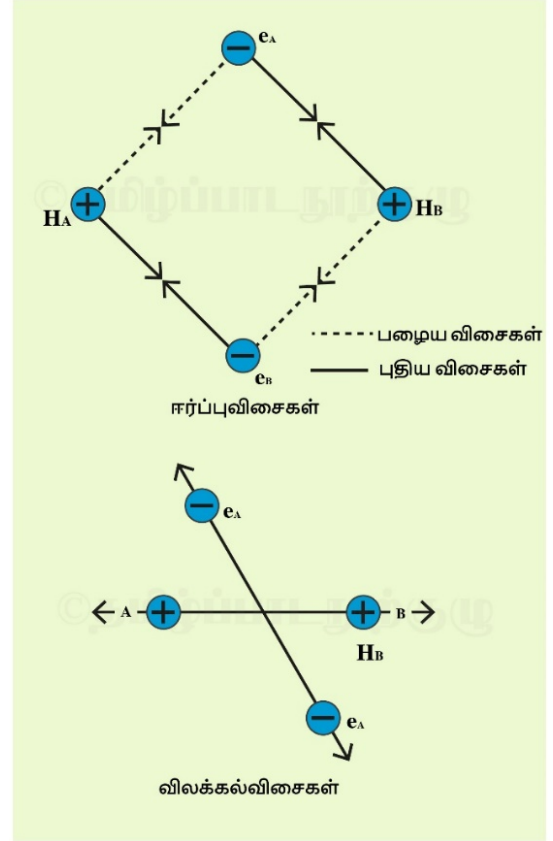
களின் வடிவங்களைப்பற்றிய தகவலையும் தரவில்லை.

அதைப்போல், பிவெசோவிக் கோட்பாடு எளிய மூலக்கூறுகளின் வடிவங்களை தருகிறது; ஆனால் அதை கோட்பாட்டடிப்படையில் விளக்கவில்லை. அதன் பயன்பாடு குறுகிய செல்வரம்புள்ளது. இந்த குறைபாடுகளை புறங்காண, துணுக்கவெந்திரவியக்கொள்கைகளின் அடிப்படையிலான இரண்டு கோட்பாடுகள் அறிமுகமாயின. இவை பிணைவுமப்பிணைப்புக்கோட்பாடும் மூலக்கூறுபரிதியக்கோட்பாடும் (பிபிக்கோட்பாடும், மூபக்கோட்பாடும்).

ஐடுலரும் இலாண்டனும் 1927இல் பிணைவுமப்பிணைப்புக்கோட்பாட்டை அறிமுகமாக்க

கிணார்கள்; பிறகு அதை பாலிங்கும் மற்றவர்களும் மேலும் வளராக்கினார்கள். பிபிக்கோட்பாட்டைப்பற்றிய உரையாடல் அணுப்பரிதியங்கள், தனிமங்களின் எதிர்மின்னியமைவுடிகள், அணுப்பரிதியங்கள் மேற்கவிதல், அணுப்பரிதியங்கள் கலப்பினமாதல், மேலமைவின் கொள்கைகள், மாறுபாட்டுக்கோட்பாடு ஆகியவற்றைப்பற்றிய அறிவின் அடிப்படையிலானது. உடன்பிணைப்புக்கோட்பாட்டின் இறுக்கமான உரையாடல் இந்த நூலின் நோக்கவீச்சுக்கு அப்பாற்பட்டது. எனவே, நம் வசதிக்காக, கணிதமில்லாத பண்பியவகையில் உடன்பிணைப்புக்கோட்பாட்டை உரையாற்றுவோம். எல்லாவற்றிலும் எளிமையான ஐதரச மூலக்கூறு உருவாவதை கருதுவோம்.

A, B என்று குறித்த இரண்டு ஐதரசவணுக்கள் ஒன்றையொன்று அணுகுவதை கருதுவோம். இவற்றின் அணுக்கருக்களை முறையே N_A, N_B என்றும் எதிர்மின்னிகளை e_A, e_B என்றும் குறிப்போம். இரண்டு அணுக்களும் வெகு தொலைவில் இருக்கும்போது அவற்றிடையில் இடைவினை இல்லை. அவை ஒன்றையொன்று அணுகும்போது புதிய ஈர்ப்புவிசைகளும் விலக்கல்விசைகளும் செயலாற்றத்தொடங்குகின்றன. இந்த அமைப்பிலுள்ள மொத்த விசைகள் பின்வறுமாறு.



படம் 4.7 H_2 மூலக்கூறு உண்டாகும்போது ஏற்படும் ஈர்ப்புவிசைகளும் விலக்கல்விசைகளும்

ஈர்ப்புவிசைகள்

(அ) ஒரு அணுவின் அணுக்கருவுக்கும் அதன் எதிர்மின்னிக்குமிடையான ஈர்ப்பு; அதாவது $N_A - e_A, N_B - e_B$

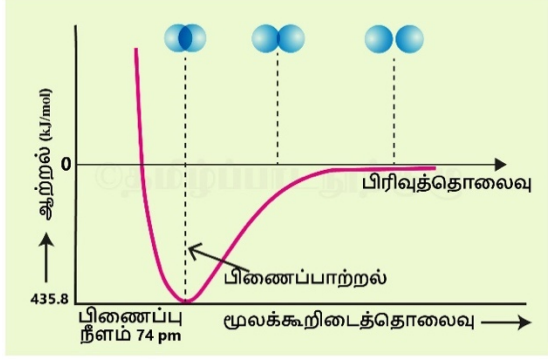
(ஆ) ஒரு அணுவின் அணுக்கருவுக்கும் மற்றதன் எதிர்மின்னிக்குமிடையான ஈர்ப்பு; அதாவது $N_A - e_B, N_B - e_A$

விலக்கல்விசைகள்

(இ) இரண்டு அணுக்களின் எதிர்மின்னிகள் $e_A - e_B$

(ஈ) இரண்டு அணுக்களின் அணுக்கருக்கள் $N_A - N_B$

ஈர்ப்புவிசைகள் இரண்டு அணுக்களையும் அருகில் வரச்செய்கின்றன; விலக்கல்விசைகள் அவற்றை பிரித்துத்தள்ளுகின்றன (படம் 4.7). இவற்றுள் (அ) மட்டுமே எப்போதும் இருப்பது. மற்றவை அணுக்கள் ஒன்றையொன்று அணுகும்போது ஏற்படும் புதிய விசைகள்.

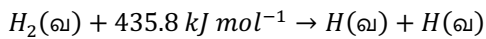


படம் 4.8 H_2 மூலக்கூறு உருவாதலின் இயன்மவாற்றல்வளைவரையை H அணுக்களின்

அணுக்கருவிடைத்தொலைவின் சார்பனாக காண்கிறோம். வளைவரையின் மீச்சிறுமம் H_2 மூலக்கூறின் மீநிலைப்பான நிலைக்கு நிகரானது.

வெகுதொலைவிலிருந்து அணுக்கள் அணுகும்போது புதிய ஈர்ப்புவிசைகள் புதிய விலக்கல்விசைகளைவிட அதிகமாயிருப்பதாக துணுக்கவெந்திரவியக்கணக்கீடுகள் காட்டுகின்றன. இதன்விளைவாக, அணுக்கள் அணுகுவது தொடர்ந்து இயன்மவாற்றல் குறைகிறது. ஆனால் அணுக்களிடையான தொலைவு குறையும்போது விலக்கல்விசை அதிகரிப்பதால், இறுதியில் அணுக்களிடையான தொலைவு 74 pm ஐ அடையும்போது விலக்கல்விசைகள் ஈர்ப்புவிசைகளுக்கு ஈடாகி ஆற்றல் மீச்சிறுமமாகிறது. அணுக்கள் இதைவிட அருகில் வரும்போது விலக்கல்விசைகள் மேலோங்கி ஆற்றல் மீண்டும் அதிகரிக்கத்தொடங்குகிறது. எனவே 74 pm தொலைவில் ஒரு நிலைப்பான ஐதரச மூலக்கூறு உருவாகிறது. இதையே ஐதரசவணுக்கள் பிணைப்புறுவதாக நாம் சொல்கிறோம்.

இரண்டு ஐதரசவணுக்களிடையில் பிணைப்பு ஏற்படும்போது ஆற்றல் வெளியிடப்படுவதால் ஐதரசமூலக்கூறு தனித்த ஐதரசவணுக்களைவிட அதிக நிலைப்பானது. இவ்வாறு வெளியாகும் ஆற்றலை பிணைப்பகவெப்பம் (பிணைப்பின் அகவெப்பம்) என்கிறோம். இது படம் 4.8இல் காட்டிய வளைவரையின் மீச்சிறுமத்துக்கு நிகரானது. இதன் மறுபக்கமாக, ஒரு மோல் ஐதரச மூலக்கூறை பிரிகையுறச் செய்ய $435.8 \text{ kJ mol}^{-1}$ ஆற்றல் தேவையாகிறது.



4.5.1 பரிதியமேற்கவிதல் என்ற கருத்துரு

ஐதரசமூலக்கூறின் உருவாக்கத்தில், இரண்டு ஐதரசவணுக்களின் அணுப்பரிதியங்கள் ஒன்றையொன்று ஊடுருவுமளவுக்கு அணுக்கள் அருகில் வரும்போது ஒரு மீக்குறையாற்றலுள்ள நிலை இருப்பதாக மேல்

கண்டோம். இவ்வாறு அணுப்பரிதியங்கள் ஓரளவு ஊடுருவுவதை அணுப்பரிதியங்களின் மேற்கவிதல் என்கிறோம். இதன் விளைவாகவே எதிர்மின்னிகளை இரண்டு அணுக்களும் பகிர்கின்றன. மேற்கவிதலின் அளவு உடன்பிணைப்பின் வலிமையை தீர்மானிக்கிறது. பொதுவாக, மேற்கவிதல் அதிகமெனில் பிணைப்பு வலுவானது. எனவே, பரிதியமேற்கவிதலுக்குருவின்படி, இரண்டு அணுக்களின் பிணைவுமப்பரிதியங்களில் எதிரெதிர்த்தற்சுழல்களுடன் உள்ள எதிர்மின்னிகள் சோடியாவதால் உடன்பிணைப்பு உண்டாகிறது.

4.5.2 பிணைப்புகளின் திசையப்பண்புகள்

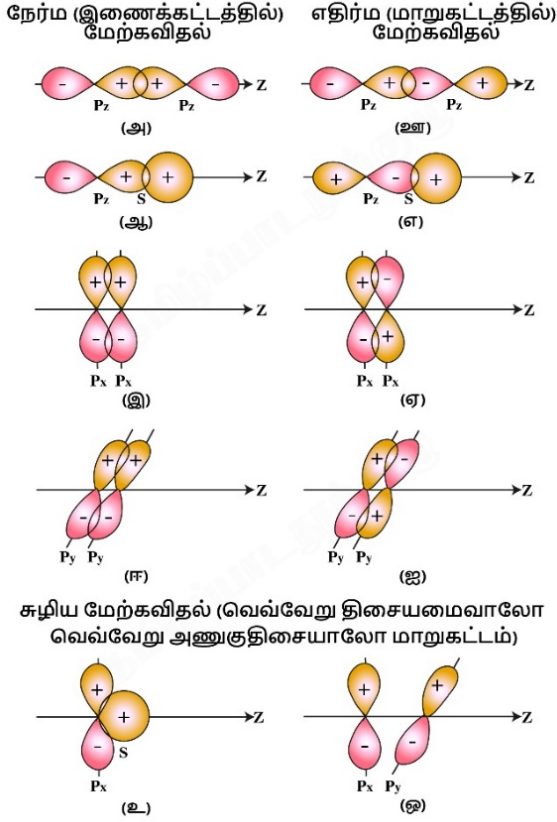
அணுப்பரிதியங்களின் மேற்கவிதல் உடன்பிணைப்பு உருவாவதை நாம் ஏற்கனவே அறிவோம். இரண்டு H அணுக்களின் $1s$ பரிதியங்களின் மேற்கவிதல் ஐதரசமூலக்கூறு உருவாகிறது.

CH_4 , NH_3 , H_2O போன்ற பலவணுமூலக்கூறுகளில், பிணைப்பு உருவாவது மட்டுமல்லாமல் மூலக்கூறுகளின் வடிவங்களும் முக்கியமானவை. சான்றாக, CH_4 மூலக்கூறு நான்முகி வடிவத்திலிருப்பதும் அதில் $H-C-H$ பிணைப்புக்கோணம் 109.5° யாக இருப்பதும் ஏன்? NH_3 மூலக்கூறு பிரமிடுவடிவத்திலிருப்பது ஏன்?

உடன்பிணைப்புக்கோட்பாடு CH_4 , NH_3 , H_2O போன்ற பலவணுமூலக்கூறுகளின் வடிவங்களையும் பிணைப்புகள் உருவாவதையும் அவற்றின் திசையப்பண்புகளையும் விளக்க அணுப்பரிதியங்களின் மேற்கவிதலையும் கலப்பினமாதலையும் பயன்படுத்துகிறது.

4.5.3 அணுப்பரிதியங்களின் மேற்கவிதல்

இரண்டு அணுக்களின் பரிதியங்கள் அருகில் வந்து பிணைப்பை உண்டாக்கும்போது, வெளியில் பரிதிய அலைச்சார்பன்களின் குறியையும் வீச்சகலத்தையும் திசையமைவையும் பொறுத்து (படம் 4.9) அவற்றின் மேற்கவிதல் நேர்மமாகவோ, எதிர்மமாகவோ சுழியமாகவோ இருக்கலாம்.



மேற்கவிதலே உடன்பிணைப்பு உருவாவதன் முக்கியமான முடிவளவையாக செயலாற்றுவது ஒப்பீரணுமூலக்கூறுகள், வேற்றீரணுமூலக்கூறுகள், பலவணுமூலக்கூறுகள் ஆகிய எல்லாவற்றுக்கும் ஒரேசீராக பயனாகிறது. CH_4 , NH_3 , H_2O ஆகிய மூலக்கூறுகள் முறையே நான்முகி, பிரமிடு, வளைந்த வடிவங்களில் இருப்பதை அறிவோம். எனவே, பிபிக்கோட்பாட்டை பயன்படுத்தி இந்த வடிவங்களை விளக்கவியலுமா என்று அறிவது ஆர்வமானது.

முதலில் CH_4 (மீத்தேன்) மூலக்கூறை கருதுவோம். கரிமத்தரைநிலையின் எதிர்மின்னியமைவடிவம் $[He] 2s^2 2p^2$. அது கிளர்ச்சிநிலையில் $[He] 2s^1 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$ ஆகிறது. இந்த கிளர்ச்சிக்குத்தேவைப்படும் ஆற்றலை கரிமப்பரிதியமும் ஆக்குசிசப்பரிதியமும் மேற்கவிதலால் உண்டாகும் ஆற்றல் ஈடுசெய்துவிடுகிறது. கரிமத்தில் ஒவ்வொன்றிலும் ஒரு சோடியுறாத எதிர்மின்னியுடன் நான்கு அணுப்பரிதியங்கள் உள்ளன. நான்கு ஐதரசவணுக்களில் ஒவ்வொன்றிலுமுள்ள $1s$ பரிதியத்திலும் ஒரு சோடியுறாத எதிர்மின்னி இருக்கிறது. கரிமவணுவின் ஒவ்வொரு பரிதியமும் ஒரு ஐதரசனின் பரிதியத்துடன் மேற்கவிந்து எதிர்மின்னிகள்

சோடியாவதன் விளைவாக நான்கு $C-H$ பிணைப்புகள் உருவாகின்றன. ஆனால், கரிமத்தின் மூன்று பரிதியங்களும் ஒன்றுக்கொன்று 90° யில் இருப்பதால் மூன்று $C-H$ பிணைப்புகளில் $H-C-H$ பிணைப்புக்கோணம் 90° யாயிருப்பதை எதிர்பார்ப்போம். கரிமத்தின் $2s$ பரிதியமும் ஐதரசனின் $1s$ பரிதியமும் கோளச்சமச்சீரானவை என்பதால் அவை எந்தத்திசையிலும் மேற்கவியலாம் எனவே, நான்காம் $C-H$ பிணைப்பின் திசையை உறுதியிடவியலாது. இந்த சித்திரம் மீத்தேனில் நாம் காணும் HCH இன் நான்முகிக்கோணமான 109.5° யுடன் பொருந்தவில்லை. இவ்வாறு, அணுப்பரிதியங்களின் மேற்கவிதல் என்ற எளிய கருத்துரு மட்டும் மீத்தேனில் பிணைப்புகளின் திசையப்பண்புகளை விளக்க போதவில்லை. இதுபோன்ற செய்முறைகளையும் விவாதங்களையும் பயன்படுத்தி NH_3 , H_2O ஆகிய மூலக்கூறுகளிலும் HNH , HOH ஆகிய கோணங்களை 90° ஆக எதிர்பார்ப்போம். ஆனால் இது NH_3 , H_2O ஆகியவற்றின் உண்மையான பிணைப்புக்கோணங்களான முறையே 107° , 104.5° என்பனவற்றுடன் முரண்படுகிறது.

4.5.4 மேற்கவிதலின் வகைகளும் உடன்பிணைப்புகளின் இயல்பும்

மேற்கவிதலின் வகையைப்பொறுத்து உடன்பிணைப்புகளை பல வகைகளாக பாகுபடுத்தலாம். அவற்றுள் முதன்மையானவை (அ) சகரப்பிணைப்பு (σ), (ஆ) பகரப்பிணைப்பு (π).

(அ) சகரப்பிணைப்பு (σ): இவ்வகையான உடன்பிணைப்புகள் பிணைவுமப்பரிதியங்கள் அணுக்கருவிடையச்சுக்கு நேராக நுனியுடன் நுனி (முட்டுமமாக) மேற்கவிதலால் உருவாகின்றன. இதை முட்டுமமேற்கவிதல் என்கிறோம். இது கீழ்க்காணும் வகையான அணுப்பரிதியச்சேர்க்கைகளின் மேற்கவிதலால் உருவாகலாம்.

- $s-s$ மேற்கவிதல்: இங்கு, கீழ் காட்டியவாறு இரண்டு பாதிநிரம்பிய s பரிதியங்கள் அணுக்கருவிடையச்சுக்குநேராக மேற்கவிதலாகின்றன.



- $s-p$ மேற்கவிதல்: இந்த வகையான மேற்கவிதல் ஓரணுவின் பாதிநிரம்பிய s பரிதியமும் மற்றோரணுவின் பாதிநிரம்பிய p பரிதியமும் மேற்கவிதலால் நிகழ்கிறது.

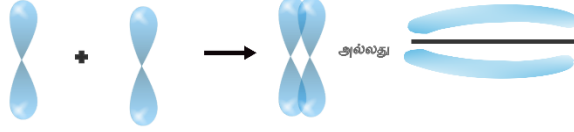


- $p-p$ மேற்கவிதல்: இது அடுத்தடுத்த இரண்டு அணுக்களின் பாதிநிரம்பிய

பரிதிவங்களின் மேற்கவிவால் ஏற்படுகிறது.



(ஆ) பகரப்பிணைப்பு (π): பகரப்பிணைப்பு உருவாவதில், அணுப்பரிதிவங்கள் தங்கள் அச்சுகள் ஒன்றுக்கொன்று இணையாகவும் அணுக்கருவிடையச்சுக்கு செங்குத்தாகவும் இருக்கும்வகையில் மேற்கவிகின்றன. பக்கவாட்டு மேற்கவிதலால் உருவாகும் பரிதிவங்களில் பங்குபெறும் அணுக்களின் தளத்துக்கு மேலும் கீழுமாக இரண்டு கோப்பைவடிவ மின்மமுகில்கள் உள்ளன.



4.5.5 சகரப்பகரப்பிணைப்புகளின் வலிமை

அடிப்படையில், பிணைப்பின் வலிமை மேற்கவிதலின் அளவைப்பொறுத்தது. பகரப்பிணைப்பைவிட சகரப்பிணைப்பில் மேற்கவிதல் அதிகளவுக்கு நிகழ்வதால் சகரப்பிணைப்பு அதிக வலிமையானது. மேலும், ஒரு மூலக்கூறில் இரண்டு அணுக்களிடையில் பன்மவிணைப்பு உருவாகும் போது, பகரப்பிணைப்பு ஒரு சகரப்பிணைப்புடன் சேர்ந்தே உருவாகிறது என்பது நோக்கத்தக்கது.

4.6 கலப்பினமாதல்

CH_4 , NH_3 , H_2O போன்ற பலவணுமூலக்கூறுகளின் வடிவங்களை விளக்க பாலிங்கு கலப்பினமாதல் என்ற கருத்துருவை அறிமுகமாக்கினார். அவரது கூற்றுப்படி, அணுப்பரிதிவங்கள் சேர்ந்து கலப்பினப்பரிதிவங்கள் என்ற சமானமான பரிதிவங்களை உருவாக்குகின்றன. இந்த கலப்பினப்பரிதிவங்கள் பிணைப்புருவாக்கத்தில் பயன்படுகின்றன. சற்றே வேறுபட்ட ஆற்றல்களுள்ள பரிதிவங்கள் ஒன்றுகலந்து தங்கள் ஆற்றல்களை மறுபரப்பி சமானமான ஆற்றல்களும் வடிவங்களுமுள்ள புதிய பரிதிவங்களை உண்டாக்குவதை கலப்பினமாதல் என்று வரையறுக்கிறோம். சான்றாக, கரிமத்தின் ஒரு $2s$ பரிதிவமும் மூன்று $2p$ பரிதிவங்களும் கலப்பினமாகும்போது நான்கு sp^3 பரிதிவங்கள் உருவாகின்றன.

கலப்பினமாதலின் முதன்மையான பண்புக்கூறுகள் பின்வருமாறு:

- கலப்பினப்பரிதிவங்களின் எண்ணிக்கை கலப்பினமாகும் பரிதிவங்களின் எண்ணிக்கைக்கு சமம்.
- கலப்பினப்பரிதிவங்கள் எப்போதும் ஆற்றலிலும் வடிவத்திலும் சமானமானவை.

- தூய அணுப்பரிதிவங்களைவிட கலப்பினப்பரிதிவங்கள் நிலைப்பான பிணைப்புகளை உருவாக்குவதில் அதிக பயன்ற்றினானவை.

- கலப்பினப்பரிதிவங்கள் எதிர்மின்னிச்சோடிகளின் விலக்கல்களை குறைத்து நிலைப்பான அடுக்கல்களில் இருப்பதற்காக வெளியில் சில முன்விருப்பத்திசைகளை நோக்கி இருக்கின்றன. எனவே, கலப்பினத்தின் வகை மூலக்கூறின் வடிவத்தை காட்டுகிறது.

கலப்பினமாதலுக்கான முக்கியமான வரைக்கட்டுகள்

- அணுவின் பிணைவுமக்கூட்டிலுள்ள பரிதிவங்கள் கலப்பினமாகின்றன.
- கலப்பினமாதலுக்குட்படும் பரிதிவங்கள் கிட்டத்தட்ட சம ஆற்றலுள்ளவையாக இருக்கவேண்டும்.
- கலப்பினமாதலின் முற்கோளாக எதிர்மின்னியுயர்த்தல் தேவையில்லை.
- பாதிநிரம்பிய பரிதிவங்களே கலப்பினமாதலில் ஈடுபடவேண்டும் என்பதில்லை. சிலநேரங்களில் பிணைவுமக்கூட்டிலுள்ள நிரம்பிய பரிதிவங்களும் கலப்பினமாதலில் பங்கேற்கின்றன.

4.6.1 கலப்பினமாதலின் வகைகள்

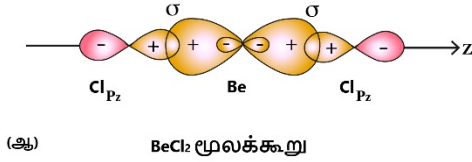
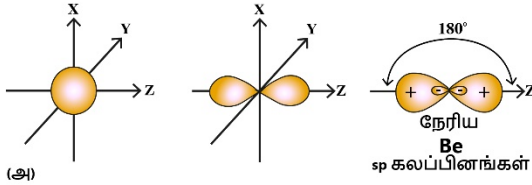
s , p , d ஆகிய பரிதிவங்கள் ஈடுபடும் கலப்பின மாதலில் பல்வேறு வகைகள் உள்ளன. கலப்பினமாதலின் வெவ்வேறு வகைகள் பின்வருமாறு:

(அ) sp கலப்பினமாதல்: இவ்வகையான கலப்பினமாதலில் ஒரு s பரிதிவமும் ஒரு p பரிதிவமும் கலந்து இரண்டு சமானமான sp பரிதிவங்களை உருவாக்குகின்றன. கலப்பினப்பரிதிவங்கள் z அச்சைநோக்கி இருக்கவேண்டுமெனில், sp கலப்பினத்துக்கு பொருத்தமான பரிதிவங்கள் s உம் p_z உம். ஒவ்வொரு sp பரிதிவத்துக்கும் 50% s தன்மையும் 50% p தன்மையும் உள்ளன. மையவணுவில் sp கலப்பினமாதலும் மையவணுவுடன் நேரடியாக இணைந்த இரண்டு அணுக்களுமுள்ள மூலக்கூறு நேரிய சமச்சீர்மையானது. இவ்வகையான கலப்பினமாதலை மூலைவிட்டக்கலப்பினமாதல் என்கிறோம்.

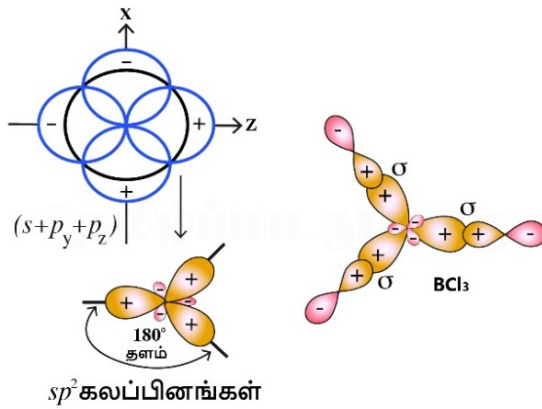
இரண்டு sp பரிதிவங்களும் z அச்சில் எதிரெதிர் திசைகளில் உள்ளன. ஒவ்வொன்றிலும் ஒரு நேர்ம மடலும் ஒரு சிறு எதிர்ம மடலும் உள்ளன. இதனால் அதிக விளைவுறு மேற்கவிதலும் வலுவான பிணைப்புகளும் கிடைக்கின்றன.

sp கலப்பினமுள்ள மூலக்கூறுகளுக்கு சான்று, $BeCl_2$: பெரிலியத்தின் தரைநிலையெதிர்மின்னியமைவடிவம் $1s^2 2s^2$. அதன் இரட்டைப்பிணைவுமையை விளக்க ஒரு $2s$ எதிர்

மின்னியை காலியாயிருக்கும் $2p$ பரிதியத்துக்கு உயர்த்திய கிளர்ச்சிநிலையை கருதவேண்டும். ஒரு $2s$ பரிதியமும் ஒரு $2p$ பரிதியமும் சேர்ந்து கலப்பினமாகி இரண்டு $2sp$ கலப்பினப் பரிதியங்களை தருகின்றன. இந்த இரண்டு sp பரிதியங்களும் எதிரெதிர்த்திசையில் 180° கோணத்தில் அமைகின்றன. ஒவ்வொரு sp கலப்பினப்பரிதியமும் குளோரின் ஒரு $2p$ பரிதியத்துடன் அச்சுநோக்கி மேற்கவிவதால் இரண்டு சகரப்பிணைப்புகள் உருவாகின்றன. இதை படம் 4.10 காட்டுகிறது.



படம் 4.10 (அ) s, p பரிதியங்களிலிருந்து sp கலப்பினங்கள் உருவாதல்; (ஆ) நேரிய $BeCl_2$ உருவாதல்



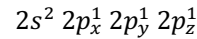
படம் 4.11 sp^2 பரிதியங்களும் $BeCl_3$ மூலக்கூறும் உருவாதல்

(ஆ) sp^2 கலப்பினமாதல்: இந்த கலப்பினமாதலில் ஒரு s பரிதியமும் இரண்டு p பரிதியங்களும் ஈடுபட்டு மூன்று சமமான sp^2 கலப்பினப் பரிதியங்களை விளைவிக்கின்றன. சான்றாக, $BeCl_3$ மூலக்கூறில், மையத்திலுள்ள போரானணுவின் தரைநிலையெதிர்த்திசையில் $1s^2 2s^2 2p^1$. கிளர்ச்சிநிலையில் ஒரு $2s$ எதிர்மின்னி காலியாயிருக்கும் ஒரு $2p$ பரிதியத்துக்கு

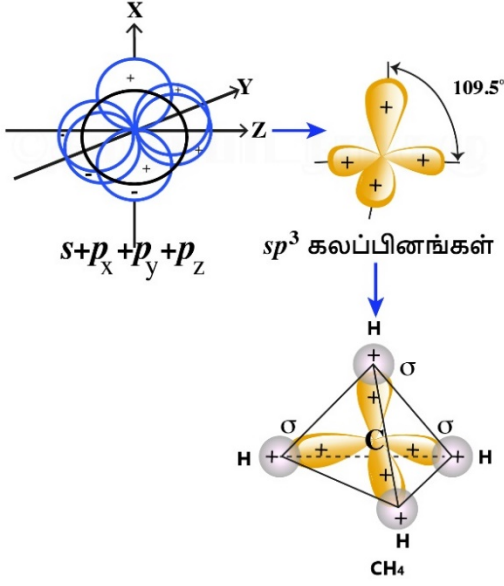
உயர்கிறது. இதனால் போரானின் இந்த நிலையில் மூன்று சோடியுறாத எதிர்மின்னிகள் உள்ளன. ஒரு $2s$, இரண்டு $2p$ ஆகிய மூன்று பரிதியங்களும் சேர்ந்து மூன்று கலப்பினப் பரிதியங்களை உருவாக்குகின்றன. இந்த மூன்று கலப்பினப்பரிதியங்களும் தளமக்கோண வடிவத்தில் அடுக்கமுற்று குளோரின்களின் $2p$ பரிதியங்களுடன் மேற்கவிந்து மூன்று $B - Cl$ பிணைப்புகளை உருவாக்குகின்றன. எனவே, $BeCl_3$ இன் (படம் 4.11) வடிவம் தளமக்கோணமாகவும் $ClBeCl$ பிணைப்புக்கோணம் 120° ஆகவும் உள்ளன.

(இ) sp^3 கலப்பினமாதல்: இவ்விதமான கலப்பினமாதலை விளக்க CH_4 ஐ சான்றாக எடுப்போம். இங்கு பிணைவுமக்கூட்டிலுள்ள ஒரு s பரிதியமும் மூன்று p பரிதியங்களும் சேர்ந்து சமமான ஆற்றலும் வடிவமுமுள்ள நான்கு sp^3 கலப்பினப்பரிதியங்களை உருவாக்குகின்றன. ஒவ்வொரு sp^3 கலப்பினப்பரிதியத்திலும் 25% s தன்மையும் 75% p தன்மையும் உள்ளன. இவ்வாறு உருவான நான்கு sp^3 பரிதியங்களும் நான்முகியின் நான்கு மூலைகளையும் நோக்கி திசையமைகின்றன. படம் 4.12இல் காட்டியபடி, இந்த பரிதியங்களிடையான கோணம் 109.5° .

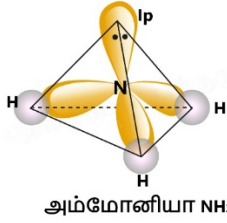
NH_3, H_2O ஆகிய மூலக்கூறுகளின் கட்டமைப்புகளையும் sp^3 கலப்பினத்தின் உதவியால் விளக்கலாம். அம்மோனியாவின் நைற்றசனில் பிணைவுமக்கூட்டின் (வெளிக்கூட்டின்) தரைநிலையெதிர்த்திசையில்



இங்கு மூன்று சோடியுறாத p எதிர்மின்னிகளும் இரண்டு சோடியுற்ற s எதிர்மின்னிகளும் உள்ளன. இந்த பரிதியங்கள் கலப்பதால் உருவாகும் நான்கு sp^3 கலப்பினப்பரிதியங்களுள் ஒன்றில் ஒரு சோடி எதிர்மின்னியும் மற்ற மூன்றில் ஒவ்வொன்றிலும் ஒரு சோடியுறாத எதிர்மின்னியும் இருக்கின்றன. ஒற்றையெதிர்மின்னியுள்ள மூன்று கலப்பினப்பரிதியங்களும் மூன்று ஐதரசன்களின் $1s$ பரிதியங்களுடன் மேற்கவிந்து மூன்று சகரப்பிணைப்புகளை உருவாக்குகின்றன. தனிச்சோடிக்கும் பிணைப்புச்சோடிக்குமுள்ள விலக்கல் இரண்டு பிணைப்புச்சோடிகளுக்குமுள்ள விலக்கலைவிட அதிகம் என்பதை அறிவோம். இவ்வாறு மூலக்கூறு பிறழ்ச்சியடைந்து HNH பிணைப்புக்கோணம் நான்முகிமதிப்பான 109.5° இலிருந்து 107° க்கு குறைகிறது. இந்த மூலக்கூறின் வடிவம் படம் 4.13இல் காட்டியபடி பிரமிடு.

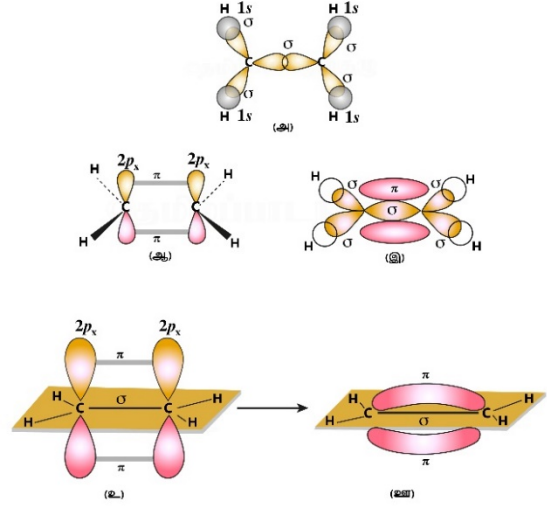


படம் 4.12 கரிமத்தின் s, p_x, p_y, p_z ஆகிய அணுப்பரிதியங்கள் சேர்வதால் sp^3 கலப்பினங்கள் உருவாதலும் CH_4 மூலக்கூறு உருவாதலும்



படம் 4.13 NH_3 மூலக்கூறு உருவாதல்

H_2O மூலக்கூறில் நான்கு ஆக்குசிசப் பரிதியங்கள் (ஒரு $2s$, மூன்று $2p$) sp^3 கலப்பினமாதலுக்குள்ளாகி நான்கு sp^3 கலப்பினப்பரிதியங்களை உருவாக்குகின்றன. இவற்றுள் இரண்டு பரிதியங்களில் இரண்டு சோடிகளும் மற்ற இரண்டில் இரண்டு சோடியுறாத எதிர்மின்னிகளும் இருக்கின்றன. இந்த நான்கு பரிதியங்களும் நான்முகிவடிவிலுள்ளன. சோடியுறாத எதிர்மின்னியுள்ள பரிதியங்கள் ஐதரச $1s$ பரிதியங்களுடன் மேற்கவிந்து சகரப்பிணைப்புகளை உருவாக்கியபின், நான்முகியின் இரண்டு மூலைகளில் தனிச்சோடிகளும் மற்ற இரண்டு மூலைகளில் ஐதரசவணுக்களும் இருக்கின்றன. இங்கும் தனிச்சோடிகளால் பிணைப்புக் கோணம் 109.5° இலிருந்து 104.5° க்கு குறைகிறது. இவ்வாறு மூலக்கூறு ஒரு கவட்டை வடிவத்தை அடைகிறது (படம் 4.14); அதாவது ஒரு கோணவடிவத்தை பெறுகிறது.



படம் 4.14 H_2O மூலக்கூறு உருவாதல்

4.6.2 sp^3, sp^2, sp ஆகிய கலப்பினமாதல்களுக்கு மற்ற சான்றுகள்

C_2H_6 மூலக்கூறில் sp^3 கலப்பினமாதல்:

ஈத்தேன் மூலக்கூறில் இரண்டு கரிமவணுக்களும் sp^3 கலப்பினத்துக்குள்ளாகின்றன. ஒரு அணுவின் ஒரு கலப்பினப்பரிதியம் மற்றொரு அணுவின் பரிதியத்துடன் அச்சநோக்கி மேற்கவிந்து $sp^3 - sp^3$ சகரப்பிணைப்பை உருவாக்குகிறது; ஒவ்வொரு கரிமவணுவிலுமுள்ள மற்ற மூன்று கலப்பினப்பரிதியங்களுள் ஒவ்வொன்றும் ஒரு ஐதரசவணுவுடன் சேர்ந்து, 4.6.1(இ)ஆம் பகுதியில் சொன்னபடி, $sp^2 - s$ சகரப்பிணைப்பை உருவாக்குகின்றது. எனவே, ஈத்தேனில்

$C - C$ பிணைப்புநீளம் 154 pm ஆகவும்

$C - H$ பிணைப்புநீளம் 109 pm ஆகவும்

உள்ளன.

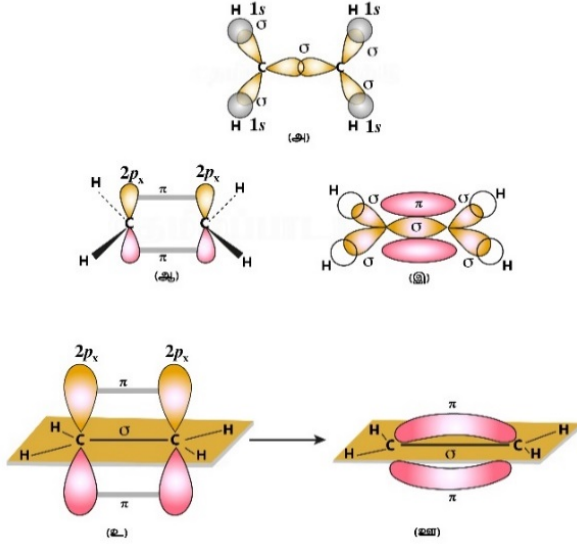
C_2H_4 இல் sp^2 கலப்பினமாதல்:

ஈத்தீனில் மூலக்கூறு உருவாவதில், கரிமத்தின் ஒரு sp^2 கலப்பினப்பரிதியம் மற்றொரு கரிமத்தின் sp^2 கலப்பினப்பரிதியத்துடன் அச்சநோக்கி மேற்கவிந்து $C - C$ சகரப்பிணைப்பை உருவாக்குகிறது. ஒவ்வொரு கரிமவணுவிலுமுள்ள மற்ற இரண்டு sp^2 பரிதியங்களும் இரண்டு ஐதரசவணுக்களுடன் $sp^2 - s$ சகரப்பிணைப்புகளை உருவாக்குகின்றன. ஒரு கரிமத்தின் கலப்பினமாகாத ($2p_x$ ஓ $2p_y$ யோ) பரிதியம் கரிமமும் ஐதரசன்களுமுள்ள தளத்துக்கு செங்குத்தாக உள்ளது. இது மற்றொரு கரிமவணுவின் கலப்பினமாகாத பரிதியத்துடன் பக்கவாட்டில் மேற்கவிந்து ஒரு வலுகுறைந்த பகரப்பிணைப்பை உருவாக்குகிறது. இந்த பிணைப்பு மூலக்கூறுதளத்தின் மேலும் கீழும் இரண்டு

சமமான எதிர்மின்னிமுகில்களாக பரவியிருக்கிறது.

இவ்வாறு, ஈத்தீன்மூலக்கூறில் கரிமங்களிடையான பிணைப்பு ஒரு $sp^2 - sp^2$ சகரப்பிணைப்பாலும் கலப்பினமாகாத p பரிதியங்களுக்கிடையான ஒரு பகரப்பிணைப்பாலும் ஆனது. இந்த பிணைப்பின் நீளம் 134 pm . $C - H$ பிணைப்பு ஒரு $sp^2 - s$ பிணைப்பு; இதன் நீளம் 108 pm . HCH பிணைப்புக்கோணம் 117.6° ; HCC பிணைப்புக்கோணம் 121° . ஈத்தீனில் சகரப்பிணைப்பும் பகரப்பிணைப்பும் உருவாவதை படம் 4.15 காட்டுகிறது.

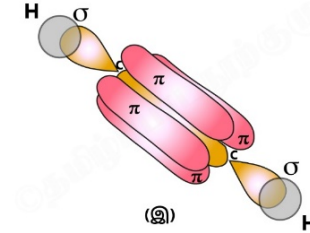
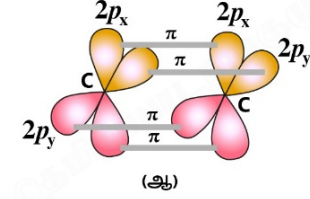
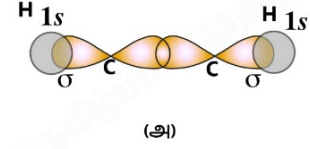
C_2H_2 இல் sp கலப்பினமாதல்: ஈத்தைனின் மூலக்கூறு உருவாவதில், ஒவ்வொரு கரிமவணுவும் sp கலப்பினமாதலுக்குள்ளாகின்றது; $2p_x$, $2p_y$ ஆகிய இரண்டு கலப்பினமாகாத பரிதியங்கள் எஞ்சுகின்றன.



படம் 4.15 ஈத்தீனில் சகரப்பிணைப்பும் பகரப்பிணைப்பும் உருவாதல்

ஒரு கரிமத்திலுள்ள ஒரு sp கலப்பினப்பரிதியம் மற்றொரு கரிமத்தின் sp கலப்பினப்பரிதியத்துடன் அச்சுநோக்கி மேற்கவிந்து ஒரு $C - C$ சகரப்பிணைப்பை உருவாக்குகிறது. மற்ற sp கலப்பினப்பரிதியங்கள் ஐதரசவணுக்களின் பாதிநிரம்பிய s பரிதியங்களுடன் அச்சுநோக்கி மேற்கவிந்து சகரப்பிணைப்புகளை உருவாக்குகின்றன. இரண்டு கரிமவணுக்களின் இரண்டு கலப்பினமாகாத p ப்பரிதியங்களும் பக்கவாட்டில் மேற்கவிந்து கரிமவணுக்களுக்கிடையில் இரண்டு பகரப்பிணைப்புகளை உருவாக்குகின்றன. ஆகவே இரண்டு கரிமவணுக்களுக்கிடையான மும்மப்பிணைப்பு ஒரு சகரப்பிணைப்பாலும் இரண்டு பகரப்பிணைப்புகளாலும் ஆனது. இதை படம் 4.16 காட்டுகிறது.

பிணைப்புகளாலும் ஆனது. இதை படம் 4.16 காட்டுகிறது.



படம் 4.16 ஈத்தைனில் சகரப்பிணைப்பும் பகரப்பிணைப்புகளும் உருவாதல்

4.6.3 d பரிதியங்கள் ஈடுபடும் தனிமங்களில் கலப்பினமாதல்

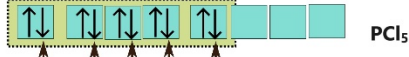
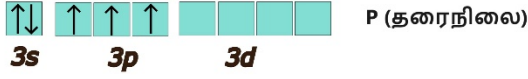
ஈரொழுங்கட்டவணையின் மூன்றாம் ஈரொழுங்கிலுள்ள தனிமங்களின் பிணைவுமக்கூடுகளில் s, p பரிதியங்களுடன் d பரிதியங்களும் உள்ளன. $3d$ பரிதியங்களின் ஆற்றல் $3s, 3p$ பரிதியங்களின் ஆற்றலுடன் ஒப்பிடக்கூடியது. $3s$ பரிதியங்களின் ஆற்றல் $4s, 4p$ பரிதியங்களுடனும் ஒப்பிடக்கூடியது. இதன் விளைவாக, $3s, 3p, 3d$ பரிதியங்களோ $3d, 4s, 4p$ பரிதியங்களோ பங்குபெறும் கலப்பினங்கள் சாத்தியமாகின்றன. ஆனால், $3p, 4s$ பரிதியங்களிடையில் ஆற்றல் வேறுபாடு குறிப்பிடத்தக்க அளவில் இருப்பதால், $3p, 3d, 4s$ ஆகியவை பங்குபெறும் கலப்பினங்கள் சாத்தியமில்லை.

s, p, d பரிதியங்கள் பங்குபெறும் முக்கியமான கலப்பின வரைதிட்டங்களை அட்டவணை 4.9இல் சுருங்கவுரைக்கிறோம்.

இரண்டு சான்றுகளையும் கீழ் காண்போம்.

(அ) PCl_5 உருவாதல் (sp^3d கலப்பினமாதல்): தரைநிலையிலும் கிளர்ச்சிநிலையிலும்

பாசுபரசின் ($Z = 15$) வெளிக்கூட்டெதிர்மின்னியமைவடிவங்கள் படத்தில் காட்டியவாறு.



↑ CI ↑ CI ↑ CI ↑ CI ↑
ஐந்து குளோரினணுக்கள் நிரப்பும் sp^3d பரிதியங்கள்

இப்போது ஒரு s , மூன்று p , ஒரு d ஆகிய ஐந்து பரிதியங்கள் கலப்பினமாதலுக்கு கிட்டுகின்றன. இவை தரும் ஐந்து sp^3d கலப்பினப்பரிதியங்கள் முக்கோணவிரும்பிடின ஐந்து மூலைகளை நோக்கி படம் 4.17இல் காட்டியபடி திசையமைகின்றன.

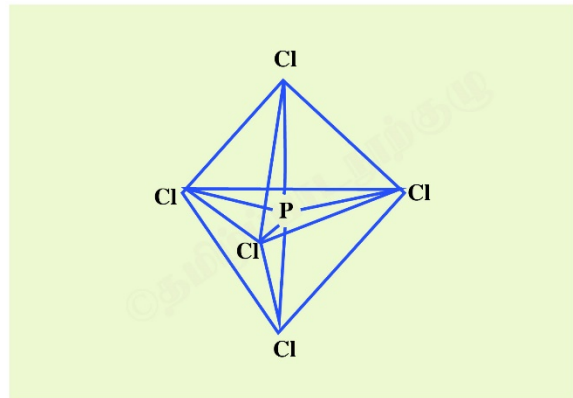
அட்டவணை 4.9 s, p, d பரிதியங்கள் பங்குபெறும் சில கலப்பினங்கள்

மூலக்கூறின் (அயனியின்) வடிவம்	கலப்பின மாதலின் வகை	அணுப்பரிதியங்கள்	சான்றுகள்
சதுரத்தளம்	dsp^2	$d + s + p(2)$	$[Ni(CN)_4]^{2-}, [Pt(Cl)_4]^{2-}$
முக்கோணவிரும்பு	sp^3d	$s + p(3) + d$	PF_5, PCl_5
சதுரநாற்கூம்பு	sp^3d^2	$s + p(3) + d(2)$	BrF_5
எண்முகி	sp^3d^2, d_2sp^3	$s + p(3) + d(2), d(2) + s + p(3)$	$SF_6, [CrF_6]^{3-}, [Co(NH_3)_6]^{3+}$

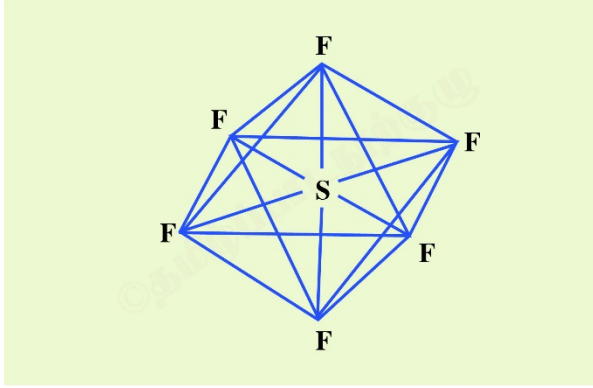
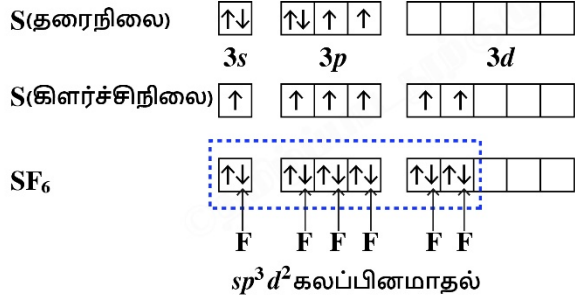
முக்கோணவிரும்பிடின எல்லாப்பிணைப்புக்கோணங்களும் சமானமல்ல என்பதை நோக்க வேண்டும். PCl_5 இல் பாசுபரசின் ஐந்து sp^3d பரிதியங்கள் குளோரினணுக்களின் ஒற்றையெதிர்மின்னியுள்ள p பரிதியங்களுடன் மேற்கவிந்து $P - Cl$ சகரப்பிணைப்புகளை உருவாக்குகின்றன. மூன்று $P - Cl$ பிணைப்புகள் 120° பிணைப்புக்கோணத்துடன் ஒரு தளத்தில் அமைகின்றன. இவற்றை நடுக்கோட்டுப் பிணைப்புகள் என்கிறோம். மற்ற இரண்டு $P - Cl$ பிணைப்புகள் ஒன்று நடுக்கோட்டுத் தளத்துக்கு மேலும் மற்றொன்று கீழுமாக தளத்துடன் 90° யில் அமைகின்றன. இவற்றை அச்சப்பிணைப்புகள் என்கிறோம். அச்சப்பிணைப்புகள் நடுக்கோட்டுப்பிணைப்புகளிலிருந்து அதிக விலக்கலுக்கு உள்ளாவதால், அவை சற்று நீளமாகவும் வலுகுறைந்தும் உள்ளன. இதனால் PCl_5 அதிக வேதிவிசையையுள்ளது.

(ஆ) SF_6 உருவாதல் (sp^3d^2 கலப்பின மாதல்): SF_6 இல் மையத்திலுள்ள கந்தகவணுவின் வெளியோட்டுத்தரைநிலையெதிர்மின்னியமைவடிவம் $3s^2 3p^4$. கிளர்ச்சிநிலையில் பிணைப்புக்கு கிட்டும் ஒரு s , மூன்று p , இரண்டு

d ஆகிய ஆறு பரிதியங்களிலும் ஒற்றையெதிர்மின்னிகள் உள்ளன. இவை கலப்பினமாகி ஒரு எண்முகியின் மூலைகளை நோக்கியுள்ள ஆறு sp^3d^2 பரிதியங்களை தருகின்றன. ஒவ்வொன்றும் ஒரு புளோரினின் ஒற்றையெதிர்மின்னியுள்ள p பரிதியத்துடன் மேற்கவிந்து ஆறு $S - F$ சகரப்பிணைப்புகளை உருவாக்குகின்றன. இவ்வாறு SF_6 மூலக்கூறு படம் 4.18இல் காட்டியபடி, ஒரு ஒழுங்கான எண்முகியின் வடிவமுள்ளது.



படம் 4.17 PCl_3 மூலக்கூறின் முக்கோணவிக்ரமிடு வடிவம்



படம் 4.18 SF_6 மூலக்கூறின் எண்முக வடிவம்

4.7 மூலக்கூறுபரிதியக் கோட்பாடு

மூலக்கூறுபரிதியக்கோட்பாட்டை (மூபக் கோட்பாட்டை) பி. உண்டும் இ. சா. மல்லிக்கனும் 1932இல் வளராக்கினர். இந்த கோட்பாட்டின் முன்னிற்கும் பண்புக்கூறுகள்:

(அ) அணுக்களின் எதிர்மின்னிகள் பல்வேறு அணுப்பரிதியங்களில் அமைவதுபோலவே மூலக்கூறுகளின் எதிர்மின்னிகள் பல்வேறு மூலக்கூறுபரிதியங்களில் அமைகின்றன.

(ஆ) ஒப்பிடத்தகு ஆற்றலும் சரியான சமச்சீர்மையும் உள்ள அணுப்பரிதியங்கள் சேர்ந்து மூலக்கூறுபரிதியங்களை உருவாக்குகின்றன.

(இ) அணுப்பரிதியத்திலுள்ள எதிர்மின்னிகள் ஒரு அணுக்கருவின் விளைவுக்கு உட்படுகின்றன; ஆனால் ஒரு மூலக்கூறுபரிதியத்திலுள்ளவை மூலக்கூறிலுள்ள அணுக்களின் எண்ணிக்கையைப்பொறுத்து ஒன்றுக்கு மேற்பட்ட அணுக்கருக்களின் விளைவுக்கு உட்படுகின்றன. இவ்வாறு அணுப்பரிதியம் ஒற்றைமையமானது; மூலக்கூறுபரிதியம் பலமையமானது.

(ஈ) உருவாகும் மூலக்கூறுபரிதியங்களின் எண்ணிக்கை பங்கேற்கும் அணுப்பரிதியங்கள்

ளின் எண்ணிக்கைக்கு சமம். இரண்டு அணுப்பரிதியங்கள் சேரும்போது இரண்டு மூலக்கூறுபரிதியங்கள் உருவாகின்றன. இவற்றுள்ளொன்றை பிணைப்புமூலக்கூறுபரிதியம் என்றும் மற்றதை பிணைப்பெதிர்மூலக்கூறுபரிதியம் என்றும் அழைக்கிறோம்.

(உ) பிணைப்புமூலக்கூறுபரிதியம் நிகரான பிணைப்பெதிர்மூலக்கூறுபரிதியத்தைவிட ஆற்றல் குறைந்ததும் அதனால் அதிக நிலைப்பானதும்.

(ஊ) ஒரு அணுவின் அணுக்கருவைச்சுற்றிய எதிர்மின்னிப்பரவலை ஒரு அணுப்பரிதியம் தருவதுபோலவே மூலக்கூறில் ஒரு அணுக்கருத் தொகுதியைச்சுற்றிய எதிர்மின்னிப்பரவலை ஒரு மூலக்கூறுபரிதியம் தருகிறது.

(எ) அணுப்பரிதியங்களைப்போலவே மூலக்கூறுபரிதியங்கள் பாலியின் தவிர்ப்புவிதிக்கும் உண்டின் விதிக்கும் உட்பட்ட கட்டுமுறைக்கொள்கையை பின்பற்றி எதிர்மின்னிகளால் நிரம்புகின்றன.

மூலக்கூறுபரிதியத்தை நாம் சுருக்கமாக மூபம் என்ற சொல்லாலும் குறிப்பிடுகிறோம்.

4.7.1 அணுப்பரிதியங்களின் நேரியச்சேர்வாக மூலக்கூறுபரிதியங்கள் (அபநேசேமூபம்)

துணுக்கவெந்திரவியலின்படி, அணுப்பரிதியத்தை ψ என்ற நிலைச்சார்பனால் குறிக்கலாம். இது சுரோடிங்கரின் சமன்பாட்டை தீர்த்துப் பெறும் எதிர்மின்னிநிலைகளை குறிக்கிறது. ஒன்றுக்கு மேற்பட்ட எதிர்மின்னிகளுள்ள அமைப்புக்கு சுரோடிங்கரின் சமன்பாட்டை தீர்க்கவியலாது என்பதால், மூலக்கூறுகளுக்கான ஒற்றையெதிர்மின்னியின் நிலைச்சார்பான மூலக்கூறுபரிதியங்களை சுரோடிங்கரின் சமன்பாட்டை நேரடியாக தீர்த்துப்பெறவியலாது. இந்த இடர்பாட்டை புறங்காண, அணுப்பரிதியங்களின் நேரியச்சேர்வு (அபநேசே) என்ற தோராய முறையை மேற்கொள்கிறோம்.

இந்த முறையை ஒப்பீரணுமூலக்கூறான ஐதரச மூலக்கூறுக்கு பயனாக்குவோம். A, B என்று குறித்த இரண்டு ஐதரசவணுக்களாலான ஐதரசமூலக்கூறை கருதுக. தரைநிலையில் ஒவ்வொரு ஐதரசவணுவின் 1sபரிதியத்திலும் ஒரு எதிர்மின்னி உள்ளது. இந்த அணுப்பரிதியங்களை முறையே ψ_A, ψ_B என்ற நிலைச்சார்பன்களால் குறிப்போம். கணிதப்படி, மூலக்கூறுபரிதியம் உருவாவதை அணுப்பரிதியங்களுக்கு நிகரான நிலைச்சார்பன்களின் நேரியச்சேர்வுகளான கூட்டலாகவோ கழித்தலாகவோ விவரிக்கலாம். அதாவது

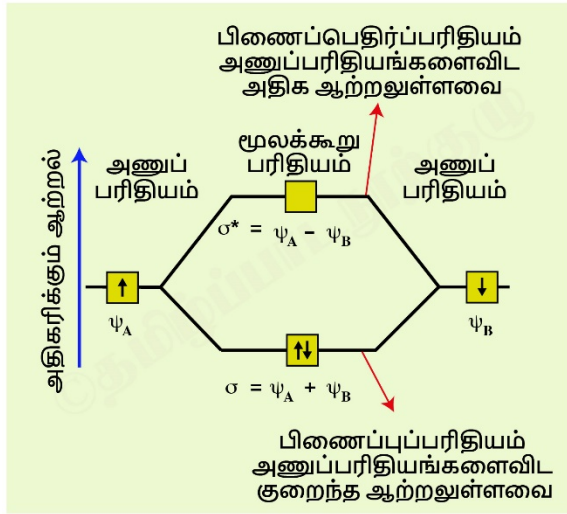
$$\psi_{\text{மூப}} = \psi_A \pm \psi_B$$

எனவே, இவ்வாறு உருவாகும் σ , σ^* என்ற இரண்டு மூலக்கூறுபரிதியங்களின் நிலைச்சார்பன்களை

$$\sigma = \psi_A + \psi_B$$

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

என்று எழுதலாம். இரண்டு அணுப்பரிதியங்களின் கூட்டலால் உருவான σ என்ற மூலக்கூறுபரிதியத்தை பிணைப்புமூலக்கூறுபரிதியம் என்றும், அவற்றுக்கிடையான வேறுபாட்டால் உருவான σ^* என்ற மூலக்கூறுபரிதியத்தை பிணைப்பெதிர்ப்பரிதியம் என்றும் அழைக்கிறோம். இவற்றை படம் 4.19 காட்டுகிறது.



படம் 4.19 A, B என்ற இரண்டு அணுக்களில் மையமான முறையே ψ_A , ψ_B என்ற அணுப்பரிதியங்களின் நேரியச்சேர்வால் பிணைப்புமூலக்கூறுபரிதியமும் (σ) பிணைப்பெதிர்ப்பரிதியமும் (σ^*) உருவாதல்

பண்பியமாக, மூலக்கூறுபரிதியங்கள் உருவாவதை எதிர்மின்னிநிலைச்சார்பன்களின் கட்டு மானக்குறுக்கீடாகவும் இடிமானக்குறுக்கீடாகவும் புரிந்துகொள்ளலாம். பிணைப்புமூலக்கூறுபரிதியம் உருவாவதில் பிணையும் அணுக்களின் இரண்டு எதிர்மின்னிச்சார்பன்களும் கட்டுமானக்குறுக்கீட்டால் ஒன்றையொன்று வலு வூட்டுகின்றன; பிணைப்பெதிர்ப்பரிதியம் உருவாவதில் எதிர்மின்னிச்சார்பன்கள் இடிமானக்குறுக்கீட்டால் ஒன்றையொன்று வலு குறைக்கின்றன. இதன் விளைவாக, பிணைப்பு மூலக்கூறுபரிதியத்தில் எதிர்மின்னியடர்வு பிணைந்த அணுக்களின் அணுக்கருக்கருக்கிடையில் இருக்கிறது; இதனால் அணுக்கருக்களிடையிலக்கல் சிறிதாகிறது. மாறாக, பிணைப்பெதிர்ப்பரிதியத்தில் எதிர்

மின்னியடர்வின் பெரும்பகுதி அணுக்கரு விடைவெளிக்கு வெளியில் உள்ளது. உண்மையில், அணுக்கருக்களிடையில் ஒரு கணுத்தளம் உள்ளது. கணுத்தளத்தில் எதிர்மின்னியடர்வு சுழியமாவதால் அணுக்கருக்களின் விலக்கல் அதிகமாகிறது. ஒரு எதிர்மின்னியை பிணைப்பு மூலக்கூறுபரிதியத்தில் வைக்கும்போது அது அணுக்கருக்களை ஈர்த்து மூலக்கூறை நிலைப்பாக்குகிறது. எனவே, பிணைப்புமூலக்கூறுபரிதியம் அதை உருவாக்கிய அணுப்பரிதியங்களைவிட எப்போதும் குறைந்த ஆற்றலுள்ளது. மாறாக, பிணைப்பெதிர்ப்பரிதியத்தில் ஒரு எதிர்மின்னியை வைக்கும்போது அது மூலக்கூறை நிலைப்புமேலீக்குகிறது. ஏனெனில், இந்த பரிதியத்தில் எதிர்மின்னியடர்வு அணுக்கருக்களிடையில் இல்லாததால் அணுக்கருக்களிடையான விலக்கல் அதிகமாகி ஆற்றல் அதிகரிக்கிறது.

பிணைப்பெதிர்ப்பரிதியத்தின் ஆற்றல் மூல அணுப்பரிதியங்களின் ஆற்றலைவிட அதிகமாகவும் பிணைப்புப்பரிதியத்தின் ஆற்றல் அவற்றைவிட குறைவாகவும் இருப்பது நோக்கத்தக்கது. ஆனால் இரண்டு மூலக்கூறுபரிதியங்களின் மொத்த ஆற்றல் மூல அணுப்பரிதியங்களின் மொத்த ஆற்றலுக்கு சமமாகவே இருக்கிறது.

4.7.2 அணுப்பரிதியங்களின் சேர்க்கைக்கான வரைக்கட்டுகள்

அணுப்பரிதியங்களின் நேரியச்சேர்வால் மூலக்கூறுபரிதியங்கள் உண்டாவது கீழ்க்காணும் வரைக்கட்டுகள் நிறைவேறினாலே நிகழ்கிறது.

(அ) சேரும் அணுப்பரிதியங்களின் ஆற்றல் சமமாகவோ அருகிலோ இருக்கவேண்டும். இதனால், 1sபரிதியம் மற்றொரு 1sபரிதியத்துடன் சேரலாம்; ஆனால் ஒரு 2sபரிதியத்துடன் சேரவியலாது. ஏனெனில், 2sபரிதியத்தின் ஆற்றல் 1sபரிதியத்தின் ஆற்றலைவிட கணிசமான அளவு அதிகம். மிகவும் வேறுபட்ட அணுக்கருக்கு இது உண்மையாகாமற்போகலாம்.

(ஆ) சேரும் அணுப்பரிதியங்களுக்கு மூலக்கூறுச்சேப்பற்றி ஒரே சமச்சீர்மை இருக்கவேண்டும். வழக்கேற்பாக, z அச்சை மூலக்கூறுச்சாக எடுக்கிறோம். சமவாற்றலோகிட்டத்தட்ட சமவாற்றலோ உள்ள அணுப்பரிதியங்களும் ஒரே சமச்சீர்மையில்லாவிட்டால் சேரவியலாது என்பதை நோக்குவது முக்கியம். சான்றாக, ஓரணுவின் $2p_z$ பரிதியம் மற்றொரு அணுவின் $2p_z$ பரிதியத்துடன் சேரலாம்; ஆனால் $2p_x$, $2p_y$ பரிதியங்களுடன் சேரவியலாது; ஏனெனில் இவற்றின் சமச்சீர்மை $2p_z$ பரிதியத்தின் சமச்சீர்மையிலிருந்து வேறுபடுகிறது.

(இ) சேரும் அணுப்பரிதிங்கள் மீயளவமாக மேற்கவியவேண்டும். மேற்கவிவு அதிகமாகும் போது மூலக்கூறுப்பரிதியத்தில் அணுக்கருக்களிடையில் எதிர்மின்னியடர்வு அதிகரிக்கிறது.

4.7.3 மூலக்கூறுப்பரிதிங்களின் வகைகள்

ஈரணுமூலக்கூறுகளின் மூலக்கூறுப்பரிதியங்களை சகரம், பகரம், தகரம்... ($\sigma, \pi, \delta, \dots$) என்று குறிக்கிறோம்.

இந்த பெயரிடுமுறையில் சகரமூலக்கூறு பரிதியம் (σ மூலக்கூறுப்பரிதியம்) பிணைப்பச்சைப்பற்றி சமச்சீர்மையானது; பகரமூலக்கூறுப்பரிதியத்துக்கு (π மூலக்கூறுப்பரிதியத்துக்கு) இவ்வாறான சமச்சீர்மை இல்லை. சான்றாக, இரண்டு அணுக்கருக்களில் மையங்கொண்ட 1sபரிதிங்களின் நேரியச்சேர்வு பிணைப்பச்சைப்பற்றி சமச்சீர்மையான இரண்டு மூலக்கூறுப்பரிதியங்களை உருவாக்குகிறது. இவ்வாறான மூலக்கூறுப்பரிதியங்கள் சகரவகையானவை; அவற்றை $\sigma 1s, \sigma^* 1s$ என்று குறிக்கிறோம் (படம் 4.20(அ)). அணுக்கருவிடையச்சை zதிசையில் இருப்பதாகக்கொண்டால், இரண்டு அணுக்களின் $2p_z$ பரிதியங்களின் நேரியச்சேர்வு $\sigma 2p_z, \sigma^* 2p_z$ என்று குறிக்கப்படும் இரண்டு சகரமூலக்கூறுப்பரிதியங்களை உண்டாக்குகிறது (படம் 4.20(ஆ)).

$2p_x, 2p_y$ பரிதிங்களிலிருந்து பெறும் மூலக்கூறு பரிதிங்கள் பிணைப்பச்சைப்பற்றி சமச்சீரானவை அல்ல; இவற்றில் அணுக்கரு விடையச்சுத்தளத்தின் ஒருபக்கம் ஒரு நேர்ம

மடலும் மறுபக்கம் ஒரு எதிர்மடலும் உள்ளன. இவ்வாறான மூலக்கூறு பரிதிங்களை π, π^* என்று குறிக்கிறோம் (படம் 4.20(இ)). π ப்பிணைப்பு மூபத்தில் அணுக்கருவிடையச்சைச்சுற்றி அதிக எதிர்மின்னியடர்வு இருக்கிறது; π^* பிணைப்பெதிர்மூபத்தில் அணுக்கருக்களிடையில் ஒரு கணுத்தளம் இருக்கிறது.

4.7.4 மூலக்கூறுப்பரிதிங்களுக்கான ஆற்றன்மட்டப்படவரைவுகள்

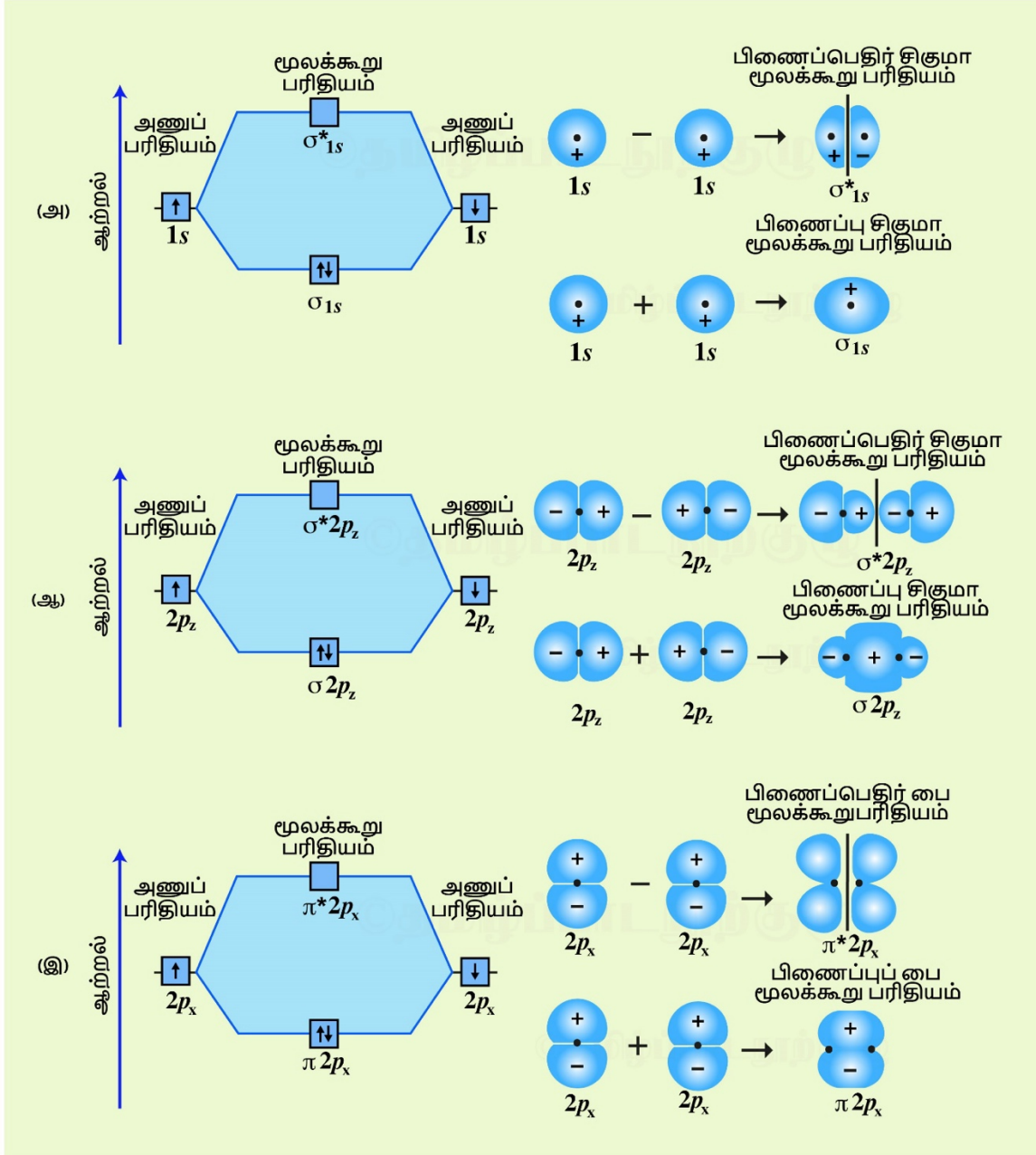
இரண்டு அணுக்களிலுள்ள 1sபரிதிங்கள் $\sigma 1s, \sigma^* 1s$ என்ற இரண்டு மூலக்கூறுப்பரிதிங்களை உருவாக்குவதை கண்டோம். இதே வழியில், இரண்டு அணுக்களிலுள்ள $2s, 2p$ பரிதியங்கள் (மொத்தம் எட்டு பரிதிங்கள்) கீழ்க்காணும் மூலக்கூறு பரிதிங்களை தருகின்றன.

பிணைப்பெதிர்மூபங்கள் $\sigma^* 2s, \sigma^* 2p_z, \pi^* 2p_x, \pi^* 2p_y$

பிணைப்புமூபங்கள் $\sigma 2s, \sigma 2p_z, \pi 2p_x, \pi 2p_y$

இந்த மூலக்கூறுப்பரிதிங்களின் ஆற்றன் மட்டங்களை சீரொழுங்கட்டவணையின் இரண்டாஞ்சீரொழுங்குத்தனிமங்களின் ஒப்பீரணு மூலக்கூறுகளுக்கான நிறநிரலியத்தரவுகளிலிருந்து பரிசோதனைவழி அறிகிறோம். O_2 னுக்கும் F_2 னுக்குமான பல்வேறு மூலக்கூறுப்பரிதிங்களின் ஆற்றல்கள் கீழ்க்காணுமாறு இருக்கின்றன:

$$\begin{aligned} \sigma 1s < \sigma^* 1s < \sigma 2s < \sigma^* 2s < \sigma 2p_z \\ < (\pi 2p_x = \pi 2p_y) \\ < (\pi^* 2p_x = \pi^* 2p_y) < \sigma^* 2p_z \end{aligned}$$



படம் 4.20 இரண்டு (அ) $1s$ (ஆ) $2p_z$ (இ) $2p_x$ ஆகிய அணுப்பரிதியங்கள் சேர்வதால் உண்டாகும் மூலக்கூறுபரிதியங்களின் உருவரைகளும் ஆற்றல்களும்

ஆனால், எஞ்சிய மூலக்கூறுகளான Li_2 , Be_2 , B_2 , C_2 , N_2 ஆகியவற்றுக்கு ஆற்றன்மட்டங்களின் இந்த தொடரி சரியன்று. சான்றாக, B_2, C_2, N_2 போன்றவற்றில் பல்வேறு மூலக்கூறுபரிதியங்களின் ஆற்றன்முறைமை

$$\begin{aligned} \sigma_{1s} &< \sigma^*_{1s} < \sigma_{2s} < \sigma^*_{2s} < (\pi_{2p_x} = \pi_{2p_y}) \\ &< \sigma_{2p_z} < (\pi^*_{2p_x} = \pi^*_{2p_y}) \\ &< \sigma^*_{2p_z} \end{aligned}$$

என்றிருப்பதாக பரிசோதனைகள் காட்டுகின்றன.

இந்த முறைமையின் சிறப்பியல்பான பண்புக்கூறு σ_{2p_x} மூலக்கூறுபரிதியத்தின் ஆற்றல் π_{2p_x} , π_{2p_y} ஆகியவற்றைவிட அதிகமாயிருப்பதே.

4.7.5 எதிர்மின்னியமைவடிவமும் மூலக்கூறுநடத்தையும்

எதிர்மின்னிகள் பல்வேறு மூலக்கூறுபரிதியங்களில் பரவியிருப்பதை மூலக்கூறின் எதிர்மின்னியமைவடிவம் என்கிறோம். மூலக்கூறின் எதிர்மின்னியமைவடிவத்திலிருந்து

மூலக்கூறுப்பற்றிய முக்கியமான தகவல்களை கீழ்க்காணுமாறு அறியலாம்.

மூலக்கூறுகளின் நிலைப்புமை: பிணைப்புப் பரிதிவங்களிலுள்ள மொத்த எதிர்மின்னிகளின் எண்ணிக்கை N_{\downarrow} என்றும் பிணைப்பெதிர்ப்பரிதிவங்களிலுள்ள மொத்த எதிர்மின்னியெண்ணிக்கை N_{\uparrow} என்றும் கொண்டால்,

(அ) N_{\uparrow} ஐவிட N_{\downarrow} அதிகமெனில், மூலக்கூறு நிலைப்பானது.

(ஆ) N_{\uparrow} ஐவிட N_{\downarrow} குறைவெனில், மூலக்கூறு நிலைப்பற்றது.

(அ)வில் அதிகமான பிணைப்புப்பரிதிவங்களில் எதிர்மின்னிகள் உள்ளதால் பிணைப்பு விளைவு அதிகமாகி அதன்விளைவாக மூலக்கூறு நிலைப்பாகிறது. (ஆ)வில் பிணைப்பெதிர்ப்பரிதிவ விளைவு வலுவாயிருப்பதால் மூலக்கூறு நிலைப்பற்றதாகிறது.

பிணைப்புமுறைமை: பிணைப்புப்பரிதிவங்களிலும் பிணைப்பெதிர்ப்பரிதிவங்களிலும் உள்ள எதிர்மின்னிகளின் வேறுபாட்டில் பாதியை பிணைப்புமுறைமை என்று வரையறுக்கிறோம். அதாவது,

$$\text{பிணைப்புமுறைமை} = \frac{1}{2}(N_{\downarrow} - N_{\uparrow})$$

மூலக்கூறின் நிலைப்புமையைப்பற்றி முன்பு சொன்னதை இப்போது பிணைப்பு முறைமையை பயன்படுத்தி வேறுவிதமாக சொல்லலாம். நேர்மப்பிணைப்புமுறைமை ($N_{\downarrow} > N_{\uparrow}$) நிலைப்பான மூலக்கூறையும் எதிர்மமோ சுழியமோவான பிணைப்பு முறைமை ($N_{\downarrow} \leq N_{\uparrow}$) நிலைப்பற்ற மூலக்கூறையும் காட்டுகின்றன.

பிணைப்பின் இயல்பு: பிணைப்பு முறைமையின் 1, 2, 3 ஆகிய முழுவெண் மதிப்புகள் தொன்மைமுறைகளால் அறிந்த ஒற்றை, இரட்டை, மும்மப்பிணைப்புகளுக்கு நிகராகின்றன.

பிணைப்புநீளம்: ஒரு மூலக்கூறில் இரண்டு அணுக்களுக்கிடையான பிணைப்புமுறைமையை பிணைப்புநீளத்தின் ஒரு தோராயமான அளவாக கொள்ளலாம். பிணைப்புமுறைமை அதிகரிக்க பிணைப்புநீளம் குறைகிறது.

காந்தவியல்பு: ஒரு மூலக்கூறின் எல்லாப் பரிதிவங்களிலும் இரட்டை எதிர்மின்னிகள் இருந்தால், அந்தப்பொருள் ஒரு மென்காந்தப் பொருள்; அதாவது, அது காந்தப்புலத்தினால் விலக்கப்படுகிறது. ஒன்றோ சிலவோவான மூலக்கூறுப்பரிதிவங்களில் ஒற்றையெதிர்மின்னிகள் இருந்தால், அந்தப்பொருள் ஒரு வன்காந்தம்; அது காந்தப்புலத்தால் ஈர்க்கப்படுகிறது. ஆக்கு சிசுமூலக்கூறு வன்காந்தத்துக்கு ஒரு சான்று.

4.8 சில

ஒப்பீரணுமூலக்கூறுகளில் பிணைப்பு

இந்தப்பகுதியில் சில ஒப்பீரணுமூலக்கூறுகளிலுள்ள பிணைப்புகளை உரையாற்றுவோம்.

(அ) ஐதரசமூலக்கூறு (H_2): இது இரண்டு ஐதரசவணுக்களிலிருந்து உருவாகிறது. ஒவ்வொரு ஐதரசவணுவின் 1s பரிதிவத்திலும் ஒரு எதிர்மின்னி உள்ளது. எனவே, ஐதரசமூலக்கூறில் மொத்தம் இரண்டு எதிர்மின்னிகள் $\sigma 1s$ மூலக்கூறுப்பரிதிவத்தில் இருக்கின்றன. இவ்வாறு ஐதரசமூலக்கூறின் எதிர்மின்னியமைவடிவம்

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

$H_2: (\sigma 1s)^2$ மூலக்கூறில் பிணைப்புமுறைமையை கீழ்க்காணுமாறு கணக்கிடுகிறோம்.

$$\begin{aligned} \text{பிணைப்புமுறைமை} &= \frac{1}{2}(N_{\downarrow} - N_{\uparrow}) = \\ &= \frac{1}{2}(2 - 0) = 1 \end{aligned}$$

இதனால் இரண்டு ஐதரசவணுக்கள் ஒரு ஒற்றை உடன்பிணைப்பால் பிணைக்கப்படுகின்றன என்பது பொருளாகிறது. ஐதரசமூலக்கூறின் பிணைப்புப் பிரிவாற்றல் 438 kJ mol^{-1} என்றும் பிணைப்புநீளம் 74 pm என்றும் கண்டிருக்கின்றனர். ஐதரசமூலக்கூறில் சோடியுறாத எதிர்மின்னிகள் இல்லாததால் அது மென்காந்தம்.

(ஆ) ஈலியமூலக்கூறு (He_2): ஈலியவணுவின் எதிர்மின்னியமைவடிவம் $1s^2$. ஒவ்வொரு ஈலியவணு விலும் 2 எதிர்மின்னிகள் இருப்பதால், ஈலியமூலக்கூறில் 4 எதிர்மின்னிகள் இருக்க வேண்டும். இவற்றை $\sigma 1s, \sigma^* 1s$ ஆகிய மூலக்கூறு பரிதிவங்களில் வைத்துவிடலாம். இதனால்

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

பிணைப்புமுறைமை

$$= \frac{1}{2}(N_{\downarrow} - N_{\uparrow}) = \frac{1}{2}(2 - 0) = 0$$

எனவே, ஈலிய மூலக்கூறு நிலைப்பற்றது; அவ்வாறு ஒரு பொருள் இல்லை.

இதைப்போல்

$Be_2: (\sigma 1s)^2 (\sigma^* 1s)^2 (\sigma 2s)^2 (\sigma^* 2s)^2$ என்ற மூலக்கூறும் இல்லை என்று காணலாம்.

(இ) இலித்தியமூலக்கூறு (Li_2): இலித்தியத்தின் எதிர்மின்னியமைவடிவம் $1s^2 2s^1$. ஆறு எதிர்மின்னிகள் உள்ள இலித்திய மூலக்கூறின் எதிர்மின்னியமைவடிவம்

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

இந்த அமைவடிவத்தை $KK(\sigma 2s)^2$ என்றும் எழுதலாம்; இங்கு, KK என்பது மூடிய K வோட்டின் அமைவடிவமாகிய $(\sigma 1s)^2 (\sigma^* 1s)^2$ ஐ குறிக்கிறது.

இலித்திய மூலக்கூறின் எதிர்மின்னியமை வடிவத்திலிருந்து பிணைப்புமூலங்களில் நான்கு எதிர்மின்னிகளும் பிணைப்பெதிர்மூலத்தில் இரண்டு எதிர்மின்னிகளும் இருப்பது தெளிவாகிறது. எனவே, இதன் பிணைப்புமுறைமை $\frac{1}{2}(4 - 2) = 1$. இதனால் இலித்தியமூலக்கூறு நிலைப்பாடு என்றறிகிறோம்; சோடியுறாத எதிர்மின்னி இல்லாததால் இது மென்காந்தப்பண்புள்ளது. உண்மையில் மென்காந்த Li_2 வளிமமுகநிலையில் பரிசோதனையால் காணப்பட்டுள்ளது.

(ஈ) கரிமமூலக்கூறு (C_2): கரிமத்தின் எதிர்மின்னியமைவடிவம் $1s^2 2s^2 2p^2$. C_2 இல் பன்னிரண்டு எதிர்மின்னிகள் உள்ளன. எனவே, C_2 மூலக்கூறின் எதிர்மின்னியமைவடிவம்

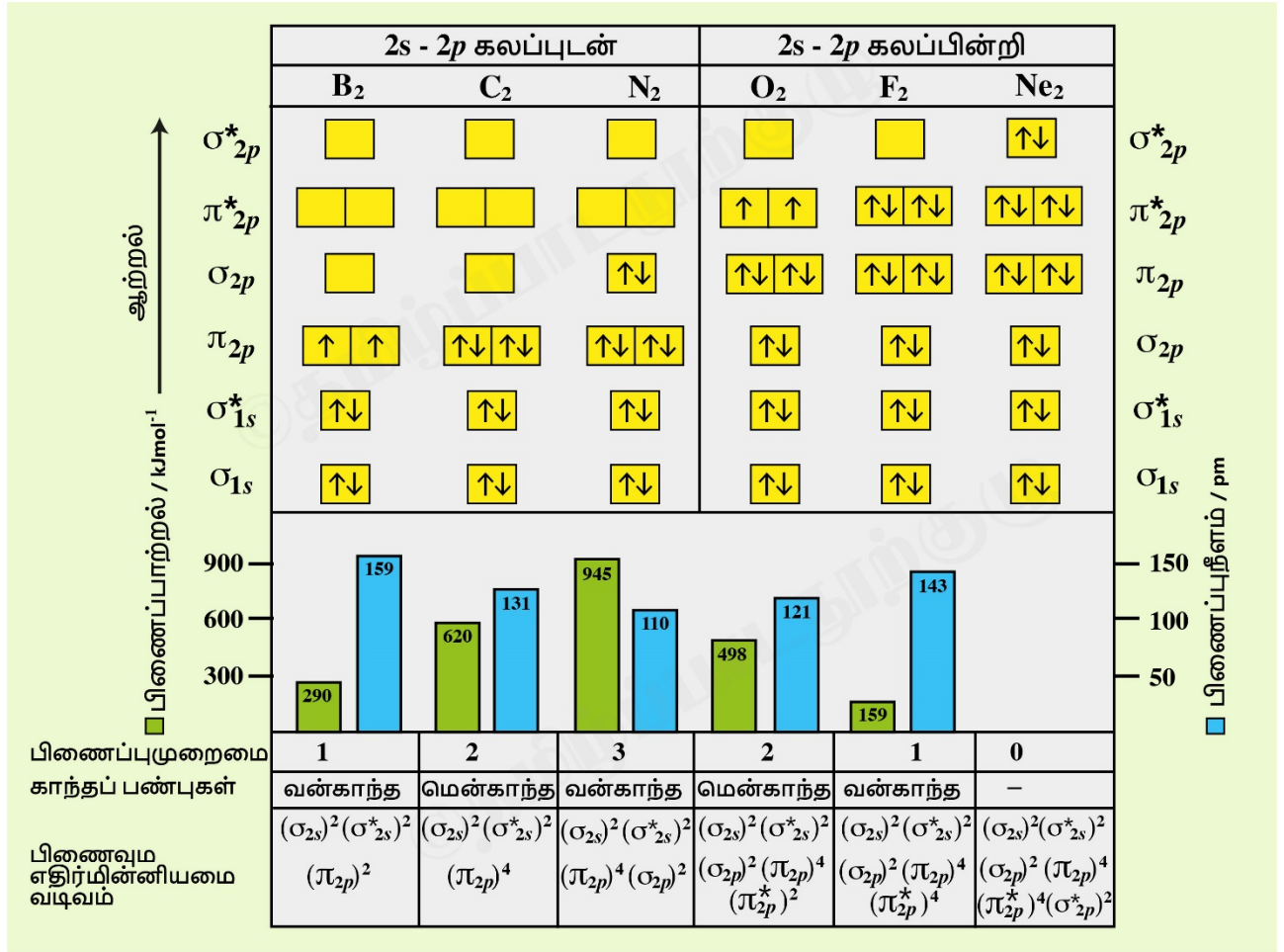
$$C_2: (\sigma 1s)^2 (\sigma^* 1s)^2 (\sigma^* 2s)^2 (\pi 2p_x^2 = \pi 2p_y^2)$$

அதாவது

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

$$C_2 \text{ இன் பிணைப்புமுறைமை } \frac{1}{2}(8 - 4) = 2.$$

இது மென்காந்தமாயிருக்கவேண்டும். உண்மையில் மென்காந்த C_2 மூலக்கூறுகள் வளிமமுக நிலையில் துய்யறியப்பட்டுள்ளன. C_2 மூலக்கூறின் இரட்டைப்பிணைப்பில் இரண்டுமே பகரப்பிணைப்புகள் என்பது முக்கியமாக நோக்கத்தக்கது. பெரும்பான்மையான மற்ற மூலக்கூறுகளில் இரட்டைப்பிணைப்பில் ஒரு சகரப்பிணைப்பும் ஒரு பகரப்பிணைப்பும் இருக்கின்றன. இதே முறையை பின்பற்றி N_2 மூலக்கூறின் பிணைப்பையும் உரையாற்றலாம்.



படம் 4.21 B_2 முதல் Ne_2 வரையானவற்றின் மூலங்களில் எதிர்மின்னிகள் இருப்பதும் மூலக்கூறுபண்புகளும்

(உ) ஆக்குசிசமூலக்கூறு (O_2): ஆக்குசிச வணுவின் எதிர்மின்னியமைவடிவம் $1s^2 2s^2 2p^4$. ஒவ்வொரு ஆக்குசிசவணுவிலும் 8 எதிர்மின்னிகள் இருப்பதால், O_2 மூலக்கூறில் 16 எதிர்மின்னிகள் உள்ளன. எனவே, O_2 மூலக்கூறின் எதிர்மின்னியமைவடிவம்

கள் உள்ளன. எனவே, O_2 மூலக்கூறின் எதிர்மின்னியமைவடிவம்

$$O_2: (\sigma 1s)^2 (\sigma^* 1s)^2 (\sigma 2s)^2 (\sigma^* 2s)^2 (\sigma 2p_z)^2 (\pi 2p_x^2 = \pi 2p_y^2) (\pi^* 2p_x^1 = \pi^* 2p_y^1)$$

$$O_2: KK (\sigma 2s)^2 (\sigma^* 2s)^2 (\sigma 2p_z)^2 (\pi 2p_x^2 \\ = \pi 2p_y^2) (\pi^* 2p_x^1 = \pi^* 2p_y^1)$$

O_2 மூலக்கூறின் எதிர்மின்னியமைவடிவத்தி லிருந்து பத்து எதிர்மின்னிகள் பிணைப்புமூபங் களிலும் ஆறு எதிர்மின்னிகள் பிணைப்பெதிர் மூபங்களிலும் இருப்பது தெளிவாகிறது. எனவே அதன் பிணைப்புமுறைமை

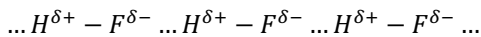
$$= \frac{1}{2} (N_{\sigma} - N_{\sigma^*}) = \frac{1}{2} (10 - 6) = 2.$$

ஆகவே, ஆக்குசிசமூலக்கூறில் அணுக்கள் ஒரு இரட்டைப்பிணைப்பால் பிணையுறுகின் றன. மேலும், $\pi^* 2p_x$, $\pi^* 2p_y$, ஆகிய மூலக்கூறு பரிதியங்களில் இரண்டு சோடியுறாத எதிர் மின்னிகள் இருப்பதையும் காண்கிறோம். எனவே, O_2 மூலக்கூறு மென்காந்த மாக இருக்க வேண்டும். இந்த முன்னறிதல் பரிசோதனைக் கண்டறிதல்களுடன் ஒத்திருக்கிறது. இந்த வழியில் கோட்பாடு ஆக்குசிசனின் மென்காந்த தத்தன்மையை வெற்றிகரமாக விளக்குகிறது.

இதைப்போலவே, சீரொழுங்கட்டவணையின் இரண்டாம் சீரொழுங்கின் ஒப்பீரணுமூலக் கூறுகளின் எதிர்மின்னியமைவடிவங்களை எழுதலாம். B_2 முதல் Ne_2 உட்பட்டவற்றுக்கு, மூபங்களிலுள்ள எதிர்மின்னிகளின் எண்ணிக் கையையும் மூலக்கூறுபண்புகளையும் படம் 4.21 காட்டுகிறது. மூபங்களின் தொடரும் அவற்றின் எதிர்மின்னித்தொகைகளும் காட்டப்பட்டுள்ளன. பிணைப்பாற்றல், பிணைப்புநீளம், பிணைப்பு முறைமை, காந்தப்பண்புகள், பிணைவும எதிர்மின்னியமைவடிவங்கள் ஆகியவை பரிதியப்படவரைவுகளுக்குக்கீழ் உள்ளன.

4.9 ஐதரசப்பிணைப்பு

நைற்றசன், ஆக்குசிசன், புளோரின் ஆகியவை அதிக மின்னெதிர்மையான தனிமங்கள். இவை ஐதரசவணுவுடன் உடன்பிணைப்பால் பிணைந்திருக்கும்போது, உடன்பிணைப்பின் எதிர்மின்னிகள் இந்த மின்னெதிர்மவணுக்களின் அருகிலுள்ளன. இதனால் நேர்மமின்மத்தை பெறும் ஐதரசவணு மற்ற மின்னெதிர்மவணுக்களுடன் ஒரு பிணைப்பை உண்டாக்குகிறது. உடன்பிணைப் பைவிட வலு குறைந்த இதை ஐதரசப்பிணைப்பு என்கிறோம். சான்றாக, HF மூலக்கூறில், ஒரு மூலக்கூறிலுள்ள ஒரு ஐதரசவணுவுக்கும் மற்றொரு மூலக்கூறிலுள்ள புளோரினணுவுக்கு மிடையில் கீழ்க்காணுமாறு ஐதரசப்பிணைப்பு இருக்கிறது.

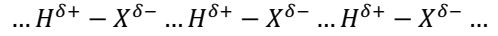


இங்கு, ஐதரசப்பிணைப்பு இரண்டு அணுக்க ளிடையில் ஒரு பாலமாக அமைகிறது. ஐதரசன் ஒரு அணுவுடன் உடன்பிணைப்பாலும் மற்றொரு அணுவுடன் ஐதரசப்பிணைப்பாலும் பிணைந்

திருக்கிறது. ஐதரசப்பிணைப்பை புள்ளிக் கோட்டாலும் (...) உடன்பிணைப்பை திண் கோட்டாலும் குறிக்கிறோம். இவ்வாறு, ஐதரசப்பிணைப்பை ஒரு மூலக்கூறின் ஐதரச வணுவை மற்றொரு மூலக்கூறின் மின்னெதிர் மவணுவுடன் (F, O, N) பிணைக்கும் ஒரு ஈர்ப்புவிசை என்று வரையறுக்கிறோம்.

4.9.1 ஐதரசப்பிணைப்பு உருவாவதன் காரணங்கள்

அதிக மின்னெதிர்மையான X என்ற தனிமத்துடன் ஐதரசன் பிணைந்திருக்கும்போது, இரண்டு அணுக்களும் பகிரும் எதிர்மின்னிச் சோடி ஐதரசவணுவைவிட்டு விலகியிருக்கிறது. இதன் விளைவாக ஐதரசவணு மற்ற அணுவான X ஐவிட அதிக எதிர்மின்னிவிலக்குவதாகிறது. எதிர்மின்னிகள் X இன் அருகில் இருப்பதால் ஐதரசனில் ஒரு பகுதிநேர்மமின்மமும் ($\delta +$) X இல் ஒரு பகுதியெதிர்மமின்மமும் ($\delta -$) உள்ளன. இதன் விளைவு ஒரு முனையமூலக்கூறு. இதனால் கீழ்க்காணும் மின்னிலைம ஈர்ப்பு உண்டாகிறது.



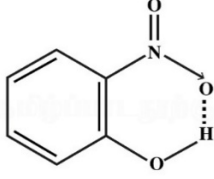
H பிணைப்பின் வலிமை சேர்மத்தின் பொருண்மநிலையை சார்ந்தது. இது திண்ம நிலையில் மீப்பெருமமாகவும் வளிமநிலையில் மீச்சிறுமமாகவும் உள்ளது. இவ்வாறு ஐதரசப் பிணைப்புகள் சேர்மங்களின் கட்டமைப்புகளி லும் பண்புகளிலும் வலுவாக விளைவூட்டுகின் றன.

4.9.2 H பிணைப்பின் வகைகள்

இரண்டு வகையான H பிணைப்புகள் உள்ளன.

(அ) மூலக்கூறிடை ஐதரசப்பிணைப்பு: இருவேறு மூலக்கூறுகளிடையில் இது உருவா கிறது; இந்த இரண்டு மூலக்கூறுகளும் ஒரே சேர்மத்தினவையாகவோ வெவ்வேறு சேர்மங் களினவையாகவோ இருக்கலாம். HF , நீர், ஆல்க கால் ஆகியவற்றிலுள்ள ஐதரசப்பிணைப்புகள் சான்றுகள்.

(ஆ) மூலக்கூறுள் ஐதரசப்பிணைப்பு: ஒரே மூலக்கூறிலுள்ள உள்ள இரண்டு மின்னெதிர்ம அணுக்களுக்கு (F, O, N) இடையில் ஐதரசவணு இருக்கும்போது இது உருவாகிறது. சான்றாக, இகனைற்றோபினாலில் ஐதரசன் இரண்டு ஆக்குசிசவணுக்களிடையில் உள்ளது.



சுருக்கவுரை

நேர்மமின்ம அயனிகளும் எதிர்மமின்ம அயனிகளும் உருவாவதைப்பற்றிய கோசலின் முதல் உண்ணோக்கு இந்த நிகழ்முறையை அந்தந்த அயனிகள் மந்தவளிமங்களின் அமைவடிவங்களை பெறுவதுடன் தொடர்புறுத்தியது. அயனிகளுக்கிடையான மின்னிலைம ஈர்ப்பு அவற்றின் நிலைப்புக்கு காரணம். இது **மின்பிணைவுமை** என்ற கருத்துருவை தருகிறது.

உடன்பிணைவுமை என்பதை அணுக்கள் தங்களிடையில் எதிர்மின்னிச்சோடிகளை பகிர்வதாக நூயி முதன்முதலில் விவரித்து, இதில் ஈடுபடும் அணுக்கள் எதிர்மின்னிகளை பகிர்வதை அவை மந்தவளிமங்களின் அமைவடிவங்களை அடைவதுடன் தொடர்புறுத்தினார். ஒரு குறிப்பிட்ட தனிமத்தின் அணுக்கான நூயிப்புள்ளியடையாளம் அதன் பிணைவுமை எதிர்மின்னிகளின் எண்ணிக்கையை காட்டுகிறது; நூயிப்புள்ளிக்கட்டமைப்பு மூலக்கூறுகளின் பிணைப்புகளின் ஒரு சித்திரக்குறிப்பிட்டை காட்டுகிறது.

அயனிச்சேர்மங்களை நேர்மவயனிகளும் எதிர்மவயனிகளும் படிக்க அணிக்கட்டு எனப்படும் ஒரு முறைமையான அடுக்கலிலுள்ள ஒரு முப்பருமானத்திரளாக சித்திரிக்கலாம். ஒரு படிக்கத்திண்மத்தில் நேர்மவயனிகளுக்கும் எதிர்மவயனிகளுக்கும்மிடையில் மின்மச்சமன்மை நிலவுகிறது. **அணிக்கட்டு உருவாதலின் அகவெப்பத்தால்** படிக்க அணிக்கட்டு நிலைப்புறுகிறது.

இரண்டு அணுக்கள் ஒரு எதிர்மின்னிச்சோடியை பகிர்வதன்மூலம் ஒரு ஒற்றைப்பிணைப்பு ஏற்படுகிறது; அவை பல எதிர்மின்னிச்சோடிகளை பகிர்வதன்மூலம் பன்மப்பிணைப்பு ஏற்படுகிறது. பிணைப்புண்ட சில அணுக்களில் பிணைப்பில் ஈடுபடாத எதிர்மின்னிச்சோடிகளும் உள்ளன. இவற்றை எதிர்மின்னித்தனிச்சோடிகள் என்றழைக்கிறோம். நூயிப்புள்ளிக்கட்டமைப்பு ஒரு மூலக்கூறில் ஒவ்வொரு அணுவைச்சுற்றிலும் பிணைப்புச்சோடிகளும் தனிச்சோடிகளும் அடுக்கமுற்றிருப்பதை காட்டுகிறது. **வேதிப்பிணைப்புடன் தொடர்பான பிணைப்புநீளம், பிணைப்புக்கோணம், பிணைப்பகவெப்பம், பிணைப்புமுறைமை, பிணைப்புமுனைமை போன்ற முக்கியமான அளவுருகள் சேர்மங்களின் பண்புகளில் கணிசமான விளைவுகளை ஏற்படுத்துகின்றன.**

சில பன்மையணுமூலக்கூறுகளையும் அயனிகளையும் ஒரு ஒற்றை நூயிக்கட்டமைப்பால் சரியாக விவரிக்கவியலாது. ஒரே சட்டக்கட்டமைப்பின் அடிப்படையிலான பல கட்டமைப்புகளை (குறிப்பீடுகளை) எழுதுகிறோம்; இவை மொத்தமாக மூலக்கூறையோ அயனியையோ விவரிக்கின்றன. மிக முக்கியமானதும் மீயதிசுப்பயனுள்ளதுமான இந்த கருத்துருவை **ஒத்தலைவு** என்கிறோம். இதற்குப்பங்களிக்கும் முறையேற்புக்கட்டமைப்புகளின் ஒத்தலைவுக்கலப்பினம் மூலக்கூற்றையோ அயனியையோ குறிக்கிறது.

மூலக்கூறுகளின் வடிவங்களை முன்னறிய பயன்படும் பிவெசோவியொப்புரு எதிர்மின்னிச்சோடிகள் ஒன்றையொன்று விலக்குவதால் இயன்றளவு தொலைவாயிருக்கும் போக்குடையவை என்ற எடுகோளின் அடிப்படையிலானது. இந்த ஒப்புருவின்படி, தனிச்சோடித்தனிச்சோடி, தனிச்சோடிப்பிணைப்புச்சோடி, பிணைப்புச்சோடிப்பிணைப்புச்சோடி ஆகிய விலக்கல்களே மூலக்கூறின் வடிவங்களை தீர்மானிக்கின்றன. இந்த விலக்கல்களின் முறைமை தத > தபி > பிபி.

உடன்பிணைப்பின் **பிணைவுமப்பிணைப்பு (பிபி)** என்ற அணுகுமுறை உடன்பிணைப்பு உருவாகும் ஆற்றலின் அடிப்படையிலானது. இந்த ஆற்றலைப்பற்றி நூயியொப்புருவும் பிவெசோவியொப்புருவும் ஒன்றும் சொல்லவில்லை. அடிப்படையில், பிபிக்கோட்பாடு பிணைப்புருவாக்கத்தை பரிதியங்கள் மேற்கவிதலின் அடிப்படையில் உரையாற்றுகிறது. சான்றாக, இரண்டு ஐதரசவணுக்களிலிருந்து ஐதரசமூலக்கூறு உருவாவதில் ஒவ்வொரு ஐதரசவணுவிலும் ஒற்றையெதிர்மின்னியுள்ள 1sபரிதியங்கள் மேற்கவிக்கின்றன. இரண்டு ஐதரசவணுக்களும் ஒன்றையொன்று நெருங்கும்போது அமைப்பின் இயன்மவாற்றல் குறைவதை காண்கிறோம். ஆற்றல் மீக்குறைவாகும் சமநிலையான அணுக்கருவிடைத்தொலைவை பிணைப்புநீளம் என்கிறோம். அணுக்கருக்கள் மேலும் நெருக்க முயன்றால் ஆற்றல் அதிகமாகி அமைப்பு நிலைப்பற்றதாகிறது. பரிதியங்களின் மேற்கவிதலால் அணுக்கருக்களுக்கிடையான எதிர்மின்னியடர்வு அதிகரித்து அவை

அருகில் வர உதவுகிறது. ஆனால், பிணைப்பகவெப்பத்தையும் பிணைப்புநீளங்களையும் பெற மேற்கவீதல் மட்டுமே போதாது; மற்ற அளவுருகளையும் கணக்கிலெடுக்கவேண்டும்.

பலவணுமூலக்கூறுகளின் வடிவங்களை விளக்க, பாலிங்கு அணுப்பரிதியங்களின் கலப்பினமாதலை அறிமுகமாக்கினார். Be, B, C, N, O ஆகியவற்றின் அணுப்பரிதியங்களின் sp, sp^2, sp^3 கப்பினமாதல்கள் $BeCl_2, BCl_3, CH_4, NH_3, H_2O$ போன்ற மூலக்கூறுகள் உருவாவதையும் அவற்றின் வடிவங்களையும் விளக்க உதவுகின்றன. அவை C_2H_2, C_2H_4 போன்ற மூலக்கூறுகளில் பன்மப்பிணைப்பு உருவாவதையும் விளக்குகின்றன.

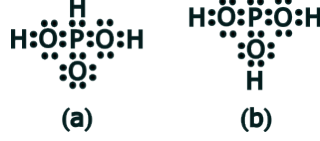
மூலக்கூறுபரிதியக்(மூபக்)கோட்பாடு அணுப்பரிதியங்கள் சேர்ந்தும் அடுக்கமுற்றும் முழு மூலக்கூறுக்குமுரிய மூலக்கூறுபரிதியங்களை உண்டாக்குவதன் அடிப்படையில் பிணைப்பை விளக்குகிறது. மூலக்கூறுபரிதியங்களின் எண்ணிக்கை எப்போதும் சேரும் அணுப்பரிதியங்களின் எண்ணிக்கைக்கு சமம். பிணைப்புமூலக்கூறுபரிதியங்கள் அணுக்கருகளிடையில் எதிர்மின்னியடர்வை அதிகரித்து ஆற்றலை தனித்த அணுப்பரிதியங்களின் ஆற்றலைவிட குறையச்செய்கின்றன; பிணைப்பெதிர்மூலக்கூறு பரிதியங்களில் அணுக்கருவினிடையில் எதிர்மின்னியடர்வு சுழியமாகும் கணுத்தளங்கள் இருப்பதால் அணுக்கருகளிடையில் எதிர்மின்னியடர்வு குறைந்து ஆற்றல் தனித்த அணுப்பரிதியங்களின் ஆற்றலைவிட அதிகரிக்கிறது.

மூலக்கூறுகளின் எதிர்மின்னியமைவடிவங்களை எழுத எதிர்மின்னிகளை மூலக்கூறுபரிதியங்களில் ஆற்றலின் ஏறுமுறைமையில் நிரப்புகிறோம். அணுக்களில்போலவே, பாலியின் தவிர்ப்புகொள்கையும் உண்டின் விதியும் மூலக்கூறுபரிதியங்களை நிரப்புவதிலும் பயனாகின்றன. பிணைப்புமூலக்கூறு பரிதியங்களிலுள்ள எதிர்மின்னிகளின் எண்ணிக்கை பிணைப்பெதிர்மூலக்கூறுபரிதியங்களிலுள்ள எதிர்மின்னிகளின் எண்ணிக்கையைவிட அதிகமானால் மூலக்கூறு நிலைப்பாகிறது.

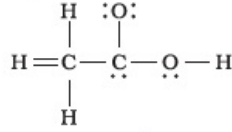
F, O, N போன்ற அதிக மின்னெதிர்மையுள்ள அணுக்களினிடையில் ஐதரசன் இருக்கும்போது ஐதரசப்பிணைப்பு உண்டாகிறது. ஒரே பொருளோ வெவ்வேறு பொருள்களோவான வெவ்வேறு மூலக்கூறுகளிடையானதை மூலக்கூறிடை ஐதரசப்பிணைப்பு என்றும் ஒரே மூலக்கூறின் பகுதிகளிடையானதை மூலக்கூற்றுள் ஐதரசப்பிணைப்பு என்றும் அழைக்கிறோம்.

பயிற்சிகள்

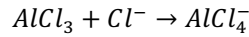
- 4.1. ஒரு வேதிப்பிணைப்பு உருவாவதை விளக்குக.
- 4.2. கீழ்க்காணும் தனிமங்களின் அணுக்களுக்கு நூயியின் புள்ளியடையாளங்களை எழுதுக: Mg, Na, B, O, N, Br .
- 4.3. கீழ்க்காணும் அணுக்களுக்கும் அயனிகளுக்கும் நூயியடையாளங்களை எழுதுக: $S, S^{2-}, Al, Al^{3+}, H, H^-$.
- 4.4. கீழ்க்காணும் மூலக்கூறுகளுக்கும் அயனிகளுக்கும் நூயிக்கட்டமைப்பை எழுதுக: $H_2S, SiCl_4, BeF_2, CO_3^{2-}, HCOOH$.
- 4.5. எண்வலிதியை வரையறுத்து, அதன் முக்கியத்துவத்தையும் செல்வரம்புகளையும் எழுதுக.
- 4.6. அயனிப்பிணைப்பு உருவாவதற்கு சாதகமான காரணிகளை எழுதுக.
- 4.7. கீழ்க்காணும் மூலக்கூறுகளின் வடிவங்களை பிவெசோவியொப்புருவை பயன்படுத்தி உரையாற்று. $BeCl_2, BCl_3, SiCl_4, AsF_5, H_2S, PH_3$.
- 4.8. NH_2, H_2O ஆகிய இரண்டின் வடிவங்கள் பிறழ்ந்த நான்முகியாக இருப்பினும், நீரில் பிணைப்புக்கோணம் அம்மோனியாவில் இருப்பதைவிட குறைவானது. உரையாற்று.
- 4.9. பிணைப்புவலிமையை பிணைப்புமுறைமையின்வழி எவ்வாறு எழுதலாம்?
- 4.10. பிணைப்புநீளத்தை வரையறுக்க.
- 4.11. ஒத்தலைவின் முக்கியக்கூறுகளை CO_3^{2-} அயனியின் சூழமைவில் விளக்குக.
- 4.12. H_2PO_3 ஐ கீழே 1, 2 என்று குறித்த கட்டமைப்புகளால் குறிப்பிடலாம். இந்த இரண்டையும் H_2PO_3 ஐ குறிப்பிடும் ஒத்தலைவுக்கலப்பினத்தின் முறையேற்பு வடிவங்களாக கொள்ளலாமா? இல்லையெனில், காரணங்கூறுக.



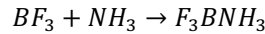
- 4.13. SO_3 , NO_2 , NO_3^- ஆகியவற்றின் ஒத்தலைவுக்கட்டமைப்புகளை எழுதுக.
- 4.14. கீழ்க்காணும் அணுக்களிடையில் எதிர்மின்னிமாற்றல் நிகழ்ந்து நேரயனியும் எதிரயனியும் உருவாவதை நூயியடையாளங்களாக காட்டுக: (அ) K, S (ஆ) Ca, O (இ) Al, N .
- 4.15. CO_2 , H_2O ஆகிய இரண்டும் மூலமூலக்கூறுகளாயினும், H_2O மூலக்கூறின் வடிவம் வளைந்ததும் CO_2 மூலக்கூறு நேரியமானதும் ஆகின்றன. இதை இருமுனைத்திருப்புமையின் அடிப்படையில் விளக்குக.
- 4.16. இருமுனைத்திருப்புமையின் முக்கியத்துவத்தையும் பயன்பாடுகளையும் எழுதுக.
- 4.17. மின்னெதிர்மையை வரையறுக்க. இது எதிர்மின்னிபெறும் அகவெப்பத்திலிருந்து எவ்வாறு வேறுபடுகிறது?
- 4.18. முனையவுடன்பிணைப்பை பொருத்தமான சான்றுகளால் விளக்குக.
- 4.19. LiF , K_2O , N_2 , SO_2 , ClF_3 ஆகிய மூலக்கூறுகளை அயனித்தன்மையின் ஏறுமுறைமையில் எழுதுக.
- 4.20. CH_3COOH இன் கீழ்க்காணும் சட்டக்கட்டமைப்பு சரியானது; ஆனால் சில பிணைப்புகள் தவறாக காட்டப்பட்டுள்ளன. அசிறுறிகவமிலத்தின் சரியான நூயிக்கட்டமைப்பை எழுதுக.



- 4.21. நான்முகிவடிவத்தைத்தவிர, CH_4 மூலக்கூறுக்கு சாத்தியமான மற்றொரு வடிவம் நான்கு H அணுக்களும் ஒரு சதுரத்தின் மூலையிலும் C அணு அதன் மையத்திலும் இருக்கும்படியான தளச்சதுரம். CH_4 தளச்சதுரமாக ஏன் இல்லை என்பதை விளக்குக.
- 4.22. $Be - H$ பிணைப்பு முனையமானது எனினும் BeH_2 மூலக்கூறு சுழிய இருமுனைத்திருப்புமையுள்ளது என்பதை விளக்குக.
- 4.23. NH_3 , NF_3 ஆகியவற்றில் எது அதிக இருமுனைத்திருப்புமையுள்ளது? ஏன்?
- 4.24. அணுப்பரிதியங்களின் கலப்பினமாதல் என்பதன் பொருள் என்ன? sp , sp^2 , sp^3 ஆகிய கலப்பினப்பரிதியங்களின் வடிவங்களை விளக்குக.
- 4.25. கீழ்க்காணும் வேதிவினையில் Al அணுவின் கலப்பினமாதலில் ஏதும் மாற்றம் ஏற்பட்டால் அதை விவரிக்க.



- 4.26. கீழ்க்காணும் வேதிவினையின் விளைவாக, B, N அணுக்களின் கலப்பினமாதலில் எதும் மாற்றங்கள் இருக்கின்றனவா?



- 4.27. C_2H_4 மூலக்கூறிலும் C_2H_2 மூலக்கூறிலும் கரிமவணுக்களிடையில் இரட்டைப் பிணைப்பும் மும்மப்பிணைப்பும் உருவாவதை காட்டும் வரைபடங்களை வரைக.
- 4.28. கீழ்க்காணும் மூலக்கூறுகளிலுள்ள சகரப்பகரப்பிணைப்புகளின் எண்ணிக்கைகள் யாவை? (அ) C_2H_2 (ஆ) C_2H_4 .
- 4.29. x அச்சை அணுக்கருவிடையச்சாக கருதினால் கீழ்க்காண்பவற்றில் எவை சகரப்பிணைப்பை உருவாக்காதவை? ஏன்? (அ) $1s, 2s$ (ஆ) $1s, 2p_x$ (இ) $2p_y, 2p_z$ (ஈ) $1s, 2s$.

- 4.30. கீழ்க்காணும் மூலக்கூறுகளில் எந்தெந்த கலப்பினப்பரிதியங்களை கரிமவணுக்கள் பயன்படுத்துகின்றன? (அ) $CH_3 - CH_3$ (ஆ) $CH_3 - CH = CH_2$ (இ) $CH_3 - CH_2 - OH$ (ஈ) $CH_3 - CHO$ (உ) CH_3COOH .
- 4.31. எதிர்மின்னிகளின் பிணைப்புச்சோடிகள், தனிச்சோடிகள் என்பனவற்றின் பொருள் என்ன? ஒவ்வொரு வகையையும் ஒரு சான்றால் எடுத்துக்காட்டுக.
- 4.32. சகரப்பிணைப்புக்கும் பகரப்பிணைப்புக்கும் வேறுபாடுகாண்க.
- 4.33. உடன்பிணைப்புக்கோட்பாட்டின் அடிப்படையில் H_2 மூலக்கூறு உருவாவதை விளக்குக.
- 4.34. மூலக்கூறுபரிதியங்கள் உருவாக அணுப்பரிதியங்கள் சேர்வதற்கான முக்கியமான வரைக்கட்டுகளை எழுதுக.
- 4.35. மூலக்கூறுபரிதியக்கோட்பாட்டை பயன்படுத்தி Be_2 மூலக்கூறு ஏன் இல்லை என்பதை விளக்குக.
- 4.36. கீழ்க்காணும் இனங்களின் ஒப்பளவ நிலைப்புமையை ஒப்பிட்டு, அவற்றின் காந்தப்பண்புகளையும் குறிக்க: O_2 , O_2^+ , O_2^- (மேலாக்குசைடு), O_2^{2-} (அதியாக்குசைடு)
- 4.37. பரிதியங்களின் குறியீட்டில் காட்டப்படும் நேர்மக்குறி, எதிர்மக்குறி ஆகியவற்றின் முக்கியத்துவம் யாது?
- 4.38. PCl_5 இலுள்ள கலப்பினமாதலை விவரிக்க. அச்சப்பிணைப்புகள் நடுக்கோட்டுப்பிணைப்புகளைவிட நீளமாயிருப்பதேன்?
- 4.39. ஐதரசப்பிணைப்பை வரையறுக்க. இது வாண்டர்வால்சின் விசைகளைவிட வலிமையானதா வலுகுறைந்ததா?
- 4.40. பிணைப்புமுறைமை என்பதன் பொருள் என்ன? N_2 , O_2 , O_2^+ , O_2^- ஆகியவற்றின் பிணைப்புமுறைமைகளை கணக்கிடுக.