

APPOLO STUDY CENTRE

PHYSICS
TEST - 6

11 th Chemistry	Unit 3	தனிமங்களின் ஆவர்த்தன வகைப்பாடு -F
	Unit 9	கரைசல்கள்
	Unit 10	வேதிப் பிணைப்புகள்



11- வது வேதியியல் - I

அலகு 3

தனிமங்களின் ஆவர்த்தன வகைப்பாடு

பாட அறிமுகம்

இயற்கையில் கிடைக்கும் நூற்றுக்கும் குறைவான தனிமங்களிலிருந்தே உருவான பல்வேறு இயைபுகள் மற்றும் பண்புகளைக் கொண்ட பல மில்லியன் வேதிச் சேர்மங்கள் இப்புவிப்பில் காணப்படுகின்றன.

தனிமங்கள் கண்டறியப்பட்ட நிகழ்வு, மனித நாகரீக வளர்ச்சியுடன் தொடர்புபடுத்தக் கூடியது. கற்காலத்தில் மனிதர்கள் தங்கள் தேவைகளுக்காக சில உலோகங்களை அவைகள் தனிமங்கள் என்று அறிந்திருக்காமலேயே பயன்படுத்தினார்கள். பின்னர், விரைவிலேயே தாதுக்களிலிருந்து தனிமங்களைப் பிரித்தெடுத்தல் மற்றும் அதனை தங்கள் தினசரி வாழ்வில் பயன்படுத்துதலை அறிந்து கொண்டார்கள். காலப்போக்கில் அதிக எண்ணிக்கையிலான தனிமங்கள் கண்டறியப்பட்டன. பல்வேறு சோதனை ஆய்வுகளின் அடிப்படையில், பிரான்ஸ் நாட்டைச் சார்ந்த லவாய்ஸியர் 23 தனிமங்கள் கொண்ட முதல் வேதி தனிமங்களின் பட்டியலினை 1789 ல் வெளியிட்டார். இவர் பொருட்களை தனிமங்களின் நான்கு வகை தொகுப்புகளாக வகைப்படுத்தினார். அவையாவன: அமிலத்தை உருவாக்கும் தனிமங்கள், வாயுக்களை ஒத்த தனிமங்கள், உலோகதனிமங்கள் மற்றும் புவிப்படிப்பு தனிமங்கள்.

லவாய்ஸியர் அட்டவணை

அமிலத்தை உருவாக்கும் தனிமங்கள்	வாயுக்களை ஒத்த தனிமங்கள்
கந்தகம் (Sulphur)	ஒளி (light)
பாஸ்பரஸ் (phosphorus)	வெப்பம் caloric (heat)
மரக்கரி charcoal (carbon)	ஆக்சிஜன் oxygen
	நைட்ரஜன் azote (nitrogen)
	ஹைட்ரஜன் (hydrogen)

உலோக தனிமங்கள்	புவிப்படிப்பு தனிமங்கள்
கோபால்ட், பாதரசம், வெள்ளியம், (cobalt, mercury, tin)	சுட்ட சுண்ணாம்பு lime (calcium oxide)
தாமிரம், நிக்கல், இரும்பு (copper, nickel, iron)	மெக்னீசியம் ஆக்சைடு Magnesia(magnesium oxide)
தங்கம், காரீயம், வெள்ளி, துத்தநாகம். (gold, lead, silver, Zinc)	பேரியம் சல்பேட் barytes (barium sulphate)
மாங்கனீசு டங்ஸ்டன் (manganese tungsten)	argilla (aluminium oxide)
பிளாட்டினம் Platina (Platinum)	சிலிக்கன் டை ஆக்சைடு Silex (Silicon dioxide)

3.1 தனிமங்களை வகைப்படுத்துதல்:

19 ஆம் நூற்றாண்டில், அறிவியல் அறிஞர்கள் பல்வேறு தனிமங்களைப் பிரித்தெடுத்தனர். இதன் மூலம் கண்டறியப்பட்ட தனிமங்களின் எண்ணிக்கை அதிகரித்தது. தற்போது நாம் 118 தனிமங்களைக் கண்டறியப் பெற்றிருக்கின்றோம். இந்த 118 தனிமங்களில் அணு எண் 1 முதல் 92 வரையுள்ள தொண்ணூற்று இரண்டு தனிமங்களும் இயற்கையில் கிடைக்கின்றன. இவற்றில் சில தனிமங்களுக்கிடையே சில பண்புகளில் ஒற்றுமைத் தன்மை உள்ளதை அறிவியல் அறிஞர்கள்

கண்டறிந்தனர். இக் கண்டுபிடிப்பானது, தனிமங்களை அவற்றின் பண்புகளின் அடிப்படையில் வகைப்படுத்துவதற்கு என்ற கருத்து உருவாக காரணமாக அமைந்தது. தனிமங்களை அதிகம் பயன்படுத்துவதற்கு, அதனை வகைப்படுத்துதல், நன்மை தரத்தக்கதாக அமையும். தனிமங்களை வகைப்படுத்துவதற்கு பல்வேறு முயற்சிகள் மேற்கொள்ளப்பட்டன. எனினும் அணுநிறையின் அடிப்படையிலான வகைப்பாடு, தனிம வரிசை அட்டவணையினை சரியான வடிவில் உருவாக்குவதற்கு வழிவகை செய்தது.

1817 ல், J.W. டாபீனர், வேதிப்பண்புகளில் ஒத்துள்ள குளோரின், புரோமின், அயோடின் போன்ற தனிமங்களை மூன்று தனிமங்கள் கொண்ட ஒரு குழுவாக வகைப்படுத்தினார். இதனை அவர் மும்மைத் தொகுதி (triads) என அழைத்தார். மும்மைத் தொகுதியில் நடுவில் உள்ள தனிமத்தின் அணு நிறையானது, மற்ற இரு தனிமங்களின் அணு நிறைகளின் கூட்டுச் சராசரிக்கு ஏறத்தாழ சமமாக இருந்தது. எனினும் குறிப்பிட்ட சில தனிமங்களை மட்டுமே மும்மைத் தொகுதிகளாக வகைப்படுத்த முடிந்தது. ஏறத்தாழ ஒத்த அணு நிறைகளைப் பெற்றுள்ள [Fe, Co, Ni], [Ru, Rh, Pd], [Os, Ir, Pt] போன்ற மும்மைத் தொகுதிகளுக்கு இவ்வகைப்பாட்டுக் கொள்கையினைப் பயன்படுத்த இயலவில்லை.

அட்டவணை 3.2 டாபீனரின் மும்மைத் தொகுதி

வ.எண்	மும்மைத் தொகுதியில் உள்ள தனிமங்கள்	நடுவில் உள்ள தனிமத்தின் அணு நிறை	மற்ற இரு தனிமங்களின் அணு நிறைகளின் கூட்டுச் சராசரி
1	Li, Na, K	23	$\frac{7 + 39}{2} = 23$
2	Cl, Br, I	80	$\frac{35.5 + 127}{2} = 81.25$
3	Ca, Sr, Ba	88	$\frac{40 + 137}{2} = 88.5$

1862 ல் A.E.B. டி சான்கோர்டாய்ஸ், தனிமங்களின் பண்புகள், அவற்றின் அணுநிறையோடு கொண்டுள்ள ஒரு தொடர்பினை எடுத்துக் கூறினார். அவரது கூற்றுப்படி பொருட்களின் பண்புகள் அவற்றின் எண்களின் பண்புகளோடு தொடர்புடையது. இவர் அணு நிறையினை குறிப்பிட 'எண்கள்' என்ற வார்த்தையினைப் பயன்படுத்தினார். அடிப்பக்க சுற்றளவில் 16 அலகுகள் உடைய ஒரு உருளையின் செங்குத்து மைய அச்சிற்கு 45° கோணத்தில் ஒரு சுருளை (helix) அவர் உருவாக்கினார். உருளையின் மேற்பரப்பில் அச்சுருளின் வழியே தனிமங்களை, அவற்றின் அணு நிறைகளின் ஏறுவரிசையில் குறித்தார். சுருளின் ஒரு முழுச்சுற்று, அணுநிறை 16 அதிகரிப்பதற்குச் சமம். உருளையின் மேற்பரப்பில் சம இடைவெளிகளுடன் வரையப்பட்ட பதினாறு செங்குத்துக் கோடுகளில், ஒரே செங்குத்துக் கோட்டில் அமைந்துள்ள தனிமங்கள் ஒத்தப் பண்புகளைக் கொண்டிருந்தன. தனிம வரிசை அட்டவணையை உருவாக்குவருது தொடர்பான முயற்சிகளில் முதல் குறிப்பிடத்தக்க முயற்சி இதுவாகும். எனினும் இது அதிகளவில் கவனத்தை ஈர்ப்பதாக அமைந்திருக்கவில்லை.

1864 ல் J. நியூலண்ட் என்பவர் தனிமங்களை வகைப்படுத்தும் பொருட்டு எண்ம விதியினை முன் மொழிந்தார். தனிமங்களை அவற்றின் அணு நிறைகளின் ஏறுவரிசையில் அமைக்கும்போது, ஒவ்வொரு எட்டாவது தனிமத்தினுடைய பண்பும், முதலாவது தனிமத்தின் பண்புடன் ஒத்திருந்தது. இவ்விதி கால்சியம் வரையிலான இலேசான தனிமங்களுக்கு மட்டுமே சரியாக பொருந்தியது.

அட்டவணை 3.3 நியூலண்டின் எண்மங்கள்

⁷ Li	⁹ Be	¹¹ B	¹² C	¹⁴ N	¹⁶ O	¹⁹ F
²³ Na	²⁴ Mg	²⁷ Al	²⁹ Si	³¹ P	³² S	^{35.5} Cl
³⁹ K	⁴⁰ Ca					

3.1.1 மெண்டலீவின் வகைப்பாடு

அவரும் மற்ற அறிஞர்களும் இடம் விடப்பட்ட தனிமங்கள் பெற்றிருக்க வேண்டிய இயற்பியல் மற்றும் வேதிப்பண்புகளை நிர்ணயித்தனர். பின்னாளில் கண்டறியப்பட்ட தனிமங்களின் பண்புகள் ஏற்கனவே இடம் விடப்பட்ட தனிமங்களுக்கென நிர்ணயிக்கப்பட்ட பண்புகளோடு ஒத்துக் காணப்பட்டன.

எடுத்துக்காட்டாக, தொகுதி III ஐச் சார்ந்த காலியம் (Ga) மற்றும் தொகுதி IV ஐச் சார்ந்த ஜெர்மானியம் (Ge) ஆகியவை அக்காலத்தில் கண்டறியப்பட்டிருக்கவில்லை. ஆனால், மெண்டலீவ் அமைதி அமைதி இருப்பதற்கான சாத்தியக் கூறினையும், அவற்றின் பண்புகளையும் நிர்ணயித்திருந்தார். அவர் நிர்ணயித்திருந்த பண்புகளை பெற்ற தனிமங்களுக்கு அலுமினிய முன்தனிமம் (eka-aluminium) மற்றும் சிலிகன் முன் தனிமம் (eka-silicon) என பெயரிட்டார்.

சரியான தனிமங்கள் கண்டறியப்பட்ட பின்னர், அவைகளின் பண்புகள், மெண்டலீவ் பின்னால் முன் கூட்டியே நிர்ணயிக்கப்பட்ட பண்புகளுடன் ஏறத்தாழ ஒத்திருந்தன.

அலுமினிய முன் தனிமம் மற்றும் சிலிகன் முன் தனிமம் ஆகியவைகளுக்கு முன்கூட்டியே நிர்ணயிக்கப்பட்ட பண்புகள்.

வ. எண்	பண்பு	அலுமினிய முன் தனிமம் முன் கூட்டியே நிர்ணயிக்கப்பட்டது	காலியம் (கண்டறியப்பட்டது)	சிலிகன் முன் தனிமம் முன் கூட்டியே நிர்ணயிக்கப்பட்டது	ஜெர்மானியம் (கண்டறியப்பட்டது)
1	அணு நிறை	68	70	72	72.59
2	அடர்த்தி gcm^{-3}	5.9	5.94	5.5	5.35
3	உருகு நிலை	குறைவு	29.78°C	அதிகம்	947°C
4	ஆக்ஸைடன் வாய்ப்பாடு	E_2O_3	Ga_2O_3	EO_2	GeO_2
5	குளோரைடன் வாய்ப்பாடு	ECl_3	GaCl_3	ECl_4	GeCl_4

3.1.2 மெண்டலீவின் ஆவர்த்தன அட்டவணையில் உள்ள முரண்பாடுகள்

ஒத்த பண்புகளை உடைய தனிமங்கள் வெவ்வேறு தொகுதிகளிலும், வெவ்வேறு பண்புகளுடைய தனிமங்கள் ஒரே தொகுதியிலும் வைக்கப்பட்டிருந்தன. இதைப் போலவே ஆவர்த்தன விதிக்கு முரணாக, அதிக அணு நிறையுள்ள தனிமமானது குறைவான அணு நிறையுள்ள தனிமத்திற்கு முன்னதாகவே வைக்கப்பட்டிருந்தது.

எடுத்துக்காட்டாக டெலூரியம் (127.6) ஆறாவது (VI) தொகுதியிலும், அயோடின் (127) ஏழாவது(VII)தொகுதியிலும் வைக்கப்பட்டிருந்தன. $^{58.7}\text{Ni}_{28}$ க்குமுன்னதாக $^{58.7}\text{Ni}_{28}$ வைக்கப்பட்டிருந்தது

3.2. மோஸ்லே ஆய்வும், நவீன ஆவர்த்தன விதியும்

1913 -ல் ஹென்றி மோஸ்லே, பல்வேறு தனிமங்களை அதிக ஆற்றலுடைய எலக்ட்ரான்களைக் கொண்டு மோதச் செய்து அதன் மூலம் உருவான சிறப்பு X கதிர் நிறமாலையினை ஆய்வு செய்தார். இதில் தனிமங்களின் அணு எண்ணிற்கும் உமிழப்பட்ட சிறப்பு X-

கதிர்களின் அதிர்வெண்ணிற்கும் நேர்கோட்டு தொடர்பு இருப்பதை அவர் கண்டறிந்தார். இத்தொடர்பினை பின்வருமாறு குறிப்பிட்டார்.

$$\sqrt{\nu} = a(Z - b)$$

இங்கு ν என்பது 'Z' என்ற அணு எண் கொண்ட தனிமத்தினால் உமிழப்பட்ட 'X' கதிரின் அதிர்வெண் 'a' மற்றும் 'b' ஆகியன மாறிலிகள். மேலும் அனைத்துத் தனிமங்களுக்கும் 'a' மற்றும் 'b' ஆகியன ஒரே மதிப்புகளைப் பெற்றிருக்கும்.

$\sqrt{\nu}$ மற்றும் Z க்கு இடையேயான வரைபடம் ஒரு நேர் கோட்டினைத்தரும், இத்தொடர்பினைப் பயன்படுத்தி புதிய தனிமம் ஒன்று வெளியிடும் சிறப்பு X-கதிரின் அதிர்வெண்ணைக் கொண்டு, அத்தனிமத்தின் அணு எண்ணைக் கண்டறிய இயலும்.

மோஸ்லேயின் இந்த ஆய்வின் படி, நவீன ஆவர்த்தன விதி உருவாக்கப்பட்டது. இவ்விதியின்படி “தனிமங்களின் இயற் மற்றும் வேதிப்பண்புகள் அவற்றின் அணு எண்களின் ஆவர்த்தன சார்பாக அமைகின்றன.” இக்கூற்று நவீன ஆவர்த்தன விதி என்றழைக்கப்படுகிறது. இவ்விதியின் அடிப்படையில், தனிமங்கள் அவற்றின் அணுஎண்களின் ஏறுவரிசையில் வரிசைப்படுத்தப்பட்டன. இம்முறையில் வரிசைப்படுத்தப்படும்பொழுது ஒரு குறிப்பிட்ட இடைவெளிக்கு பின்னர் ஒத்த பண்புகளை கொண்ட தனிமங்கள் இடம்பெறுகின்றன என்று அறிய முடிந்தது. சீரான இடைவெளிகளில் தனிமங்கள் அவற்றின் இயற் மற்றும் வேதிப்பண்புகளில் ஒத்திருப்பது ஆவர்த்தன தன்மை என்றழைக்கப்படுகிறது.

3.2.1. நவீன ஆவர்த்தன அட்டவணை

தனிமங்களின் இயற் மற்றும் வேதிப்பண்புகள், அத்தனிமங்களின் வெளிக்கூட்டில் காணப்படும் எலக்ட்ரான் அமைப்போடு தொடர்புடையது. வெவ்வேறு தனிமங்கள் தங்களது வெளிக்கூட்டில் ஒத்த எலக்ட்ரான் அமைப்பினை பெற்றிருப்பின் அவற்றின் பண்புகளும் ஒத்திருக்கும். எடுத்துக்காட்டாக தங்களின் இணைதிறக்கூட்டில் உள்ள s ஆர்பிட்டாலில் ஒரு எலக்ட்ரானைப் பெற்றுள்ள தனிமங்கள் அவைகளின் இயற் மற்றும் வேதிப் பண்புகளில் ஒத்துக் காணப்படுகின்றன. நவீன ஆவர்த்தன அட்டவணையில் இத்தனிமங்கள் அனைத்தும் ஒன்றாக ஒரே தொகுதியில் ஒருங்கிணைக்கப்பட்டு முதல் தொகுதி தனிமங்கள் என அழைக்கப்படுகின்றன.

அட்டவணை 3.6 கார உலோகங்களின் எலக்ட்ரான் அமைப்பு (ns^{-1})

தொகுதி 1ல் உள்ள தனிமங்கள்	அணு எண்	K, L, M, N, O, P வரிசையில் இணைதிற கூட்டில் உள்ள எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை	இணைத்திற கூட்டின் எலக்ட்ரான் அமைப்பு
Li	3	2,1	$2s^1$
Na	11	2,8,1	$3s^1$
K	19	2,8,8,1	$4s^1$
Rb	37	2,8,18,8,1	$5s^1$
Cs	55	2,8,18,18,8,1	$6s^1$
Fr	87	2,8,18,32,18,8,1	$7s^1$

கருத்துக்களை கேட்டறிந்த பின்னர் IUPAC யால் அங்கீகரிக்கப்படும். இந்த இடைப்பட்டக் காலத்தில் புதிதாக கண்டறியப்பட்ட தனிமானது IUPAC விதிகளின் அடிப்படையில், தற்காலிக பெயரால் அழைக்கப்படும்.

1. புதியதாக கண்டறியப்பட்ட தனிமத்தின் அணு எண்ணிலிருந்து நேரடியாக பெயருக்கான எண்சார் மூலம் (Numerical root) வருவிக்கப்படுகிறது.

அட்டவணை – 3.8: அணு எண் 100 ஐ விட அதிகம் பெற்றுள்ள தனிமங்களுக்கு IUPAC முறையில் பெயரிடுவக்கான குறியீடு

இலக்கம்	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
மூலம்	Nil	Un	Bi	Tri	Quad	Pent	Hex	Sept	Oct	enn
சுருக்கப்பெயர் (Abbreviation)	N	U	B	T	Q	P	H	S	O	e

2. அணு எண்ணிற்கு இணையான எண் மூலங்கள் ஒன்றாக்கப்பட்டு 'ium' பிற்சேர்க்கையாக எழுதப்படுகிறது.
3. 'enn' ஆனது 'nil' முன்னர் எழுதப்படும் போது, 'enn' ன் இறுதியில் உள்ள 'n' எழுதாமல் விடப்படுகிறது. (enn+nil=enil) இதைப்போலவே 'ium' க்கு முன்னர் 'bi' மற்றும் 'tri' ஆகியவை எழுதப்படும் போது அவற்றின் இறுதியில் உள்ள 'i' எழுதாமல் விடப்படுகிறது. (bi+ium= bium; tri+ium=trium)
4. எண் சார் மூலங்களின் முதல் எழுத்துகளிலிருந்து புதிய தனிமத்தின் குறியீடு உருவாக்கப்படுகிறது. இதனை கீழ்க்கண்டுள்ள அட்டவணை எடுத்துக்காட்டுடன் விளக்குகிறது.

அட்டவணை 3.9 அணு எண் 100 ஐ விட அதிகமுடைய தனிமங்களுக்கான பெயர்கள்

அணு எண்	தற்காலிகப் பெயர்	தற்காலிகக் குறியீடு	தனிமத்தின் பெயர்	தனிமத்தின் குறியீடு
101	Unnilunium	Unu	Mendelevium	Md
102	Unnilbium	Unb	Nobelium	No
103	Unniltrium	Unt	Lawrencium	Lr
104	Unnilquadium	Unq	Rutherfordium	Rf
105	Unnilpentium	Unp	Dubnium	Db
106	Unnilhexium	Unh	Seaborgium	Sg
107	Unnilseptium	Uns	Bohrium	Bh
108	Unniloctium	Uno	Hassium	Hs
109	Unnilennium	Une	Meitnerium	Mt
110	Ununnilium	Uun	Darmstadtium	Ds
111	Ununnilium	Uuu	Roentgenium	Rg
112	Ununbium	Uub	Copernicium	Cn
113	Ununtrium	Uut	Nihonium	Nh
114	Ununquadium	Uuq	Flerovium	Lv
115	Ununpentium	Uup	Moscovium	Ts
116	Ununhexium	Uuh	Livermorium	Lv
117	Ununseptium	Uus	Tennessine	Ts
118	Ununoctium	Uuo	Oganesson	Og

3.4 எலக்ட்ரான் அமைப்பின் அடிப்படையில் தனிமங்களை தொகுதிபடுத்துதல்

நவீன ஆவர்த்தன விதியின் அடிப்படையில் நவீன தனிமவரிசை அட்டவணையில் தனிமங்கள் 7 – வரிசைகளிலும், 18 – தொகுதிகளிலும் வைக்கப்பட்டுள்ளன. தனிமங்களை குறிப்பிட்ட இடத்தில் அமைத்தல் என்பது அதன் வெளிக்கூட்டு எலக்ட்ரான் அமைப்போடு நெருங்கிய தொடர்பு கொண்டது. தனிம வரிசை அட்டவணையின் தொடரிலும், தொகுதியிலும் எலக்ட்ரான் அமைப்பு எவ்வாறு மாறுபடுகின்றது என்பதை நாம் ஆய்ந்து அறிவோம்.

3.4.1. வரிசைகளில் எலக்ட்ரான் அமைப்பில் ஏற்படும் மாறுபாடு

ஒவ்வொரு வரிசையும் 'ns¹' என்ற வெளிக்கூட்டு எலக்ட்ரான் அமைப்புடைய தனிமத்தில் துவங்கி 'ns², np⁶' என்ற வெளிக்கூட்டு எலக்ட்ரான் அமைப்புடைய தனிமத்துடன் நிறைவு பெறுகிறது என நாம் முன்னரே அறிவோம். இங்கு 'n' என்பது முதன்மைக்குவாண்டம் எண் ஆகும். முதல் வரிசையில் இணைதிற எலக்ட்ரான்கள் நிரப்பப்படுவது 1s ஆர்பிட்டாலில் துவங்குகிறது. இந்த ஆர்பிட்டாலில் அதிகப்பட்சமாக இரு எலக்ட்ரான்கள் மட்டுமே இடம் பெற முடியும். எனவே முதல் வரிசையில் இரு தனிமங்கள், அதாவது ஹைட்ரஜன் மற்றும் ஹீலியம் ஆகிய இரண்டு தனிமங்கள் மட்டுமே இடம் பெறுகின்றன. இரண்டாவது வரிசையில் இணைதிற எலக்ட்ரான்கள் நிரப்பப்படுவது 2s ஆர்பிட்டாலில் துவங்கி பின்னர் 2p ஆர்பிட்டால்களிலும் தொடர்கின்றன. இதில் லித்தியம் முதல் நியான் வரையிலான எட்டு தனிமங்கள் இடம் பெறுகின்றன.

முன்றாவது வரிசையில் இணைதிற எலக்ட்ரான்கள் நிரப்பப்படுவது 3s ஆர்பிட்டாலில் துவங்கி பின்னர் 3p ஆர்பிட்டால்களிலும் தொடர்கின்றன. நான்காவது வரிசையில் இணைதிற எலக்ட்ரான்கள் முதலில் 4s ஆர்பிட்டாலிலும், பின்னர் 3d மற்றும் 4p ஆர்பிட்டால்களிலும் ஆ.பா தத்துவத்தின் அடிப்படையில் நிரப்பப்படுகின்றன. இதைப் போன்றே பிற வரிசைகளின் எலக்ட்ரான் அமைப்பினை நாம் விளக்க இயலும்.

அட்டவணை – 3.10 வரிசைகளில் உள்ள தனிமங்களின் எலக்ட்ரான் அமைப்பு

வரிசைகளின் எண் (n)	ஆர்பிட்டால்களில் எலக்ட்ரான்கள் நிரப்பப்படுதல்		வரிசையில் இடம் பெற்றுள்ள தனிமங்களின் எண்ணிக்கை	வெளிக்கூட்டு எலக்ட்ரான் அமைப்பு	
	துவங்குதல்	நிறைவடைதல்		முதல் தனிமம்	இறுதி தனிமம்
1	1s	1s	2	H – 1s ¹	He – 1s ²
2	2s	2p	8	Li – 2s ¹	Ne – 2s ² 2p ⁶
3	3s	3p	8	Na – 3s ¹	Ar – 3s ² 3p ⁶
4	4s	3d → 4p	18	K – 4s ¹	Kr – 4s ² 4p ⁶
5	5s	4d → 5p	18	Rb – 5s ¹	Xe – 5s ² 5p ⁶
6	6s	4f → 5d → 6p	32	Cs – 6s ¹	Rn – 6s ² 6p ⁶
7	7s	5f → 6d → 7p	32	Fr – 7s ¹	Og – 7s ² 7p ⁶

நான்காவது வரிசையில் 3d ஆர்பிட்டால்களில் இணைதிற எலக்ட்ரான்கள் நிரம்புதல் ஸ்னீடியத்திலிருந்து துவங்கி துத்தநாகத்தில் (zinc-ல்) நிறைவடைகிறது. இந்த 10 தனிமங்களையும் உள்ளடக்கிய வரிசை முதல் இடைநிலைத் தனிம வரிசை என அழைக்கப்படுகிறது. இதைப் போலவே அடுத்தடுத்த வரிசைகளில் 4d, 5d மற்றும் 6d ஆர்பிட்டால்களில் இணைதிற எலக்ட்ரான்கள்

நிரப்பப்படுகின்றன. இவ்வரிசைகள் முறையே இரண்டாம், மூன்றாம் மற்றும் நான்காம் இடைநிலை வரிசைகள் என்றழைக்கப்படுகின்றன.

ஆறாவது வரிசையில் இணைகிற எலக்ட்ரான்கள் நிரப்பப்படுவது 6s ஆர்பிட்டாலில் துவங்கி பின்னர் 4f, 5d மற்றும் 6p ஆர்பிட்டால்களில் நிரப்பப்படுகின்றன. 4f ஆர்பிட்டால்கள் நிரப்பப்படுவது சீரியத்தில் ($Z=58$) துவங்கி லூட்டீசியத்தில் ($Z=71$) நிறைவடைகின்றன. இந்த 14 தனிமங்களையும் உள்ளடக்கிய வரிசை முதல் உள் இடைநிலைத்தனிம வரிசையாகும். இத்தனிமங்கள் லாந்தனைடுகள் என்றழைக்கப்படுகின்றன. இதைப்போலவே ஏழாவது வரிசையில் 5f ஆர்பிட்டால்கள் நிரப்பப்படுகின்றன. இந்த 14 தனிமங்களை உள்ளடக்கிய வரிசை ஆக்டினைடுகள் என்றழைக்கப்படுகின்றன. இந்த இரு வரிசைகளும் நவீன தனிமவரிசை அட்டவணையில் தனியே அடிப்பாகத்தில் வைக்கப்பட்டுள்ளன.

3.4.2. தொகுதிகளில் எலக்ட்ரான் அமைப்பில் ஏற்படும் மாறுபாடு

ஒரு தொகுதியில் உள்ள தனிமங்கள் அனைத்தும் அவற்றின் வெளிக்கூட்டில், ஒத்த எலக்ட்ரான் அமைப்பினைப் பெற்றுள்ளன. அட்டவணை (3.11) ல் பதினெட்டு தொகுதிகளுக்கான பொதுவான வெளிக்கூட்டு எலக்ட்ரான் அமைப்பு கொடுக்கப்பட்டுள்ளது. தனிமங்களின் கடைசி இணைதிற எலக்ட்ரான் சென்று சேரக்கூடிய ஆர்பிட்டாலின் அடிப்படையில் தனிமங்களை s,p,d மற்றும் f தொகுதி தனிமங்கள் என வகைப்படுத்தலாம்.

தொகுதி-1 மற்றும் தொகுதி -2ல் உள்ள தனிமங்கள் s-தொகுதி தனிமங்கள் என்றழைக்கப்படுகின்றன. இவற்றின் கடைசி இணைதிற எலக்ட்ரான்கள் ns ஆர்பிட்டாலில் சென்று சேர்கிறது. தொகுதி - 1 ஐச் சேர்ந்த தனிமங்கள் கார உலோகங்கள் என்றும் தொகுதி - 2 ஐச் சேர்ந்த தனிமங்கள் காரமண் உலோகங்கள் என்றும் அழைக்கப்படுகின்றன. இவைகள் குறைந்த கொதிநிலை, மற்றும் உருகு நிலையினைப் பெற்றிருப்பதுடன், குறைவான அயனியாக்கும் ஆற்றலையும் பெற்றுள்ள மென்மையான உலோகங்கள் ஆகும். இவைகள் அதிக வினைத்திறனைப் பெற்றிருக்கின்றன மேலும் அயனிச்சேர்மங்களை உருவாக்குகின்றன. இத்தனிமங்கள் அதிக எலக்ட்ரான் நேர்மின்தன்மையையும் மற்றும் தீச்சுடரில் நிறத்தினை ஏற்படுத்தும் தன்மையினையும் பெற்றிருக்கின்றன. இத்தனிமங்களின் பண்புகளைப் பற்றி அடுத்தடுத்த பாடப்பகுதிகளில் விரிவாக அடிப்போம்.

தொகுதி -13 முதல் 18 வரையிலான தனிமங்கள் p-தொகுதி தனிமங்கள் அல்லது பிரதிநிதித்துவ தனிமங்கள் என்றழைக்கப்படுகின்றன. இத்தனிமங்களின் பொதுவான வெளிக்கூட்டு எலக்ட்ரான் அமைப்பு ns^2, np^{1-6} ஆகும். 16 மற்றும் 17 ம் தொகுதி தனிமங்கள் முறையே சால்கொஜன்கள் மற்றும் ஹாலஜன்கள் என்றழைக்கப்பட்கின்றன. 18 ம் தொகுதித் தனிமங்கள் முழுமையாக நிரப்பப்பட்ட இணைதிற கூட்டு எலக்ட்ரான் அமைப்பினை ($ns^2 np^6$) பெற்றுள்ளன. இவைகள் மந்த வாயுக்கள் (inert gases) அல்லது உயரிய வாயுக்கள் (noble gases) என அழைக்கப்படுகின்றன. p-தொகுதி தனிமங்கள் அதிகமான எதிர்க்குறி எலக்ட்ரான்கவர்தன்மை மதிப்புகளைப் பெற்றுள்ளன. s-தொகுதி தனிமங்களைக் காட்டிலும் இவற்றின் அயனியாக்கும் ஆற்றல் மதிப்பு அதிகம். இவைகள் பெரும்பாலும் சகப்பிணைப்புச் சேர்மங்களை உருவாக்குகின்றன. மேலும் இவைகள் உருவாக்கும் பல்வேறு சேர்மங்களில் ஒன்றுக்கும் மேற்பட்ட ஆக்சிஜனேற்ற நிலைகள் காணப்படுகின்றன.

தொகுதி -3 முதல் 12 வரையில் உள்ள தனிமங்கள் d தொகுதித் தனிமங்கள் அல்லது இடைநிலைத் தனிமங்கள் என்று அழைக்கப்படுகின்றன. இத்தனிமங்களின் பொதுவான இணைதிற கூட்டு எலக்ட்ரான் அமைப்பு $ns^{1-2}, (n-1) d^{1-10}$ ஆகும். இத்தனிமங்களும் ஒன்றிற்கும் மேற்பட்ட மாறுபடும் ஆக்சிஜனேற்ற நிலைகளைப் பெற்றுள்ளன. இவைகள் அயனிச் சேர்மங்கள், கசப்பிணைப்புச் சேர்மங்கள் மற்றும் ஈதல் சகப்பிணைப்புச் சேர்மங்களை உருவாக்கும் தன்மையினைப் பெற்றுள்ளன. இவைகள் அணிக்கோவை இடைவெளிச் சேர்மங்கள் (interstitial compounds) மற்றும் உலோகக் கலவைகளை உருவாக்குகின்றன. இவற்றின் உலோகக் கலவைகள் வினையூக்கிகளாகவும் செயல்படும் தன்மையினைப் பெற்றுள்ளன. இந்த தனிமங்கள் அதிக உருகுநிலையை பெற்றிருப்பதுடன் வெப்பம் மற்றும் மின்சாரத்தை நன்கு கடத்தும் கடத்திகளாகவும் செயல்படுகின்றன.

லாந்தனைடுகள் ($4f^{1-14}, 5d^{0-1}, 6s^2$) மற்றும் ஆக்டினைடுகள் ($5f^{0-14}, 6d^{0-2}, 7s^2$) ஆகியன f-தொகுதி தனிமங்கள் என்றழைக்கப்படுகின்றன. இத்தகைய தனிமங்கள் உலோகத் தன்மையினையும்,

அதிக உருகு நிலையினையும் கொண்டுள்ளன. இவற்றின் சேர்மங்கள் பெரும்பாலும் நிறமுடையவை. இத்தனிமங்களும் மாறுபட்ட ஆக்சிசனேற்ற நிலைகளைப் பெற்றுள்ளன.

அட்டவணை 3.11 தொகுதிகளில் உள்ள தனிமங்களின் பொதுவான வெளிக்கூட்டு எலக்ட்ரான் அமைப்பு

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
ns^1	ns^2	$ns^2(n-1)d^1$	$ns^2(n-1)d^2$	$ns^2(n-1)d^3$	$ns^2(n-1)d^5$	$ns^2(n-1)d^5$	$ns^2(n-1)d^6$	$ns^2(n-1)d^7$	$ns^2(n-1)d^8$	$ns^2(n-1)d^{10}$	$ns^2(n-1)d^{10}$	$ns^2 np^1$	$ns^2 np^2$	$ns^2 np^3$	$ns^2 np^4$	$ns^2 np^5$	$ns^2 np^6$
s- தொகுதி தனிமங்கள்		d-தொகுதி தனிமங்கள்										p- தொகுதி தனிமங்கள்					
f-தொகுதி தனிமங்கள்		ஓந்தகனனருகள் $4f^{1-14} 5d^{0-1} 6s^2$ ஆக்டினைருகள் $5f^{0-14} 6d^{0-2} 7s^2$															

3.5. ஆவர்த்தன பண்புகளில் காணப்படும் ஆவர்த்தனத் தொடர்பு

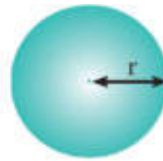
முன்னரே விவிரித்துள்ளவாறு, தனிமங்களின் அணு எண் அதிகரிக்கும் போது, அவற்றின் எலக்ட்ரான் அமைப்பில் காணப்படும் ஆவர்த்தனத் தன்மையினைப் போல, தனிமங்களின் இயற் மற்றும் வேதிப் பண்புகளிலும் ஆவர்த்தனத் தன்மை காணப்படுகிறது. இப்பாடப்பகுதியில் பின்வரும் பண்புகளில் காணப்படும் ஆவர்த்தனத் தன்மையினை நாம் கற்போம்.

1. அணு ஆரம்
2. அயனி ஆரம்
3. அயனியாக்கும் எந்தால்பி (ஆற்றல்)
4. எலக்ட்ரான் நாட்டம் (எலக்ட்ரான் ஏற்கும் எந்தால்பி)
5. எலக்ட்ரான் கவர் தன்மை

3.5.1. அணு ஆரம்

ஒரு அணுவின் அணு ஆரம் என்பது அதன் அணுக்கருவின் மையத்திற்கும், இணைதிற எலக்ட்ரான் உள்ள வெளிக்கூட்டிற்கும் இடையேயான தூரம் என வரையறுக்கப்படுகிறது.

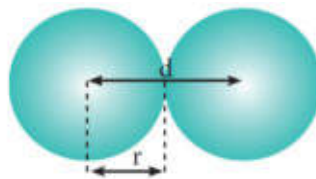
ஒரு தனித்த அணுவின் ஆரத்தினை நேரடியாக அளவிட இயலாது. மந்த வாயுக்களைத் தவிர்த்து, வழக்கமாக அணு ஆரம் என்பது தொடர்புடைய அணுக்களுக்கிடையே காணப்படும் பிணைப்பின் தன்மையினைப் பொறுத்து, சகப்பிணைப்பு ஆரம் அல்லது உலோக ஆரத்தினைக் குறிப்பிடுகின்றது.



அணு ஆரம்

சகப்பிணைப்பு ஆரம்

ஒற்றை சகப்பிணைப்பால் பிணைக்கப்பட்டுள்ள இரண்டு ஒத்த அணுக்களின் அணுக்கருக்களுக்கு இடையேயான தொலைவின் பாதியளவு சகப்பிணைப்பு ஆரம் என்றழைக்கப்படுகிறது. அணுக்கருக்களுக்கு இடைப்பட்ட தொலைவு x கதிர் விளிம்பு விளைவு ஆய்வின் மூலம் கண்டறியப்படுகிறது.



$d =$ அணுக்கருவிடை தூரம்

$$r = \frac{d}{2}$$

3.1. அணு மற்றும் சகப்பிணைப்பு ஆரம்.

எடுத்துக்காட்டு

சோதனை மூலம் கண்டறியப்பட்ட Cl_2 மூலக்கூறின் அணுக்கருவிடை தூரம், 1.98 Å

$$\begin{aligned} d_{\text{Cl-Cl}} &= r_{\text{Cl}} + r_{\text{Cl}} \\ \Rightarrow d_{\text{Cl-Cl}} &= 2r_{\text{Cl}} \\ \Rightarrow r_{\text{Cl}} &= \frac{d_{\text{Cl-Cl}}}{2} \\ &= \frac{1.98}{2} = 0.99 \text{Å} \end{aligned}$$



குளோரின் சகப்பிணைப்பு ஆரம்

சகப்பிணைப்பு உருவாதலானது, அணு ஆர்பிட்டால்கள் மேற்பொருந்துதலை உள்ளடக்கியது. மேலும் இது அணுக்கருக்களுக்கு இடையேயானத் தொலைவினைக் குறைக்கிறது. எனவே சகப்பிணைப்பு ஆரம் என்பது, உண்மையான அணு ஆரத்தினை விட எப்போதும் குறைவான மதிப்பினைப் பெற்றிருக்கும்.

தனித்த ஒரு அணுவின் சகப்பிணைப்பு ஆரத்தினை, இரு வேறுபட்ட A மற்றும் B ஆகிய அணுக்களுக்கிடையே உள்ள அணுக்கருவிடை தூரத்திலிருந்தும் கணக்கிடலாம். இதற்கு ஷீக்கர் மற்றும் ஸ்டீவன்சன் முன்மொழிந்த எளிமையான முறை பின்வருமாறு.

$$d_{A-B} = r_A + r_B - 0.09 (\chi_A - \chi_B)$$

இங்கு χ_A மற்றும் χ_B என்பன முறையே :பாலிங் அளவீட்டில் A மற்றும் B ஆகியவற்றின் எலக்ட்ரான் கவர்தன்மை மதிப்புகளாகும். இங்கு $\chi_A > \chi_B$ மற்றும் ஆரத்தின் அளவீடு Å

சோதனை மூலம் கண்டறியப்பட்ட $d_{\text{H-Cl}}$ மதிப்பான 1.28 Å-ல் இருந்து ஹைட்ரஜனின் சகப்பிணைப்பு ஆரத்தினை நாம் கணக்கிடுவோம். குளோரின் சகப்பிணைப்பு ஆரம் 0.99 Å :பாலிங் அளவீட்டில், குளோரின் மற்றும் ஹைட்ரஜன் ஆகியவற்றின் எலக்ட்ரான் கவர்தன்மை மதிப்புகள் முறையே 3 மற்றும் 2.1 ஆகும்.

$$\begin{aligned}
 d_{\text{H-Cl}} &= r_{\text{H}} + r_{\text{Cl}} - 0.09 (\chi_{\text{Cl}} - \chi_{\text{H}}) \\
 1.28 &= r_{\text{H}} + 0.99 - 0.09 (3 - 2.1) \\
 1.28 &= r_{\text{H}} + 0.99 - 0.09 (0.9) \\
 1.28 &= r_{\text{H}} + 0.99 - 0.081 \\
 1.28 &= r_{\text{H}} + 0.909 \\
 \therefore r_{\text{H}} &= 1.28 - 0.909 = 0.317 \text{ \AA}
 \end{aligned}$$

உலோக ஆரம்

நெருங்கி பொதிந்து அமைந்துள்ள உலோகப் படிகத்தில், அருகருகே அமைந்துள்ள இரு உலோக அணுக்களுக்கு இடைப்பட்டத் தொலைவின் சரிபாதியளவு உலோக ஆரம் என வரையறுக்கப்படுகிறது.

எடுத்துக்காட்டாக, தாமிர (copper) உலோகத்தில், அடுத்தடுத்து அருகே அமைந்துள்ள தாமிர (copper) அணுக்களுக்கு இடைப்பட்டத் தொலைவு 2.56 Å. எனவே தாமிரத்தின் (copper) உலோக

$$\text{ஆரம்} = \frac{2.56}{2} = 1.28 \text{ \AA}$$

உலோகப் படிகத்தின், அலகு கூட்டின் நீளத்தினைப் பயன்படுத்தி உலோக ஆரத்தினை கணக்கிட இயலும். XII-ம் வகுப்பின் திட நிலைமை பாடத்தில் இது பற்றிய விரிவான கணக்கீட்டினை நீங்கள் கற்பீர்கள்.

அணு ஆரத்தில் காணப்படும் ஆவர்த்தனத் தொடர்பு

வரிசையில் ஏற்படும் மாறுபாடு (Variation in Periods)

ஒரு வரிசையில் செல்லும் போது அணு ஆரம் குறைகிறது. ஒரு வரிசையில் இடமிருந்து வலமாகச் செல்லும் போது, இணைதிற எலக்ட்ரான்கள் ஒரே கூட்டில் சேர்க்கப்படுகின்றன. அதே நேரத்தில் அணுக்கருவில் சேர்க்கப்படும் புரோட்டான், அணுக்கருவின் மின்தன்மையினை அதிகரிப்பதுடன் இணைதிற எலக்ட்ரான்களுக்கும், அணுக்கருவிற்கும் இடையேயான கவர்ச்சி விசையினையும் அதிகரிக்கின்றது. எனவே, வரிசையில் செல்லும்போது அணு ஆரம் குறைகிறது.

செயலுறு அணுக்கரு மின்சுமை (effective nuclear charge)

எலக்ட்ரான்களுக்கும், அணுக்கருவிற்கும் இடையே நிலை மின்னியல் கவர்ச்சி விசைக் காணப்படுகிறது. இக்கவர்ச்சி விசை மட்டும் அல்லாமல், எலக்ட்ரான்களுக்கிடையே விலக்கு விசையும் காணப்படுகிறது. உட்கூட்டில் காணப்படும் எலக்ட்ரான்களுக்கும், இணைதிற கூட்டில் உள்ள எலக்ட்ரான்களுக்கும் இடையேயான இந்த விலக்கு விசையின் விளைவாக, வெளிக்கூட்டில் உள்ள இணைதிற எலக்ட்ரான்கள் மீது, அணுக்கருவினால் செலுத்தப்படும் கவர்ச்சி விசை குறைக்கப்படுகின்றது. எனவே, உட்கூட்டில் உள்ள எலக்ட்ரான்கள், அணுக்கருவிற்கும், இணைதிற எலக்ட்ரான்களுக்கும் இடையே ஒரு திரை போல செயல்படுகிறது. இவ்விளைவு திரைமறைப்பு விளைவு (screening effect) என்றழைக்கப்படுகிறது. வெளிக்கூட்டில் உள்ள இணைதிற எலக்ட்ரான்களால் உணரப்படும் நிகர அணுக்கரு மின்சுமை செயலுறு அணுக்கரு மின்சுமை (effective nuclear charge) என்றழைக்கப்படுகின்றது. செயலுறு அணுக்கரு மின்சுமையானது பின்வரும் சமன்பாட்டால் தோராயமாக கணக்கிடப்படுகிறது.

$$Z_{\text{செயலுறு}} = Z - S$$

இங்கு Z என்பது அணு எண் மற்றும் S என்பது திரைமறைப்பு மாறிலி. இம்மாறிலியைக் கீழே விவரிக்கப்பட்டுள்ள, ஸ்லேட்டர் விதிகளைப் பயன்படுத்தி கணக்கிடலாம்.

படி 1

முதலில் கொடுக்கப்பட்ட அணுவின் எலக்ட்ரான் அமைப்பினை எழுதவும் பிறகு ns மற்றும் np ஆர்பிட்டால்களை ஒரே தொகுதியாகவும், பிற ஆர்பிட்டால்களை ஒரே தொகுதியாகவும், பிற ஆர்பிட்டால்களை தனி தொகுதிகளாகவும் பின்வரும் அமைப்பில் எழுதவும்.

(1s) (2s, 2p) (3s, 3p) (3d) (4s, 4p) (4d) (4f) (5s, 5p)...

படி 2

செயலுறு அணுக்கரு மின்சுமை கண்டறிய வேண்டிய எலக்ட்ரான் அமைந்துள்ள தொகுதியினை இனம் கண்டறியவும், இதற்கு வலப்புறம் அமைந்துள்ள தொகுதிகளில் காணப்படும் எலக்ட்ரான்கள் திரைமறைப்பு விளைவிற்கு காரணமாக அமைவதில்லை.

இனம் கண்டறியப்பட்ட தொகுதியில் (n என்ற எழுத்தால் குறிக்கப்படுகிறது.) உள்ள எலக்ட்ரான்கள் ஒவ்வொன்றும் 0.35 அலகு அணுக்கரு மின்சுமையை மறைக்கின்றன. எனினும் 1s எலக்ட்ரான்களுக்கு இதன் மதிப்பு 0.30 அலகு ஆகும்.

படி 3- உட்கூட்டிலுள்ள எலக்ட்ரான்களின் மறைத்தல்.

செயலுறு அணுக்கரு மின்சுமை கண்டறியப்பட வேண்டிய எலக்ட்ரான் s அல்லது p ஆர்பிட்டாலில் இருந்தால்,

- ஐ. (n-1) தொகுதியில் உள்ள ஒவ்வொரு எலக்ட்ரான்களும் 0.85 அலகு அணுக்கரு மின்சுமையினை மறைக்கின்றன.
- ஐஐ. (n-2) தொகுதி அல்லது அதனை விடக்குறைவான (n-3) (n-4) போன்ற தொகுதிகளில் உள்ள ஒவ்வொரு எலக்ட்ரானும் முழுமையாக மறைக்கின்றன. அதாவது 1 அலகு அணுக்கரு மின்சுமையினை மறைக்கின்றன.

செயலுறு அணுக்கரு மின்சுமை கண்டறியப்பட வேண்டிய எலக்ட்ரான் d அல்லது f ஆர்பிட்டாலில் இருந்தால், அந்த எலக்ட்ரான் அமைந்துள்ள தொகுதிக்கு இடப்புறம் உள்ள தொகுதிகளில் காணப்படும் எலக்ட்ரான்கள் 1 அலகு அணுக்கரு மின்சுமையினை மறைக்கின்றன.

படி 4

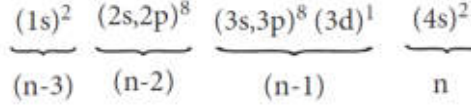
அனைத்து எலக்ட்ரான்களின் திரைமறைப்பு விளைவு மதிப்புகளின் கூடுதல் மறைத்தல் மாறிலி 's' ஐத் தருகின்றது.

அட்டவணை 3.12 உட்கூட்டிலுள்ள எலக்ட்ரான்களின் திரைமறைப்பு விளைவு ஸ்லேட்டா விதிகள்.

எலக்ட்ரான் தொகுதி	செயலுறு அணுக்கரு மின்சுமை கண்டறியப்பட வேண்டிய எலக்ட்ரான் (s அல்லது p ஆர்பிட்டாலில் இருந்தால்)	செயலுறு அணுக்கரு மின்சுமை கண்டறியப்பட வேண்டிய எலக்ட்ரான் (d ஆர்பிட்டாலில் இருந்தால்)
n	0.35 (0.30 – 1s எலக்ட்ரானுக்கு)	0.35
(n-1)	0.85	1.00
(n-2) மற்றும் மற்றவை	1.00	1.00

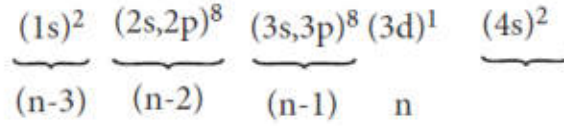
எடுத்துக்காட்டு:

ஸ்கேன்டியத்தில் உள்ள 3d எலக்ட்ரான் மற்றும் 4s எலக்ட்ரானின் மீதான செயலுறு அணுக்கரு மின்சுமையின் மதிப்பினைக் கணக்கிடுதலை நாம் விளக்குவோம். ஸ்கேன்டியத்தின் எலக்ட்ரான் அமைப்பு 1s², 2s², 2p⁶, 3s², 3p⁶, 4s², 3d¹, இதனை பின்வருமாறு மாற்றியமைக்கலாம்.



தொகுதி	அத்தொகுதியில் காணப்படும் எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை	's' மதிப்பிற்கு ஒவ்வொரு எலக்ட்ரான்களின் பங்களிப்பு	's' மதிப்பிற்கு குறிப்பிட்ட தொகுதியில் உள்ள எலக்ட்ரான்களின் பங்களிப்பு
(n)	1	0.35	0.35
(n-1)	9	0.85	7.65
(n-2)& மற்றவை	10	1	10.00
	S ன் மதிப்பு		18.00

$Z_{\text{செயலுறு}} = Z - S$ அதாவது $Z_{\text{செயலுறு}} = 21 - 18 \therefore Z_{\text{செயலுறு}} = 3$
3d எலக்ட்ரான் மீதான செயலுறு அணுக்கரு மின்சுமையினைக் கணக்கிடுதல்



தொகுதி	அத்தொகுதியில் காணப்படும் எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை	's' மதிப்பிற்கு ஒவ்வொரு எலக்ட்ரானின் பங்களிப்பு	's' மதிப்பிற்கு குறிப்பிட்ட தொகுதியில் உள்ள எலக்ட்ரான்களின் பங்களிப்பு
(n)	0	0.35	0
(n-1)& மற்றவை	18	1	18
	S ன் மதிப்பு		18

$\therefore Z_{\text{செயலுறு}} = Z - S$ i.e. $= 21 - 18 \therefore Z_{\text{செயலுறு}} = 3$
அட்டவணை 3.13 இரண்டாம் வரிசை தனிமங்களின் அணு ஆரம் (சகப்பிணைப்பு ஆரம்)

தனிமம்	செயலுறு அணுக்கரு மின்சுமை	சகப்பிணைப்பு ஆரம்
Li ³	1.30	167
Be ⁴	1.95	112
C ⁶	2.60	87
N ⁷	3.25	67
O ⁸	3.25	56
F ⁹	4.55	48
Ne ¹⁰	5.85	38*

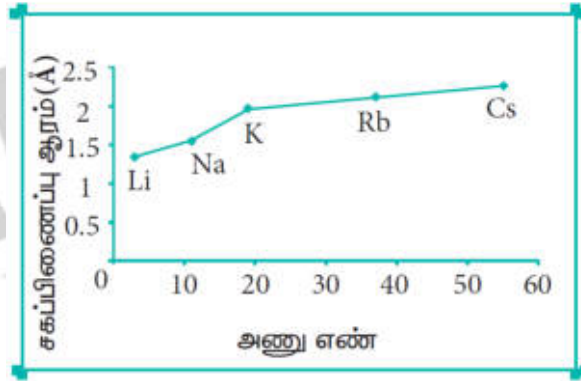
*வாண்டர்வால்ஸ் ஆரம்

தொகுதியில் ஏற்படும் மாறுபாடுகள்: (variation in group)

தனிம வரிசை அட்டவணையில் ஒரு தொகுதியில் மேலிருந்து கீழாக அணு ஆரம் அதிகரிக்கின்றது. ஒரு தொகுதியில் மேலிருந்து கீழாகச் செல்லும் போது, புதிதாகச் சேர்க்கப்படும் இணைதிற எலக்ட்ரான்கள் இடம் பெறும் பொருட்டு, புதிய கூடுகள் உருவாக்கப்படுகின்றன. இதன் காரணமாக அணுக்கருவின் மையத்திற்கும் இணைதிற எலக்ட்ரான்கள் காணப்படும் வெளிக்கூட்டிற்கும் இடையேயான தொலைவு அதிகரிக்கின்றது. ஒரு தொகுதியில் கார உலோகங்களின் அணு ஆரங்களின் மாறுபாடு பின்வருமாறு.

அட்டவணை 3.14 தொகுதி -1 தனிமங்களின் சகப்பிணைப்பு ஆரங்களின் மாறுபாடுகள்

தனிமம்	இணைதிற எலக்ட்ரான் காணப்படும் வெளிக்கூடு	சகப்பிணைப்பு ஆரம் (A)
Li	L (n=2)	1.34
Na	M (n=3)	1.54
K	N (n=4)	1.96
Rb	O (n=5)	2.11
Cs	P(n=6)	2.25



3.5.2. அயனி ஆரம்

ஒரு அயனியின் அணுக்கருவின் மையத்திற்கும் அவ்வயனியின் எலக்ட்ரான் திரள்முகில் (electron cloud) மீது அதன் அணுக்கருவால் கவர்ச்சி விசையினை செலுத்த இயலும் தூரத்திற்கும் இடையிலான தொலைவு அயனி ஆரம் என வரையறுக்கப்படுகிறது. நேரயனி மற்றும் எதிரயனி அகியவற்றிற்கு இடையேயான அயனி இடைத் தொலைவினைக் கொண்டு பாலிங் முறைப்படி ஒற்றை மின்சமையுடைய படிக்களங்களின் அயனி ஆரங்களை கணக்கிடலாம்.

படிக அலகுக்கூட்டில் காணப்படும் அயனிகள் கோள வடிவமுடையவை என பாலிங் கருதினர். மேலும் அவைகள் ஒன்றையொன்று தொட்டுக் கொண்டிருப்பதாகவும் கருதினர். எனவே,

$$d = r_{C^+} + r_{A^-} \text{ ----- (1)}$$

இங்கு d என்பது நேர் அயனி C⁺ன் அணுக்கருவிற்கும், எதிர்அயனி A⁻ ன் அணுக்கருவிற்கும் இடையேயானத் தொலைவு ஆகும். மற்றும் ஆகியன முறையே நேர் மற்றும் எதிர் அயனிகளின் ஆரங்களாகும்.

மேலும், மந்த வாயுக்களின் எலக்ட்ரான் அமைப்பினை (எடுத்துக்காட்டாக Na⁺ மற்றும் F⁻)

அயனிகள் $1s^2 2s^2, 2p^6$ எலக்ட்ரான் அமைப்பினைப் பெற்றுள்ளன) பெற்றுள்ள அயனிகளின் ஆரமானது, அவ்வயனிகள் மீது அணுக்கருவால் செலுத்தப்படும் செயலுறு அணுக்கருமின்சுமைக்கு எதிர்விகிதத்தில் அமையும். அதாவது,

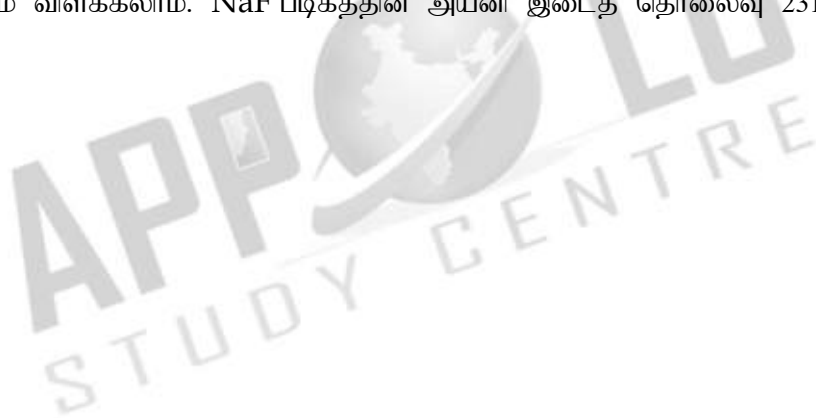
$$\text{i.e. } r_{C^+} \propto \frac{1}{(Z_{\text{செயலுறு}})_{C^+}} \quad \text{மற்றும்} \quad (2)$$

$$r_{A^-} \propto \frac{1}{(Z_{\text{செயலுறு}})_{A^-}} \quad (3)$$

இங்கு $Z_{\text{செயலுறு}}$ என்பது செயலுறு அணுக்கரு மின்சுமைக்குச் சமம். $Z_{\text{செயலுறு}} = Z - S$ சமன்பாடு (2) ஐ (3) ஆல் வகுக்க.

$$\frac{r_{C^+}}{r_{A^-}} = \frac{(Z_{\text{செயலுறு}})_{A^-}}{(Z_{\text{செயலுறு}})_{C^+}} \quad \text{-----} \quad (4)$$

சமன்பாடு (1) மற்றும் (4) ஐத் தீர்ப்பதன் மூலம் r_{C^+} மற்றும் r_{A^-} மதிப்புகளைப் பெற இயலும். NaF படிகத்திலுள்ள Na^+ மற்றும் F^- அயனிகளின் ஆரங்களைக் கணக்கிடுவதன் மூலம் இம்முறையினை நாம் விளக்கலாம். NaF படிகத்தின் அயனி இடைத் தொலைவு 231 pm ஆகும்.



$$d = r_{\text{Na}^+} + r_{\text{F}^-}$$

i.e. $r_{\text{Na}^+} + r_{\text{F}^-} = 231 \text{ pm}$ -----(5)

$$\frac{r_{\text{Na}^+}}{r_{\text{F}^-}} = \frac{(Z_{\text{செயலுறு}})_{\text{F}^-}}{(Z_{\text{செயலுறு}})_{\text{Na}^+}}$$

$$(Z_{\text{செயலுறு}})_{\text{F}^-} = Z - S$$

$$= 9 - 4.15$$

$$= 4.85$$

$$(Z_{\text{செயலுறு}})_{\text{Na}^+} = 11 - 4.15$$

$$= 6.85$$

$$\therefore \frac{r_{\text{Na}^+}}{r_{\text{F}^-}} = \frac{4.85}{6.85}$$

$$= 0.71$$

$$\Rightarrow r_{\text{Na}^+} = 0.71 r_{\text{F}^-}$$
 -----(6)

(6) ஐ (5) ல் பிரதியிட

$$(1) \Rightarrow 0.71 r_{\text{F}^-} + r_{\text{F}^-} = 231 \text{ pm}$$

$$1.71 r_{\text{F}^-} = 231 \text{ pm}$$

$$r_{\text{F}^-} = \frac{231}{1.71} = 135.1 \text{ pm}$$

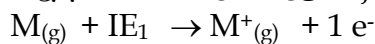
(r_{F^-}) ன் மதிப்புகளை சமன்பாடு (5) ல் பிரதியிட

$$r_{\text{Na}^+} + 135.1 = 231$$

$$r_{\text{Na}^+} = 95.9 \text{ pm}$$

3.5.3. அயனியாக்கும் ஆற்றல்

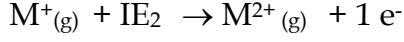
அடி ஆற்றல் நிலையில் (சிறும ஆற்றல் நிலையில் - ground state) உள்ள நடுநிலைத்தன்மை உடைய தனித்த வாயு நிலை அணு ஒன்றின் இணைதிற கூட்டிலிருந்து இலகுவாக பிணைக்கப்பட்டுள்ள ஒரு எலக்ட்ரானை நீக்குவதற்கு தேவைப்படும் குறைந்தபட்ச ஆற்றல் அயனியாக்கும் ஆற்றல் எனப்படும். இது kJmol^{-1} அல்லது eV என்ற அலகால் குறிப்பிடப்படுகின்றது.



இங்கு IE_1 என்பது முதலாவது அயனியாக்கும் ஆற்றலைக் குறிப்பிடுகிறது.

அடுத்தடுத்த அயனியாக்கும் ஆற்றல்கள் (Successive ionization energies)

ஒரு ஒற்றை நேர்மின்சமையுடைய அயனியிலிருந்து, ஒரு எலக்ட்ரானை நீக்குவதற்கு தேவைப்படும் குறைந்தபட்ச ஆற்றல் இரண்டாம் அயனியாக்கும் ஆற்றல் எனப்படும். இது பின்வரும் சமன்பாட்டால் குறிப்பிடப்படுகிறது.



இதைப் போலவே, நாம் மூன்றாம், நான்காம் அயனியாக்கும் ஆற்றல்களை வரையறுக்கலாம்.

ஒரு நேர்மின் சமையுடைய அயனியில் காணப்படும் எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கையானது, அதன் நடுநிலை அணுவில் காணப்படும் எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கையை விட குறைவாக இருந்தபோதிலும் அவைகளின் அணுக்கரு மின்சமை சமமாக இருக்கும். எனவே நேர்மின்சமையுடைய அயனியின் செயலுறு அணுக்கருகவர்ச்சி விசையானது, தொடர்புடைய நடுநிலை அணுவின் செயலுறு கவர்ச்சி விசையினை விட அதிகம். எனவே தொடர்ச்சியான அயனியாக்கும் ஆற்றலின் மதிப்புகள், எப்போதும் பின்வரும் ஏறுவரிசையில் அமைகின்றன.

$$IE_1 < IE_2 < IE_3 < \dots$$

அயனியாக்கும் ஆற்றலில் காணப்படும் ஆவர்த்தனத் தன்மை

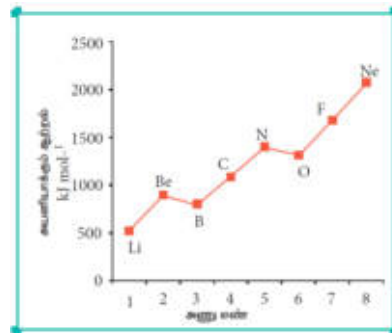
அயனியாக்கும் ஆற்றல், ஒரு சில விதிவிலக்குகளைத் தவிர்த்து, பொதுவாக ஒரு வரிசையில் அதிகரிக்கின்றது. முன்னரே விவரித்தவாறு, ஒரு வரிசையில் இடமிருந்து வலமாகச் செல்லும் போது, இணைதிற எலக்ட்ரான்கள் ஒரே கூட்டில் சேர்க்கப்படும் நிலையில், அணுக்கருவில் புரோட்டான்கள் சேர்க்கப்படுகின்றன. இவ்வாறு தொடர்ச்சியாக அணுக்கருவின் மின்சமை அதிகரிப்பதால், இணைதிற எலக்ட்ரான்கள் மீதான கவர்ச்சி விசையும் அதிகரிக்கின்றது. மேலும் இணைதிற எலக்ட்ரானை நீக்க தேவைப்படும் ஆற்றல் அதிகரிப்பதால் அயனியாக்கும் ஆற்றலும் அதிகரிக்கிறது.

இரண்டாம் வரிசை தனிமங்களின் அயனியாக்கும் ஆற்றலில் ஏற்படும் மாறுபாடுகளை நாம் கருதுவோம். அணு எண்ணிற்கு எதிரான அயனியாக்கும் ஆற்றல் மதிப்பின் வரைபடம் கீழே கொடுக்கப்பட்டுள்ளது.

பின்வரும் வரைபடத்தில் அயனியாக்கும் ஆற்றலின் வழக்கமான தொடர்பில் இரு மாறுபாடுகள் காணப்படுகின்றன. பெரிலியத்தினைக் காட்டிலும் போரான் அதிகமான அணுக்கரு மின் சமையினைப் பெற்றிருப்பதால், போரானின் அயனியாக்கும் ஆற்றல் மதிப்பு அதிகம் என எதிர்பார்க்கப்படுகிறது. ஆனால் எதிர்பார்த்தலுக்கு முரணாக பெரிலியம் மற்றும் போரான் அணுக்களின் அயனியாக்கும் ஆற்றல்கள் முறையே 899 மற்றும் 800 kJmol⁻¹ ஆகும்.

பெரிலியம் முழுவதும் நிரப்பப்பட்ட 2s ஆர்பிட்டாலைப் பெற்றுள்ளதால், பகுதியளவு நிரப்பப்பட்ட இணைதிற கூடு எலக்ட்ரான் அமைப்பை பெற்றுள்ள (2s² 2p¹) போராணைக் காட்டிலும் அதிக அளவு நிலைப்புத்தன்மை உடையது.

தனிமங்களின் அயனியாக்கும் ஆற்றலில் ஏற்படும் மாறுபாடு



சிறும ஆற்றல் நிலையில், பெரிலியம் (Z= 4) 1s² 2s² எலக்ட்ரான் அமைப்பினையும், போரான் (Z= 5) 1s² 2s² 2p¹ என்ற எலக்ட்ரான் அமைப்பினையும் பெற்றுள்ளன.

இதைப் போலவே, $1s^2 2s^2 2p^3$ எலக்ட்ரான் அமைப்பினைப் பெற்றுள்ள நைட்ரஜனின் அயனியாக்கும் ஆற்றல், (1402 kJmol^{-1}) $1s^2 2s^2 2p^4$ என்ற எலக்ட்ரான் அமைப்பினைப் பெற்றுள்ள ஆக்சிஜனின் அயனியாக்கும் ஆற்றல், (1314 kJmol^{-1}) மதிப்பைக் காட்டிலும் அதிகம். ஏனெனில் சரிபாதினளவு நிரப்பப்பட்ட எலக்ட்ரான் அமைப்பு அதிக நிலைப்புத் தன்மையுடையது. ஆதலால் நைட்ரஜனின் $2p$ ஆர்பிட்டாலிலிருந்து ஒரு எலக்ட்ரானை நீக்குவதற்கு அதிக ஆற்றல் தேவைப்படுகிறது. ஆனால், ஆக்சிஜனின் $2p$ ஆர்பிட்டாலில் உள்ள ஒரு எலக்ட்ரானை நீக்குவதால், அது சரிபாதினளவு நிரப்பப்பட்ட நிலையான எலக்ட்ரான் அமைப்பினைப் பெறுகிறது. இதன் விளைவாக நைட்ரஜனோடு ஒப்பிடும் போது ஆக்சிஜனில் $2p$ எலக்ட்ரானை நீக்குவது எளிதாகிறது.

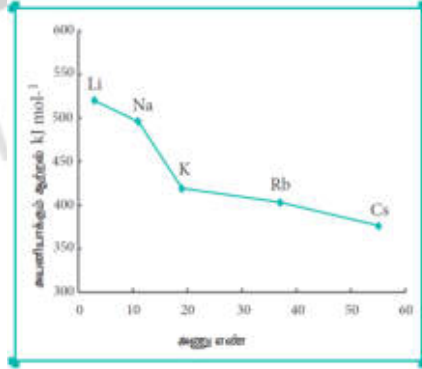
தொகுதியில் ஏற்படும் ஆவர்த்தன மாறுபாடுகள்

ஒரு தொகுதியில் மேலிருந்து கீழாகச் செல்லும் போது அயனியாக்கும் ஆற்றல் குறைகிறது. தொகுதியில் மேலிருந்து வரும் போது. இணைதிற எலக்ட்ரான்கள் புதிய கூட்டில் சேர்கின்றன. அணுக்கருவிற்கும் இணைதிற எலக்ட்ரான்களுக்கும் இடையேயானத் தொலைவு அதிகரிக்கின்றது. எனவே இணைதிற எலக்ட்ரான்கள் மீதான அணுக்கருவின் கவர்ச்சி விசை குறைகின்றது. இதன் காரணமாக ஒரு தொகுதியில் மேலிருந்து கீழே செல்லும் போது அயனியாக்கும் ஆற்றல் குறைகிறது.

அயனியாக்கும் ஆற்றல் மற்றும் மறைத்தல் விளைவு

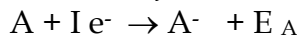
ஒரு தொகுதியில் மேலிருந்து கீழாகச் செல்லும் போது, உட்கூட்டில் உள்ள எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை அதிகரிக்கின்றது. இதன் காரணமாக உட்கூட்டில் உள்ள எலக்ட்ரான்களுக்கும் இணைதிற எலக்ட்ரான்களுக்கும் இடையேயான விலக்கு விசையும் அதிகரிக்கின்றது. அதாவது உட்கூட்டில் உள்ள எலக்ட்ரான்களின் மறைத்தல் விளைவு அதிகரிப்பதனால், அணுக்கருவினால், இணைதிற எலக்ட்ரான்கள் மீது செலுத்தப்படும் கவர்ச்சி விசை குறைகிறது. எனவே அயனியாக்கும் ஆற்றலும் குறைகிறது. அயனியாக்கும் ஆற்றலின் இத்தகைய போக்கினை கார உலோகங்களை எடுத்துக்காட்டாகக் கொண்டு நாம் புரிந்து கொள்வோம்.

அயனியாக்கும் ஆற்றலில் ஏற்படும் மாறுபாடுகள்



3.5.4. எலக்ட்ரான் நாட்டம்

அடி ஆற்றல் நிலையில் உள்ள ஒரு தனித்த நடுநிலைத்தன்மை உடைய வாயுநிலை அணு ஒன்றின் இணைதிற கூட்டில் ஒரு எலக்ட்ரானை சேர்த்து அதன் எதிர் அயனியை உருவாக்கும் போது வெளிப்படும் ஆற்றல் (மந்த வாயுக்களைப் பொருத்த வரையில் தேவைப்படும் ஆற்றல்) எலக்ட்ரான் நாட்டம் எனப்படும். இது kJmol^{-1} என்ற அலகால் குறிப்பிடப்படுகிறது.

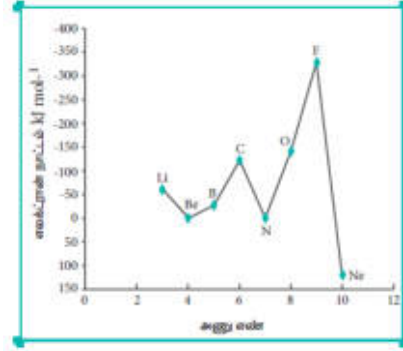


ஒரு வரிசையில் ஏற்படும் எலக்ட்ரான் நாட்டத்தின் மாறுபாடுகள்

அயனியாக்கும் ஆற்றலில் காணப்படுவதைப் போன்று எலக்ட்ரான் நாட்டத்தில் சீரான மாற்றம் காணப்படுவதில்லை. ஒரு வரிசையில். கார உலோகத்திலிருந்து ஹாலஜன்களை நோக்கிச் செல்லும் போது, பொதுவாக எலக்ட்ரான் நாட்டம் அதிகரிக்கின்றது அதாவது வெளிப்படும் ஆற்றலின் மதிப்பு அதிகமாக இருக்கும். அணுவின் உருவளவு சிறிதாவதும், அணுக்கரு மின்சமை அதிகரிப்பதுமே

இதற்கு காரணமாகும். எனினும் பெரிலியம் ($1s^2 2s^2$) நைட்ரஜன் ($1s^2 2s^2 2p^3$) போன்ற தனிமங்களில் ஒரு எலக்ட்ரான் சேர்க்கப்படும் நிலையில் அவற்றின் அதிக நிலைப்புத்தன்மையுடைய எலக்ட்ரான் அமைப்பு இழக்கப்படும் நிலை ஏற்படும். எனவே இத்தகைய தனிமங்கள் ஏறத்தாழ பூஜ்ஜிய எலக்ட்ரான் நாட்ட மதிப்பினைப் பெற்றுள்ளன.

தனிமங்களின் எலக்ட்ரான் நாட்டத்தில் ஏற்படும் மாறுபாடுகள்.

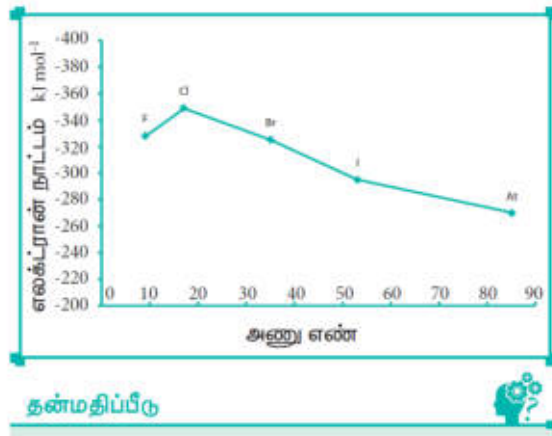


மந்த வாயுக்கள் ns^2 , np^6 என்ற முழுவதும் நிரப்பப்பட்ட நிலையான எலக்ட்ரான் அமைப்பினைப் பெற்றுள்ளன. எனவே கூடுதலாக ஓர் எலக்ட்ரானை சேர்த்தல் சாதகமானதல்ல. மேலும் அந்நிகழ்விற்கு அதிக ஆற்றல் தேவைப்படும் ns^2 , np^6 என்ற எலக்ட்ரான் அமைப்பினைப் பெற்றுள்ள ஹாலஜன்கள் எளிதில் ஒரு எலக்ட்ரானை ஏற்றுக்கொண்டு நிலையான ns^2 , np^6 எலக்ட்ரான் அமைப்பினை பெறுவதால், ஒவ்வொரு வரிசையிலும் ஹாலஜன்கள் அதிக எலக்ட்ரான் நாட்ட மதிப்பினைப் (அதிக எதிர்குறி மதிப்புகள்) பெற்றுள்ளன.

ஒரு தொகுதியில் ஏற்படும் எலக்ட்ரான் நாட்டத்தின் மாறுபாடுகள்

ஒரு தொகுதியில் மேலிருந்து கீழாக வரும்போது பொதுவாக எலக்ட்ரான் நாட்டத்தின் மதிப்பு குறைகிறது. அணுபருமன் மற்றும் உள்கூட்டில் உள்ள எலக்ட்ரான்களின் திரைமறைப்பு விளைவு ஆகியவை அதிகரிப்பதே இதற்குக் காரணமாகும். எனினும் ஆக்சிஜன் மற்றும் புளூரின் ஆகியன முறையே சல்பர் மற்றும் குளோரினைக் காட்டிலும் குறைவான எலக்ட்ரான் நாட்டமதிப்பினைப் பெற்றுள்ளன. ஆக்சிஜன் மற்றும் புளூரினின் உருவளவு ஒப்பீட்டளவில் சிறியது. எனவே அவைகள் அதிக எலக்ட்ரான் அடர்த்தியைக் கொண்டுள்ளன. மேலும் சேர்க்கப்படும் கூடுதல் எலக்ட்ரான் ஆக்சிஜன் மற்றும் புளூரினில் 2p ஆர்பிட்டாலில் சென்று சேரவேண்டும். இந்த 2p ஆர்பிட்டாலானது சல்பர் மற்றும் குளோரினின் 3p ஆர்பிட்டாலுடன் ஒப்பிடும் போது நெருக்கமான அமைப்பினைப் பெற்றுள்ளது. எனவே ஆக்சிஜன் மற்றும் புளூரினானது முறையே அவைகள் இடம் பெற்றுள்ள தொகுதியில் அடுத்து உள்ள தனிமங்களான சல்பர் மற்றும் குளோரினைக் காட்டிலும் குறைவான எலக்ட்ரான் நாட்டம் மதிப்பினைப் பெற்றுள்ளன.

ஹாலஜன் தொகுதியில் ஏற்படும் எலக்ட்ரான் நாட்டத்தின் மாறுபாடு



3.5.5 எலக்ட்ரான் கவர்தன்மை

சகப்பிணைப்பால் பிணைக்கப்பட்டுள்ள மூலக்கூறில் உள்ள ஒரு அணுவானது, சகப்பிணைப்பில் பங்கிடப்பட்டுள்ள எலக்ட்ரான் இணையினைத் தன்னை நோக்கி ஒப்பீட்டு அளவில் கவரும் பண்பு எலக்ட்ரான் கவர்தன்மை எனப்படும்.

எலக்ட்ரான் கவர்தன்மை ஒரு அளவிடத்தக்க பண்பு அல்ல எனினும் இம்மதிப்பினைக் கணக்கிட பல்வேறு அளவீட்டு முறைகள் உள்ளன. அதில் ஒரு முறை ∴பாலிங் என்பவரால் உருவாக்கப்பட்டது. அவர் ஹைட்ரஜன் மற்றும் புளூரினுக்கு முறையே 2.1 மற்றும் 4.0 என்ற மதிப்புகளை எலக்ட்ரான் நாட்ட மதிப்புகள் என எடுத்துக்கொண்டார். இதனடிப்படையில் பிற தனிமங்களுக்கு பின்வரும் வாய்ப்பாட்டினைப் பயன்படுத்தி எலக்ட்ரான் நாட்ட மதிப்புகளைக் கண்டறியலாம்.

$$(\chi_A - \chi_B) = 0.182 \sqrt{E_{AB} - (E_{AA} * E_{BB})^{1/2}}$$

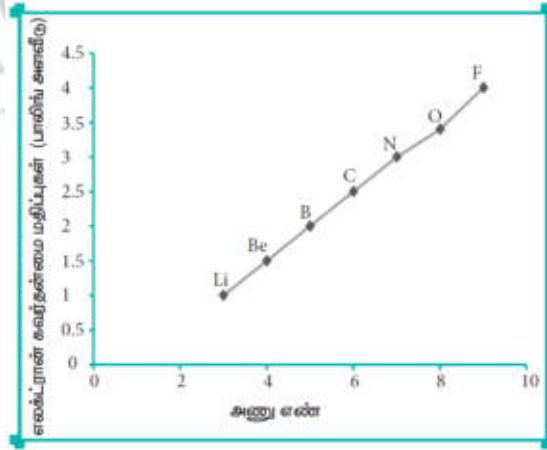
இங்கு E_{AB} , E_{AA} மற்றும் E_{BB} ஆகியன முறையே AB, A₂ (A-A) மற்றும் B₂ (B-B) ஆகிய மூலக்கூறுகள் பிணைப்பு பிளவு ஆற்றல்கள் ஆகும்.

கொடுக்கப்பட்ட எந்த ஒரு தனிமத்தின் எலக்ட்ரான் நாட்டத்தின் மதிப்பும் மாறிலியல்ல. இதன் மதிப்பு அத்தனிமம் எத்தனிமத்துடன் சகப்பிணைப்பால் பிணைக்கப்பட்டுள்ளது என்பதனைப் பொறுத்து அமையும். பிணைப்பின் தன்மையினைத் தீர்மானிப்பதில் எலக்ட்ரான் கவர் தன்மை மதிப்புகள் முக்கிய பங்காற்றுகின்றன.

ஒரு வரிசையில் எலக்ட்ரான் கவர்தன்மையில் ஏற்படும் மாறுபாடு.

இடமிருந்து வலமாகச் செல்லும் போது பொதுவாக எலக்ட்ரான் கவர் தன்மை மதிப்பு அதிகரிக்கின்றது. முன்னரே விவரித்துள்ளவாறு, ஒரு வரிசையில் அணுக்கருவிற்கும், இணைதிற எலக்ட்ரான்களுக்கும் இடையேயான கவர்ச்சி விசை அதிகரிப்பதால் அணு ஆரம் குறைகிறது. எனவே, பங்கிடப்பட்டுள்ள எலக்ட்ரான்களை கவரும் தன்மை அதிகரிக்கிறது. இதன் காரணமாக ஒரு வரிசையில் எலக்ட்ரான் கவர்தன்மை அதிகரிக்கின்றது.

இரண்டாம் வரிசையில் எலக்ட்ரான் கவர்தன்மையில் ஏற்படும் மாறுபாடுகள்



பாலிங் அளவீட்டு முறையில் தனிமங்களின் எலக்ட்ரான் கவர்தன்மை

வரும் எண்ணிக்கையாகும். இணைதிறனுக்கு பதிலாக ஆக்சிஜனேற்ற நிலையினைக் குறிப்பிடுவது எளிமையானதாக இருக்கும்.

இணைதிறன் அல்லது ஆக்சிஜனேற்ற நிலையில் காணப்படும் ஆவர்த்தனத் தன்மை

ஒரு அணுவின் இணைதிறன் என்பது அதன் இணைதிற கூட்டில் காணப்படும் எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கையினைப் பொருத்து அமைகிறது. ஒரு தொகுதியில் உள்ள தனிமங்களில் இணைதிற எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை சமம் என்பதால், அதிகபட்சமான இணைதிறன் என்பது மாறாமல் அதே மதிப்பினைப் பெற்றிருக்கும். எனினும் ஒரு வரிசையில் இணைதிற எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை அதிகரிப்பதால் இணைதிறனும் அதிகரிக்கின்றது.

இணைதிறனில் ஏற்படும் மாறுபாடு

கார உலோகங்கள் (தொகுதி 1)			தொகுதி 15		
தனிமம்	இணைதிற கூட்டிலுள்ள எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை	இணைதிறன்	தனிமம்	இணைதிற கூட்டிலுள்ள எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை	இணைதிறன்
Li	1	1	N	5	3,5
Na	1	1	P	5	3,5
K	1	1	As	5	3,5
Rb	1	1	Sb	5	3,5
Cs	1	1	Bi	5	3,5
Fr	1	1			

இணைதிறனில் ஏற்படும் மாறுபாடு (முதல் வரிசை)

தனிமம்	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
இணைதிற கூட்டிலுள்ள எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை	1	2	3	4	5	6	7	8
இணைதிறன் (இணையக்கூடிய திறன்)	1	2	3	4	5,3	6,2	7,1	8,0

மேலும் சில தனிமங்கள் மாறுபடும் ஆக்சிஜனேற்ற நிலைகளைக் கொண்டுள்ளன. எடுத்துக்காட்டாக தொகுதி 15 ல் உள்ள தனிமங்கள் 5 இணைதிற எலக்ட்ரான்களை பெற்றிருந்தாலும், அவற்றில் பெரும்பாலான தனிமங்கள் 3 மற்றும் 5 ஆகிய இரு இணைதிறன்களைப் பெற்றுள்ளன. இதைப்போலவே இடைநிலை தனிமங்களும் உள் இடைநிலைத் தனிமங்களும் மாறுபடும் ஆக்சிஜனேற்ற நிலைகளைப் பெற்றிருக்கின்றன.

இரண்டாம் வரிசை தனிமங்களின் முரண்பட்ட பண்புகள்

ஒரே தொகுதியில் உள்ள தனிமங்கள் ஒரே மாதிரியான இயற் மற்றும் வேதிப் பண்புகளைப் பெற்றுள்ளன. எனினும் ஒவ்வொரு தொகுதியிலும் உள்ள முதல் தனிமமானது அத்தனிம இடம்பெற்றுள்ள தொகுதியில் உள்ள பிற தனிமங்களின் பண்புகளிலிருந்து சில முரண்பட்ட பண்புகளைப் பெற்றிருக்கின்றன. உதாரணமாக, கார மற்றும் காரமண் உலோகங்கள் பொதுவாக அயனிச் சேர்மங்களை உருவாக்கும் தன்மையினைப் பெற்றுள்ளன. மாறாக லித்தியம் மற்றும் பெரிலியம் ஆகியன அதிகஅளவில் சகப்பிணைப்புச் சேர்மங்களை உருவாக்குகின்றன. இரண்டாம் வரிசையில் உள்ள தனிமங்கள் அவற்றின் இணைதிற கூட்டில் மொத்தம் நான்கு ஆர்பிட்டால்களை (2s மற்றும் 2p) மட்டும் பெற்றிருக்கின்றன. எனவே அவற்றின் அதிகபட்ச சகப்பிணைப்பு இணைதிறன் 4.

ஆனால் அடுத்தடுத்த வரிசைகளில் உள்ள தனிமங்கள் தங்களது இணைதிற கூட்டில் அதிக ஆர்பிட்டால்களைப் பெற்றுள்ளன. எனவே உயர் இணைதிறன் மதிப்புகளைப் பெற்றுள்ளன. எடுத்துக்காட்டாக போரான் BF_4 ஐயும் மற்றும் அலுமினியம் AlF_6 ஐயும் உருவாக்குகின்றன.

மூலைவிட்டத் தொடர்பு

தனிம வரிசை அட்டவணையில் மூலைவிட்டமாகச் செல்லும் போது, இரண்டாம் மற்றும் மூன்றாம் வரிசையில் உள்ள தனிமங்கள் சில பண்புகளில் ஒத்துக் காணப்படுகின்றன. ஒரு தொகுதியில் காணப்படும் தனிமங்களுக்கிடையே நாம் காணும் பண்புகளைப் போன்று அதிக அளவில் ஒற்றுமைத் தன்மை காணப்படாவிட்டாலும் கூட பின்வரும் தனிம இணைகளில் இப்பண்பு குறிப்பிடத்தக்க அளவில் உள்ளது.



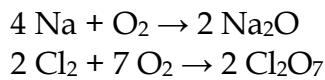
மூலை விட்டத்தில் அமைந்துள்ள தனிமங்களின் பண்புகளுக்கிடையே காணப்படும் ஒற்றுமைத் தன்மை மூலை விட்டத் தொடர்பு என்றழைக்கப்படுகிறது.

ஆவர்த்தன தொடர்பும் வேதிவினைத் திறனும்.

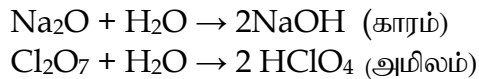
முன்னரே கற்றறிந்தவாறு, தனிமங்களின் இயற் மற்றும் வேதிப் பண்புகள் அவைகளின் இணைதிற கூடு எலக்ட்ரான் அமைப்பினைப் பொருத்து அமைகிறது. தனிம வரிசை அட்டவணையில் இடதுபுறம் உள்ள தனிமங்கள் குறைவான அயனியாக்கும் ஆற்றலைப் பெற்றிருக்கின்றன. மேலும் எளிதில் இணைதிற எலக்ட்ரான்களை இழக்கும் தன்மையினையும் பெற்றுள்ளன. தனிம வரிசை அட்டவணையின், வலது புறத்தில் காணப்படும் தனிமங்கள் அதிக எலக்ட்ரான் கவர் தன்மையினைப் பெற்றிருப்பதால் அவைகள் எளிதில் எலக்ட்ரான்களை ஏற்கும் இயல்பினைப் பெற்றுள்ளன. இதன் விளைவாக, தனிம வரிசை அட்டவணையில் இரு பக்கங்களிலும் அமைந்துள்ள தனிமங்கள், நடுவில் உள்ள தனிமங்களோடு ஒப்பிடும்போது அதிக வினைத்திறனைப் பெற்றுள்ளன. மாறாக மந்த வாயுக்கள் முழுவதும் நிரப்பப்பட்ட எலக்ட்ரான் அமைப்பினைப் பெற்றிருப்பதால் அவைகள் எலக்ட்ரான்களை ஏற்பதோ இழப்பதோ இல்லை. எனவே அவைகள் எத்தகைய வேதிவினைகளிலும் இயல்பாக ஈடுபடுவதில்லை.

அயனியாக்கும் ஆற்றலானது, உலோகத் தன்மையுடன் நேரடியாக தொடர்புபடுத்தக் கூடியதாகும். மேலும் தனிம வரிசை அட்டவணையின் இடதுபுறத்தின் கீழ்ப்பகுதியில் உள்ள தனிமங்கள் குறைவான அயனியாக்கும் ஆற்றலைப் பெற்றுள்ளதால் அவைகள் உலோகத் தன்மையினைப் பெற்றுள்ளன. மாறாக, வலது புறத்தின் மேற்பகுதியில் உள்ள தனிமங்கள் அதிக அயனியாக்கும் ஆற்றலைப் பெற்றுள்ளதால், அவைகள் அலோகத் தன்மையினைப் பெற்றுள்ளன.

தனிம வரிசை அட்டவணையின் இரு புறங்களிலும் உள்ள தனிமங்களால் உருவாக்கப்படும் சேர்மங்களின் இயல்பினை நாம் ஆய்ந்து அறிவோம். கார உலோகங்கள் மற்றும் ஹாலஜன்கள் ஆக்சிஜனுடன் வினைபுரிந்து அவைகளின் ஆக்சைடுகளைத் தருகின்றன.



சோடியம் ஆக்சைடு நீருடன் வினைபட்டு, வலிமை மிக்க காரமான சோடியம் ஹைட்ராக்சைடைத் தருகிறது. இது ஒரு கார ஆக்சைடு ஆகும். மாறாக Cl_2O_7 நீருடன் வினைபட்டு வலிமை மிக்க அமிலமான பெர்குளோரிக் அமிலத்தினை தருகிறது. எனவே, இது ஒரு அமில ஆக்சைடாகும்.

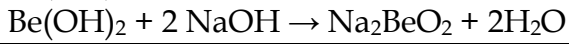
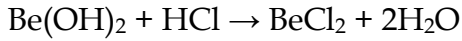


எனவே, தனிம வரிசை அட்டவணையின் இரு புறங்களிலும் உள்ள தனிமங்கள் எதிர்பார்த்தபடியே வெவ்வேறு பண்புகளைப் பெற்றுள்ளன.

ஒரு தொகுதியில் மேலிருந்து கீழாகச் செல்லும் போது, அயனியாக்கும் ஆற்றல் குறைந்து கொண்டே வருகிறது. மேலும் தனிமங்களின் நேர்மின் தன்மையானது அதிகரிக்கின்றது. எனவே இத்தனிமங்களின் ஹைட்ராக்சைடுகள் அதிக காரத் தன்மையினைக் கொண்டிருக்கின்றன. இரண்டாம் தொகுதி ஹைட்ராக்சைடுகளின் இயல்பினை நாம் கருதுவோம்.

$\text{Be}(\text{OH})_2$ ஈரியல்புத்தன்மை உடையது, $\text{Mg}(\text{OH})_2$ வலிமை குறைந்த காரம் $\text{Ba}(\text{OH})_2$ வலிமை மிக்க காரம்.

பெரிலியம் ஹைட்ராக்சைடு அமிலம் மற்றும் காரம் ஆகிய இரண்டுடனும் வினைபுரிகின்றது எனவே இது ஈரியல்பு தன்மை உடையது.



Chemistry

அலகு 10 வேதிப் பிணைப்புகள்

அறிமுகம்

வைரம் கடினத்தன்மை உடையது அதே நேரத்தில் அதன் மற்றொரு புறவேற்றுமை வடிவமான கிராபைட் மிக மென்மையானது. ஹைட்ரஜன், மற்றும் ஆக்சிஜன் ஆகியன ஈரணு மூலக்கூறுகளாகும் ஆனால் மந்த வாயுக்கள் ஓரணு வாயுக்களாக உள்ளன. கார்பன், குளோரின் இணைந்து திரவ நிலையில் உள்ள நீருடன் கலக்காத கார்பன் டெட்ராகுளோரைடை தருகிறது. சோடியம், குளோரின் இணைந்து கடினமானதும், படிக நிலையில் உள்ளதும், நீரில் எளிதில் கரையும் தன்மையுடையதுமான சோடியம் குளோரைடைத் தருகிறது.

மேற்கண்டுள்ள பண்புகளுக்கு அம்மூலக்கூறுகளில் காணப்படும் அணுக்கருக்கு இடையேயான இடையீட்டின் தன்மையே அடிப்படையாக அமைகின்றன. மேலும் இந்த இடையீடுகளே மூலக்கூறுகளில் உள்ள அணுக்கள்/அயனிகளை பிணைத்து வைத்திருக்க காரணமாகவும் அமைகின்றன. ஒரு மூலக்கூறில் உள்ள அணுக்கள் / அயனிகளை பிணைத்து வைத்திருக்க காரணமான அணுக்களுக்கிடையேயான கவர்ச்சி விசையே வேதிப்பிணைப்பு எனப்படுகிறது.

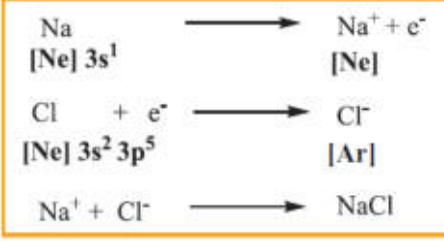
அணுக்கள் ஒரு குறிப்பிட்ட விகிதத்தில் மட்டுமே இணைந்து மூலக்கூறுகளை உருவாக்குகின்றன ஏன்? எடுத்துக்காட்டாக ஆக்சிஜன், ஹைட்ரஜனுடன் இணைந்து நீரைத் தருகிறது (H_2O) மேலும் கார்பனுடன் இணையும் போது கார்பனுடன் இணையும் போது கார்பன்டை ஆக்ஸைடைத் (CO_2) தருகிறது. நீர் மூலக்கூறு 'V' வடிவத்தைப் பெற்றுள்ளது. ஆனால் CO_2 நேர்கோட்டு வடிவமைப்பை பெற்றுள்ளது. மேற்கண்டுள்ளவை போன்ற வினாக்களுக்கு விடையளிக்க வேதிப் பிணைப்பினைப் பற்றிய கொள்கைகள் பயன்படுகின்றன. பல ஆண்டுகளாக மேம்படுத்தப்பட்டு, வேதிப் பிணைப்பினை விளக்குவதற்காக பயன்படுத்தப்பட்டு வரும் பல்வேறு கொள்கைகள் மற்றும் கோட்பாடுகளைப் பற்றி இப்பாடப்பகுதியில் கற்போம்.

வேதிப்பிணைப்பு பற்றிய கோசல்-லூயிசின் அணுகுமுறை

1916ல் வேதிப்பிணைப்பு பற்றிய தர்க்க ரீதியான அணுகு முறையானது கோசல் மற்றும் லூயிஸ் ஆகிய அறிவியல் அறிஞர்களால் முன்மொழியப்பட்டது. மந்த வாயுக்கள் பிற அணுக்களுடன் வினைபுரியாத அல்லது அரிதாக வினைபுரியும் தன்மையைப் பெற்று மந்தத் தன்மையுடன் இருப்பதன் அடிப்படையில் வேதிப்பிணைப்பு உருவாதலை இவ்வறிவியல் அறிஞர்கள் அணுகினார்கள்.

முழுவதுமாக நிரப்பப்பட்ட வெளிக்கூட்டு எலக்ட்ரான் அமைப்பினை மந்த வாயுக்கள் பெற்றிருப்பதால் அவைகள் அதிக நிலைப்புத் தன்மையினைப் அவைகள் அதிக நிலைப்புத் தன்மையினைப் பெற்றுள்ளன என இவர்கள் முன்மொழிந்தனர். மந்த வாயுக்களைத் தவிர்த்த பிற தனிமங்கள் தங்கள் வெளிக்கூட்டில் உள்ள ஒன்று அல்லது அதற்கு மேற்பட்ட எலக்ட்ரான்களை இழத்தல், ஏற்றுக்கொள்ளாதல் அல்லது பங்கிடுதல் ஆகியவற்றின் மூலம் நிலைப்புத் தன்மையை பெற முயல்கின்றன. எடுத்தக்காட்டாக, $NaCl$ உருவாதலில் சோடியம் ஒரு எலக்ட்ரானை இழப்பதன் மூலம் Na^+ அயனி உருவாகிறது. அது இழக்கும் எலக்ட்ரானை குளோரின் ஏற்றுக் கொண்டு Cl^- அயனி உருவாகிறது. இதன் விளைவாக இரண்டு அணுக்களும் தங்களுக்கு அருகே உள்ள மந்த வாயுக்களின் நிலையான எலக்ட்ரான் அமைப்பினைப் பெறுகின்றன.

இவ்வாறு உருவான மற்றும் அயனிகளுக்கிடையேயான மின் நிலையியல் கவர்ச்சிவிசையின் காரணமாக இவ்வயனிகள் பிணைக்கப்பட்டுள்ளன மேலும் இந்த கவர்ச்சி விசையானது வேதிப்பிணைப்பு என அழைக்கப்படுகிறது குறிப்பாக அயனிப்பிணைப்பு எனப்படுகிறது.



நைட்ரஜன், ஆக்சிஜன் போன்ற ஈரணு மூலக்கூறுகளில், அவற்றின் அணுக்களுக்கிடையே எலக்ட்ரான்களைப் பங்கிட்டுக்கொள்வதன் மூலமாக நிலையான எலக்ட்ரான் அமைப்பு உருவாகிறது என்ற கருத்தினை C. N. லூயிஸ் முன்மொழிந்தார். அணுக்களுக்கிடையேயான வேதிப்பிணைப்பு மற்றும் இணைந்துள்ள அணுக்களின் வெளிக்கூட்டில் காணப்படும் எலக்ட்ரான்களை குறிப்பிட்டுக்காட்ட ஒரு எளிய முறையினை அவர் அறிமுகப்படுத்தினார். அம்முறை லூயிஸ் புள்ளி வடிவமைப்பு என அழைக்கப்படுகிறது. இம் முறையில் ஒரு அணுவின் எழுத்து வடிவ குறியீட்டினைச் சுற்றி அவற்றின் இணைதிறன் எலக்ட்ரான்கள் சிறிய புள்ளிகள் மூலம் குறித்துக்காட்டப்படுகிறது. முதல் நான்கு எலக்ட்ரான்கள் அணு குறியீட்டின் நான்கு புறமும் நான்கு புள்ளிகளாகக் குறிக்கப்படுகின்றது. ஐந்தாவது எலக்ட்ரானிலிருந்து, எலக்ட்ரான்கள் இரட்டைகளாக குறிப்பிடப்படுகின்றன. எடுத்துக்காட்டாக நைட்ரஜனின் எலக்ட்ரான் அமைப்பு $1s^2, 2s^2, 3p^2$ இது ஐந்து இணைதிற எலக்ட்ரான்களை வெளிக்கூட்டில் பெற்றுள்ளது. இதன் லூயிஸ் வடிவமைப்பு பின்வருமாறு



நைட்ரஜனின் லூயிஸ் வடிவமைப்பு

இதைப்போலவே, கார்பன் மற்றும் ஆக்சிஜனின் லூயிஸ் வடிவமைப்பினை பின்வருமாறு எழுத முடியும்.



C மற்றும் Oன் லூயிஸ் வடிவமைப்புகள்

விதிவிலக்காக, இரண்டே எலக்ட்ரான்களை இணைதிற கூட்டில் பெற்றுள்ள ஹீலியத்தில் உள்ள இரு எலக்ட்ரான்கள், ஒரு இரட்டையாகக் குறிப்பிடப்படுகின்றது.



He அணுவின் லூயிஸ் வடிவமைப்பு

எண்ம விதி:

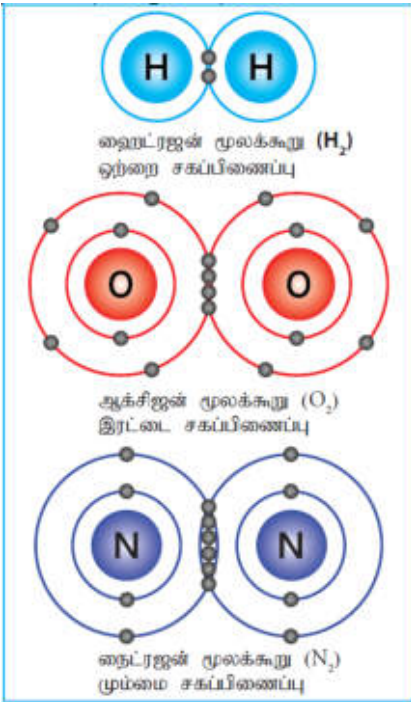
வேதிப்பிணைப்பு பற்றிய கோசல்-லூயிஸ் அணுகுமுறையானது எண்மவிதி உருவாக காரணமாக அமைந்தது. ஒரு வேதிப் பிணைப்பில் ஈடுபடும் அனைத்து அணுக்களும் தங்களது இணைதிற வெளிக்கூட்டில் 8 எலக்ட்ரான்களைப் பெறும் வகையில் தங்களுக்குள் எலக்ட்ரான்களை பரிமாற்றம் அல்லது பங்கீடு செய்து கொள்கின்றன.

வேதிப்பிணைப்பின் வகைகள்

பிணைக்கப்பட்டுள்ள அணுக்களுக்கு இடையே காணப்படும் இடையீட்டின் தன்மையினைப் பொறுத்து வேதிப்பிணைப்பினை வகைப்படுத்த இயலும், சகப்பிணைப்பு, அயனிப்பிணைப்பு ஆகியன வேதிப்பிணைப்பின் இரு பெரும் வகைகளாகும், பொதுவாக உலோகங்கள், அலோகங்களுடன் வினைபுரியும் போது அயனிச் சேர்மங்களை உருவாக்குகின்றன. மேலும் அலோகங்களின் சேர்மங்களில் சகப்பிணைப்பு காணப்படுகின்றது.

சகப்பிணைப்புகள்:

மந்த வாயுக்களைத் தவிர்த்து பிற அனைத்து தனிமங்களும் சேர்மங்களாகவோ காணப்படுவது உங்களுக்குத் தெரியுமா? இரண்டு ஹைட்ரஜன் அணுக்கள் இணைவதால் உருவாகும் ஹைட்ரஜன் மூலக்கூறினை நாம் கருதுவோம். ஒவ்வொரு ஹைட்ரஜன் அணுவும் ஒவ்வொரு எலக்ட்ரான்களைப் பெற்றுள்ளன. இவ்விரு ஹைட்ரஜன் அணுக்களும் தங்களுக்கு அருகாமையில் உள்ள மந்த வாயுவான ஹீலியத்தின் எலக்ட்ரான் அமைப்பினைப் பெற வேண்டுமெனில் அவைகளுக்கு மேலும் ஒரு எலக்ட்ரான் தேவை. இரு ஹைட்ரஜன் அணுக்களும் அவைவிடம் உள்ள உலக்ட்ரான்களை தங்களுக்குள் சமமாக பங்கிட்டுக்கொள்வதன் மூலம், இரு ஹைட்ரஜன்களும் நிலையான எலக்ட்ரான் அமைப்பினைப் பெறும் என லூயிஸ் கருதினார். இதைப்போலவே, ஆக்சிஜன் மூலக்கூறியல், இரு ஆக்சிஜன் அணுக்களும் தங்களுக்கிடையே இரு எலக்ட்ரான் இரட்டைகளை பங்கிட்டுக் கொள்கின்றன. மேலும் நைட்ரஜன் மூலக்கூறில், நைட்ரஜன் அணுக்களுக்கிடையே மூன்று எலக்ட்ரான் இரட்டைகள் பங்கிடப்படுகின்றன. இவ்வாறாக இணையும் இரண்டு அணுக்களுக்கிடையே ஒன்று அல்லது அதற்கு மேற்பட்ட எலக்ட்ரான் இரட்டைகள் சமமாகப் பங்கிடப்படுவதால் அவைகளுக்கிடையே வேதிப் பிணைப்பு உருவாகிறது. இப்பிணைப்பு சகப்பிணைப்பு என்றழைக்கப் படுகிறது. ஹைட்ரஜனைப் போன்று இணையும் இரு அணுக்களுக்கிடையே ஒரேயொரு எலக்ட்ரான் இரட்டை பங்கிடப்படுவதால் அவைகளுக்கிடையே ஒற்றை சகப்பிணைப்பு உருவாகிறது. இரண்டு அல்லது மூன்று எலக்ட்ரான் இரட்டைகள் பங்கிடப்படும் நிலைகளில், அவைகளுக்கிடையே முறையே இரட்டை மற்றும் முப்பிணைப்புகள் உருவாகின்றன.



படம் 10.4. சகப்பிணைப்புகளைக் குறிக்கும் லூயிஸ் வடிவமைப்புகள்

சகப்பிணைப்பைக் குறித்துக் காட்டுதல் லூயிஸ் வடிவமைப்புகள்

இரு அணுக்களுக்கிடையேயான சகப்பிணைப்பினை உருவகப்படுத்தி குறித்துக்காட்டும் வடிவங்கள் லூயிஸ் வடிவமைப்புகள் எனப்படுகின்றன. இந்த வடிவமைப்பில், இணையும் அணுக்களுக்கிடையே பங்கிடப்பட்ட இணைதிற எலக்ட்ரான்கள் அவ்வணுக்களுக்கிடையே இரட்டை புள்ளிகளாகவும் (சிறு நேர் கோடாகவும்), பங்கிடப்படாத பிணைப்பில் ஈடுபடாத எலக்ட்ரான்கள் அவ்வணுவின் மீது தனித்த இரட்டைகளாகவும் குறிப்பிடப்படுகின்றன.

கொடுக்கப்பட்ட ஒரு சேர்மத்திற்கு, லூயிஸ் வடிவமைப்பினை பின்வரும் படிநிலைகளைப் பின்பற்றி எழுத முடியும். நீர் மூலக்கூறிற்கு லூயிஸ் வடிவமைப்பை எழுதுவதன் மூலம் இப்படிநிலைகளை நாம் புரிந்து கொள்வோம்.

1. மூலக்கூறில் உள்ள அணுக்களின் அமைப்பினை குறித்தல்:

பொதுவாக, குறைந்த எலக்ட்ரான் கவர்தன்மை உடைய அணுவானது மையத்தில் குறிக்கப்பட வேண்டும். ஹைட்ரஜன் மற்றும் புளூரின் அணுக்கள் வடிவமைப்பின் இறுதி முனைப்பகுதியில் குறிக்கப்பட வேண்டும். நீர் மூலக்கூறுக்கான அணுக்களின் அமைவு வடிவமைப்பு பின்வருமாறு.



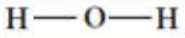
2. ஒரு மூலக்கூறில் உள்ள அனைத்து அணுக்களின் இணைதிற எலக்ட்ரான்களின் மொத்த எண்ணிக்கையினைக் கணக்கிடுதல்:

பல அணுக்களைக் கொண்ட அயனிகளைப் பொறுத்த வகையில், இணைதிற எலக்ட்ரான்களைக் கணக்கிடும் போது அயனியின் மின்சமையினையும் கருத்திற்கொள்ள வேண்டும். எதிரயனிகளைப் பொறுத்தவரையில், இணைதிற எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கையுடன் எதிரயனியின் மின்சமை எண்ணிக்கையும் சேர்த்துக் கொள்ள வேண்டும். நேர் அயனிகளைப் பொறுத்த வரையில், ஒட்டு மொத்த இணைதிற எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கையிலிருந்து நேர் அயனியின் மின்சமை கழிக்கப்பட வேண்டும்.

நீர் மூலக்கூறில், ஒட்டு மொத்த இணைதிற எலக்ட்ரான்கள் = $[2 \times 1$ (ஹைட்ரஜனின் இணைதிற எலக்ட்ரான்)] + $[1 \times 6$ (ஆக்சிஜனின் இணைதிற எலக்ட்ரான்கள்)] = $2 + 6 = 8$.

3. மூலக்கூறின் அணு அமைவு அமைப்பில், அணுக்களுக்கிடையே ஒற்றைப் பிணைப்பை வரைதல்:

ஒவ்வொரு பிணைப்பும், இரு இணைதிற எலக்ட்ரான்களைக் (ஒரு பிணைப்பு இரட்டை) குறிப்பிடுகின்றது. நீர் மூலக்கூறில், நான்கு இணைதிற எலக்ட்ரான்களுக்கு பின்வருமாறு இரு பிணைப்புகளை நாம் வரைய முடியும்.



4. மீதமுள்ள இணைதிற எலக்ட்ரான்களை இரட்டைகளாக (தனித்த இரட்டை) மூலக்கூறில் உள்ள அனைத்து அணுக்களும் எட்டு எலக்ட்ரான்களைப் (ஹைட்ரஜனைப் பொறுத்த வரையில் இரட்டை எலக்ட்ரான்) பெறும் வகையில் பங்கிடும்.

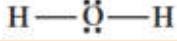
முதலில் அதிக எலக்ட்ரான்கவர் தன்மை கொண்ட அணுவில் தொடங்கி, பின்னர் அதனைத் தொடர்ந்து மற்ற அணுக்களுக்கு தனித்த எலக்ட்ரான் இரட்டை பங்கிடப்படுதல் வேண்டும்.

நீர் மூலக்கூறில், மீதமுள்ள நான்கு எலக்ட்ரான்களும் அதிக எலக்ட்ரான் கவர் தன்மை உடைய மைய எலக்ட்ரான் கவர் தன்மை உடைய மைய ஆக்சிஜன் மீது இரு தனித்த இரட்டைகளாக குறிக்கப்படுகிறது. ஆக்சிஜன் எட்டு எலக்ட்ரான்களைப் பெறுகிறது.



5. அனைத்து அணுக்களும் எட்டு எலக்ட்ரான் விதியினை நிறைவு (அணுவிற்கு இரட்டை எலக்ட்ரான்) செய்கின்றனவா என சரிபார்த்தல், நிறைவு செய்யவில்லை எனில், தனித்த இரட்டை எலக்ட்ரான்களைப் பயன்படுத்தி அணுக்களுக்கிடையே கூடுதல் பிணைப்புகளை உருவாக்குவதன் மூலம் எட்டு எலக்ட்ரான் விதியினை நிறைவு செய்ய வேண்டும்.

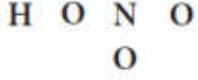
நீர் மூலக்கூறைப் பொறுத்த வரையில், மேற்கண்டுள்ள அமைப்பில், ஆக்சிஜன் எட்டு எலக்ட்ரான்களையும், ஹைட்ரஜன் இரு எலக்ட்ரான்களையும் பெற்று இருப்பதால், தனித்த இரட்டையைப் பயன்படுத்தி கூடுதல் பிணைப்பினை உருவாக்க வேண்டிய நிலை எழவில்லை. எனவே நீரின் லூயிஸ் அமைப்பு



படம் 10.5 நீரின் லூயிஸ் அமைப்பு

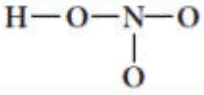
நைட்ரிக் அமிலத்திற்கான லூயிஸ் அமைப்பினை நாம் வரைவோம்.

1. அணுக்களின் அமைவு அமைப்பு

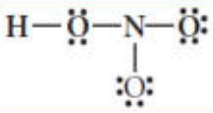


2. HNO_3 ல் உள்ள ஒட்டு மொத்த இணைதிற எலக்ட்ரான்கள் = $[1 \text{ (ஹைட்ரஜன்)} \times 1] + [1 \text{ (நைட்ரஜன்)} \times 5] + [3 \text{ (ஆக்சிஜன்)} \times 6] = 1 + 5 + 18 = 24$

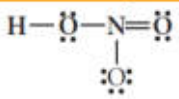
3. அணுக்களுக்கிடையே ஒற்றைப் பிணைப்பினை வரைக. HNO_3 -க்கு படத்தில் காட்டியுள்ளவாறு நான்கு பிணைப்புகளை வரைய இயலும். இது எட்டு எலக்ட்ரான்களால் (4 பிணைப்பு இரட்டை) உருவாக்கப் பட்டதாகும்.



4. மீதமுள்ள 16 எலக்ட்ரான்களை ($24-8 = 16$) அதிக எலக்ட்ரான் கவர் தன்மையுடைய ஆக்சிஜன் அணுவிலிருந்து துவங்கி ஒவ்வொரு அணுவும் எட்டு எலக்ட்ரான்களைப் பெறும் வகையில் பங்கீடு செய்ய வேண்டும். வடிவமைப்பின் முனைப் பகுதியில் உள்ள ஒவ்வொரு ஆக்சிஜன் மீதும் தலா மூன்று ஜோடி தனித்த எலக்ட்ரான்கள் என மொத்தம் ஆறு தனித்த ஜோடி எலக்ட்ரான்கள், எட்டு எலக்ட்ரான் விதியை நிறைவு செய்யும் வகையில் பங்கிடப்படுகின்றது. மீதமுள்ள இரு தனித்த இரட்டைகளை ஹைட்ரஜனோடு இணைக்கப்பட்டுள்ள, ஆக்சிஜன் மீது பங்கிடுவதன் மூலம் அது எட்டு எலக்ட்ரானைப் பெறும்.



5. அனைத்து அணுக்களும் எட்டு எலக்ட்ரான் அமைப்பினைப் பெற்றுள்ளதா என்பதை சரிபார்க்க வேண்டும். மேற்கண்டுள்ள பங்கீட்டில், நைட்ரஜனானது எட்டு எலக்ட்ரான்களைப்பெற ஒரு இரட்டை குறைவாக உள்ளது. எனவே வடிவமைப்பில் இறுதியில் உள்ள ஆக்சிஜனிலிருந்து ஒரு தனித்த இரட்டையினை பயன்படுத்தி அந்த ஆக்சிஜனுக்கும், நைட்ரஜனுக்கும் இடையே மற்றுமொரு பிணைப்பினை உருவாக்குக. நைட்ரிக் அமிலத்தின் லூயிஸ் வடிவமைப்பானது.



நைட்ரிக் அமிலத்தின் லூயிஸ் அமைப்பு

சிட்டவணை 10.1. சில மூலக்கூறுகளுக்கான லூயிஸ் புள்ளி அமைப்புகள்

வ. எண்	மூலக்கூறு	லூயிஸ் வடிவமைப்பு	லூயிஸ் வடிவமைப்பு
1.	கந்தக டிரைஆக்சைடு (Sulphur trioxide) SO_3	$\begin{array}{c} \text{:}\ddot{\text{O}}\text{:} \\ \\ \text{:}\ddot{\text{O}}\text{--S=}\ddot{\text{O}}\text{:} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{:}\ddot{\text{O}}\text{:} \\ \text{:}\ddot{\text{O}}\text{:S}::\ddot{\text{O}}\text{:} \end{array}$
2.	அம்மோனியா (Ammonia) (NH_3)	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H--N--H} \\ \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \text{H}::\text{N}::\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$
3.	மீத்தேன் (Methane) (CH_4)	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H--C--H} \\ \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \text{H}::\text{C}::\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$
4.	டைநைட்ரஜன் பெண்டாக்சைடு (Dinitrogen Pentoxide) (N_2O_5)	$\begin{array}{c} \text{:}\ddot{\text{O}}\text{=N--}\ddot{\text{O}}\text{--N=}\ddot{\text{O}}\text{:} \\ \quad \\ \text{:}\ddot{\text{O}}\text{:} \quad \text{:}\ddot{\text{O}}\text{:} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{:}\ddot{\text{O}}\text{:N}::\ddot{\text{O}}\text{:N}::\ddot{\text{O}}\text{:} \\ \text{:}\ddot{\text{O}}\text{:} \quad \text{:}\ddot{\text{O}}\text{:} \end{array}$

முறைசார் மின்சுமை (Formal charge):

கார்பன்-டை-ஆக்சைடிற்கான லூயிஸ் வடிவமைப்பினை நாம் வரைவோம்.

1. அணு அமைவு அமைப்பு

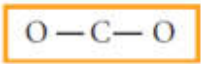


2. CO_2 ல் உள்ள மொத்த இணைதிறன் எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை

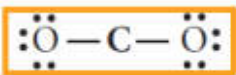
$$= [1 \text{ (கார்பன்)} \times 4] + [2 \text{ (ஆக்சிஜன்)} \times 6] = 4 + 12 = 16$$

3. அணுக்களுக்கிடையே ஒற்றை பிணைப்பை வரைக.

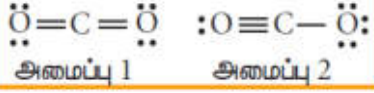
CO_2 மூலக்கூறுக்கு பின்வரும் படத்தில் காட்டியுள்ளவாறு இரு ஒற்றை பிணைப்புகளை வரைய முடியும். இப்பணைப்பு உருவாக (இரண்டு பிணைப்பு இரட்டைகள்) நான்கு எலக்ட்ரான்கள் காரணமாக அமைகின்றன.



4. மீதமுள்ள பன்னிரண்டு (16-4=12) எலக்ட்ரான்களை ஆறு தனித்த இரட்டை எலக்ட்ரான்களாக, அதிக எலக்ட்ரான் கவர் தன்மை உடைய ஆக்சிஜனில் துவங்கி பங்கீடு செய்க. முனை இறுதியில் உள்ள இரண்டு ஆக்சிஜன்கள் மீது அவைகள் எட்டு எலக்ட்ரான்களைப் பெறும் வகையில் (ஒவ்வொரு ஆக்சிஜனுக்கும் தலா மூன்று எலக்ட்ரான் இரட்டைகளை) பங்கீடு செய்க.



5. அனைத்து அணுக்களும் எட்டு எலக்ட்ரான் அமைப்பினை பெற்றுள்ளனவா என சரிபார்க்க. மேற்கண்டுள்ள பங்கீட்டில், மையத்தில் உள்ள கார்பன் அணு எட்டு எலக்ட்ரான்களைப் பெறுவதற்கு இரண்டு எலக்ட்ரான் இரட்டைகளைக் குறைவாகப் பெற்றுள்ளது. எனவே, எட்டு எலக்ட்ரான் விதியினை நிறைவு செய்யும் பொருளும் ஒவ்வொரு ஆக்சிஜன் அணுவிலிருந்தும் ஒரு தனித்த இரட்டை எலக்ட்ரானைப் பயன்படுத்தியோ அல்லது ஒரு ஆக்சிஜன் அணுவிலிருந்து இரண்டு எலக்ட்ரான் இரட்டைகளைப் பயன்படுத்தியோ கார்பனுடன் ஒன்றிற்கும் மேற்பட்ட பிணைப்புகளை உருவாக்குவதன் மூலம் பின் வரும் இரு வடிவங்கள் சாத்தியமாகின்றன.



கார்பன்டை ஆக்ஸைடிற்கான சாத்தியமான இரு வடிவங்கள்

இதைப்போலவே, மேற்கண்டுள்ள வழிமுறையினைப் பயன்படுத்தி லூயிஸ் வடிவங்களை வரையும் போது பல மூலக்கூறுகளுக்கு ஒன்றிற்கும் மேற்பட்ட ஏற்கத்தக்க வடிவங்களை வரைய வாய்ப்புள்ளது.

CO₂ ன் மேற்கண்டுள்ள இரு வடிவங்களில், எந்த ஒரு வடிவத்தில் எலக்ட்ரான்களின் பங்கீடு சீராக அமைந்துள்ளது? இவ்வினாவிற்கான விடையினை நாம் தெரிந்து கொள்ள லூயிஸ் அமைப்பில் உள்ள ஒவ்வொரு அணுவின் மீதமுள்ள முறைசார் மின்சுமை மதிப்பை நாம் அறிந்திருக்க வேண்டும்.

ஒரு மூலக்கூறில் உள்ள தனித்த அணு ஒன்றின் இணைதிறன் எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கைக்கும், லூயிஸ் அமைப்பில் அந்த அணுவிற்கு ஒதுக்கீடு செய்யப்பட்ட எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கைக்கும் இடையேயான மின்சுமை வேறுபாடே அம்மூலக்கூறில் அந்த அணுவின் முறைசார் மின்சுமை எனப்படுகிறது.

$$\text{ஒரு அணுவின் முறைசார் மின்சுமை} = N_v - \left(N_l + \frac{N_b}{2} \right)$$

N_v - இங்கு, தனித்த நிலையில் உள்ள அணு ஒன்றின் இணைதிற எலக்ட்ரான்கள்

N_l - லூயி அமைப்பில் அணுவினைச் சுற்றி தனித்த இரட்டைகளாகக் காணப்படும் எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை.

N_b - லூயி அமைப்பில் அணுவினைச் சுற்றியுள்ள பிணைப்பு இரட்டை எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை

இப்போது இரு அமைப்புகளிலும் காணப்படும் அணுக்களின் முறைசார் மின்சுமை மதிப்பினைக் கணக்கிடுவோம்.

வடிவமைப் 1ற்கு,

$$\begin{aligned} \text{கார்பனின் முறைசார் மின்சுமை} &= N_v - \left(N_l + \frac{N_b}{2} \right) \\ &= 4 - \left(0 + \frac{8}{2} \right) = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{ஆக்சிஜனின் முறைசார் மின்சுமை} &= 6 - \left(4 + \frac{4}{2} \right) \\ &= 0 \text{ (இரண்டு ஆக்சிஜன் மட்டும்)} \end{aligned}$$

வடிவமைப்பு 2 ற்கு

கார்பன் அணுவின் மேல் உள்ள முறைசார் மின்சுமை

$$= N_v - \left(N_l + \frac{N_b}{2} \right)$$

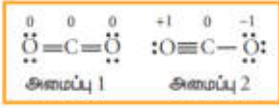
$$= 4 - \left(0 + \frac{8}{2} \right) = 0$$

ஆக்சிஜன் அணுவின் மேல் உள்ள முறைசார் மின்சுமை

$$= 6 - \left(6 + \frac{2}{2} \right) = -1$$

மும்மை பிணைப்புக் கொண்ட ஆக்சிஜன் அணுவின் மேல் உள்ள முறைசார் மின்சுமை

$$= 6 - \left(2 + \frac{6}{2} \right) = +1$$



படம் 10.7 கார்பன்-டை-ஆக்சைடுக்கான சாத்தியமான இரு அமைப்புகள் (முறைசார் மின்சுமையுடன்)

முறைசார் மின்சுமை மதிப்புகளிலிருந்து பின்வரும் வழிமுறைகளைப் பின்பற்றி மிக பொருத்தமான லூயிஸ் வடிவமைப்பை தெரிவு செய்யலாம்.

1. அனைத்து அணுக்களின் முறைசார் மின் சுமை மதிப்புகளும் பூஜ்ஜியமாக உள்ள வடிவமைப்பானது, பிற முறைசார் மின்சுமை காணப்படும் வடிவமைப்புகளைக் காட்டிலும் முன்னுரிமை பெறுகிறது.
2. முறைசார் மின்சுமை மதிப்பு குறைவாக உள்ள வடிவமைப்பானது, அதிகமான முறைசார் மின்சுமை கொண்டுள்ள வடிவமைப்பை விட முன்னுரிமை பெறுகிறது.
3. ஒரு வடிவமைப்பில், அதிக எலக்ட்ரான் கவர்தன்மை உடைய அணு, எதிர் முறைசார் மின்சுமையைப் பெற்றிருப்பின் அவ்வமைப்பு முன்னுரிமையுடையது.

கார்பன் டையாக்சைடுன் (CO_2) வடிவமைப்புகளில், வடிவமைப்பு 1ல் அனைத்து முறைசார் மின்சுமை மதிப்புகளும் பூஜ்ஜியம் என்பதால் இவ்வமைப்பு வடிவமைப்பு 2 ஐக் காட்டிலும் அதிக முன்னுரிமை பெறுகிறது.

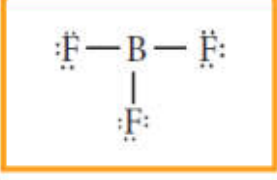
எட்டு எலக்ட்ரான் விதிக்கு விதிவிலக்காக அமையும் லூயிஸ் அமைப்புகள்

எட்டு எலக்ட்ரான் விதியானது, இரண்டாம் வரிசைத் தனிமங்களை எமைய அணுவாகக் கொண்டுள்ள மூலக் கூறுகளுக்கான லூயிஸ் அமைப்புகளை எழுதுவதற்கு பயன்படுகிறது. சில சேர்மங்களில், மைய அணுவானது எட்டு எலக்ட்ரான்களை விட கூடுதலாகவோ அல்லது குறைவான எண்ணிக்கையிலோ எலக்ட்ரான்களைப் பெற்றுள்ளன. எட்டு எலக்ட்ரான் விதிக்கு விதிவிலக்காக அமைந்துள்ள நேர்வுகளை பின்வருமாறு மூன்று வகைகளாக வகைப்படுத்தலாம்.

1. எலக்ட்ரான் பற்றாக்குறைவாக உள்ள மைய அணுவைக் கொண்டுள்ள மூலக்கூறுகள்.
2. ஒற்றை எலக்ட்ரான்களைக் கொண்டுள்ள மூலக்கூறுகள்.
3. இணைதிற கூட்டினை விரிவாக்கும் தன்மையுடைய மூலக்கூறுகள்.

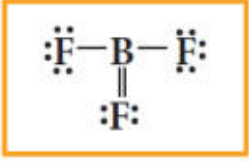
எலக்ட்ரான் குறை மைய அணுவைப் பெற்றுள்ள மூலக்கூறுகள்

போரான் ட்ரை புளூரைடை நாம் எடுத்துக்காட்டாகக் கருதுவோம். மைய போரான் அணுவானது மூன்று இணைதிற எலக்ட்ரான்களைக் கொண்டுள்ளது. மேலும் ஒவ்வொரு புளூரின் அணுவும் ஏழு இணைதிற எலக்ட்ரான்களைப் பெற்றுள்ளன. லூயிஸ் வடிவமைப்பானது.



BF₃ ன் லூயிஸ் வடிவமைப்பு

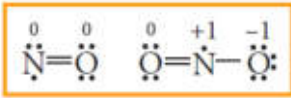
மேற்கண்டுள்ள வடிவமைப்பில், போரான், அணுவினைச் சுற்றி ஆறு எலக்ட்ரான்கள் மட்டுமே உள்ளன. புளூரின்னில் உள்ள ஒரு தனித்த இரட்டை மூலம் போரானிற்கும், புளூரின்னிற்கும் இடையே கூடுதலாக ஒரு பிணைப்பை பின்வருமாறு ஏற்படுத்துக.



எனினும், மேற்கண்டுள்ள அமைப்பில் அதிக எலக்ட்ரான்கவர் தன்மையடைய புளூரின்னின் முறைசார் மின்சமையானது நேர்மின்சமையாக இருப்பதாக இவ்வடிவமைப்பு ஏற்கத்தக்கதல்ல. எனவே மைய போரான் எட்டு எலக்ட்ரான்களை நிறைவாக பெறாமல் உள்ள லூயிஸ் வடிவமைப்பே சாத்தியமான ஒன்றாகும். BCl₃, BeCl₂ போன்ற மூலக்கூறுகளிலும் நிறைவடையா எட்டு எலக்ட்ரான் அமைப்பு காணப்படுகிறது.

ஒற்றை எண்ணிக்கையில் எலக்ட்ரான்களைக் கொண்டுள்ள மூலக்கூறுகள்

சில மூலக்கூறுகளில், மைய அணுவானது, ஒற்றைப்படை எண்ணிக்கையில் இணைதிற எலக்ட்ரான்களைப் பெற்றுள்ளன. எடுத்துக்காட்டாக, நைட்ரஜன் டை ஆக்ஸைடு மற்றும் நைட்ரிக் ஆக்ஸைடுகளில் அனைத்து அணுக்களும் முழுமையான எட்டு எலக்ட்ரான் அமைப்பை பெற்றிருப்பதில்லை. அம் மூலக்கூறுகளின் லூயிஸ் வடிவமைப்புகள் பின்வருமாறு.

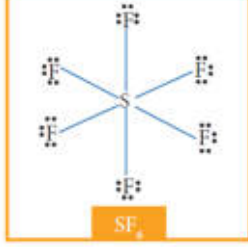
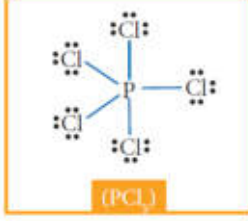


படம் 10.9 நைட்ரிக் ஆக்ஸைடு மற்றும் நைட்ரஜன் டை ஆக்ஸைடுன் லூயிஸ் வடிவமைப்புகள் (முறைசார் மின் சமையுடன்)

இணைதிறன் கூட்டினை விரிவாக்கும் தன்மை பெற்றுள்ள மூலக்கூறுகள்

கந்தக ஹெக்ஸா புளூரைடு (SF₆), பாஸ்பரஸ் பென்டா குளோரைடு (PCl₅) போன்ற மூலக்கூறுகளில், மைய அணுவானது, அவற்றைச் சுற்றி எட்டு எலக்ட்ரான்களை விட அதிக எண்ணிக்கையில், மைய அணுவானது, அவற்றைச் சுற்றி எட்டு எலக்ட்ரான்களை விட அதிக எண்ணிக்கையில் எலக்ட்ரான்களைப் பெற்றுள்ளன. இம்மூலக்கூறில் கூடுதல் எலக்ட்ரான் இரட்டைகள் இடம் பெறுவதற்கு மைய அணுவின் காலியான வெளி d ஆர்பிட்டால்கள் பயன்படுகின்றன.

மையத்தில் உள்ள கந்தக அணுவினைச்சுற்றி ஆறு எலக்ட்ரான் இரட்டைகள் (12 எலக்ட்ரான்கள்) அமைந்துள்ளன.



படம் 10.10 SF₆ மற்றும் PCl₅ ன் லூயிஸ் வடிவமைப்புகள்

அயனிப்பிணைப்பு

பிணைக்கப்பட்டுள்ள இரு அணுக்களுக்கிடையேயான எலக்ட்ரான் கவர் தன்மை மதிப்பின் வேறுபாடு அதிகமாக உள்ளபோது, குறைவான எலக்ட்ரான் கவர்தன்மை உடைய அணுவானது ஒன்று அல்லது அதற்கு மேற்பட்ட அதன் இணைதிறன் எலக்ட்ரான்களை இணையும் மற்றொரு அணுவிற்கு முழுவதுமாக பரிமாற்றம் செய்வதன் மூலம் பிணைக்கப்படும் இரு அணுக்களும் தங்களுக்கு அருகாமையில் உள்ள மந்த வாயுக்களின் நிலையான எலக்ட்ரான் அமைப்பினைப் பெறுகின்றன. எலக்ட்ரான்கள் அமைப்பினைப் பெறுகின்றன. எலக்ட்ரான்கள் முற்றிலுமாக பரிமாற்றம் செய்யப்படுவதால் நேர் மற்றும் எதிர் மின் சமையுடை அயனிகள் உருவாகின்றன. இவ்விரு கவர்ச்சி விசையால் ஒன்றோடொன்று பிணைக்கப்படுகின்றன. இப்பிணைப்பு அயனிப்பிணைப்பு எனப்படுகிறது.

பொட்டாசியம் (K) : [Ar] 4s¹

குளோரின் (Cl) : [Ne]3s², 3p⁵

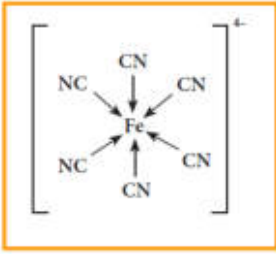
பொட்டாசியம் தனது இணைதிறன் கூட்டில் ஒரு எலக்ட்ரானையும், குளோரின் தனது இணைதிறன் கூட்டில் ஏழு எலக்ட்ரான்களையும் பெற்றுள்ளது. பொட்டாசியம் அணு ஒரு எலக்ட்ரானை இழப்பதால் ஆர்கானின் நிலையான எலக்ட்ரான் அமைப்பினைப் பெற்று K⁺ அயனியாக மாறுகிறது. பொட்டாசியம் இழந்த எலக்ட்ரானை ஏற்றுக் கொண்டு Cl⁻ அயனியாக மாறுவதன் மூலம் குளோரினானது ஆர்கானின் நிலையான எலக்ட்ரான் அமைப்பினைப் பெறுகிறது. இவ்விரு அயனிகளும் இணைந்து (KCl) பொட்டாசியம் குளோரைடு என்ற அயனிப்படிக்கத்தை உருவாக்குகின்றன. இப்படிக்கத்தில் இந்த அயனிகள் நிலை மின்னியல் கவர்ச்சி விசையால் பிணைத்து வைக்கப்பட்டுள்ளன.

ஒரு மோல் K⁺ உருவாவதற்கு தேவைப்படும் ஆற்றலின் (அயனியாக்கும் ஆற்றல்) மதிப்பு 418.81 kJ மேலும் ஒரு மோல் Cl⁻ உருவாகும் போது வெளிப்படும் ஆற்றலின் மதிப்பு -348.56 kJ (எலக்ட்ரான் நாட்டம்) இவ்விரு ஆற்றல் மதிப்புகளின் கூடுதல் நேர்குறி உடையது (70.25kJ). எனினும், ஒரு மோல் பொட்டாசியம் குளோரைடு, அதில் இடம் பெற்றுள்ள அயனிகளிலிருந்து உருவாகும்போது 718 KJ ஆற்றல் வெளியிடப்படுகிறது. இந்நிகழ்வு KCl உருவாதலை ஆதரிப்பதுடன், மூலக்கூறினை நிலைப்புத் தன்மையுறச் செய்கிறது.

ஈதல் சப்பிணைப்பு

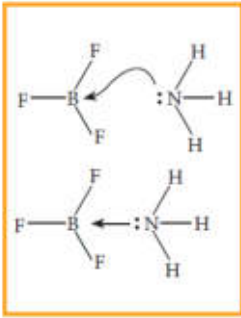
சகப்பிணைப்பு உருவாதலின்போது இணையும் இரண்டு அணுக்கள் தலா ஒவ்வொரு எலக்ட்ரானை வழங்கி, அந்த எலக்ட்ரான்களை தங்களுக்குள் சமமாகப் பங்கிட்டுக் கொள்கின்றன. சில பிணைப்பு உருவாக்கத்தின் போது, சகப்பிணைப்பு உருவாவதற்குத் தேவையான இரு எலக்ட்ரான்களையும் இணையும் இரு அணுக்களில் ஒரு அணுவே வழங்குகிறது. மேலும் அவ்வணு வழங்கும் இரு எலக்ட்ரான்கள் இணையும் மற்றொரு அணுவடன் சமமாகப் பங்கிடப்படுகிறது. இத்தகைய பிணைப்புகள் ஈதல் சப்பிணைப்பு என அழைக்கப்படுகின்றன. எலக்ட்ரான் இரட்டையை பிணைப்பிற்கு வழங்கும் அணு வழங்கி (donor) அணு எனவும் ஏற்கும் மற்றொரு அணு ஏற்பி அணு எனவும் அழைக்கப்படுகின்றன. வழங்கி அணுவிலிருந்து ஏற்பி அணுவை நோக்கிய ஒரு அம்புக் குறியால் இப்பிணைப்பு குறித்துக்காட்டப்படுகின்றது. (அணைவுச் சேர்மங்கள் பற்றி நாம் பின்னர் கற்கும்போது வழங்கி அணுவை ஈனி எனவும், ஏற்பி அணுவை மைய உலோக அணு/அயனி எனவும் அமைப்போம்).

எடுத்துக்காட்டாக, பெர்ரோசயனைடு $[Fe(CN)_6]^{4-}$ அயனியில் ஒவ்வொரு சயனைடு அயனியும் (CN^-) ஒரு எலக்ட்ரான் இரட்டையினை இரும்பு (II) ற்கு வழங்கி (Fe^{2+}) உடன் ஈதல் சகப்பிணைப்பினை ஏற்படுத்துகின்றன. மேலும் இந்த எலக்ட்ரான்கள் Fe^{2+} மற்றும் CN^- அயனிகளுக்கிடையே சமமாக பங்கிடப் படுகின்றன.



பெர்ரோ சயனைடு அயனியின் அமைப்பு

சில நேர்வுகளில், அம்மோனியா போன்ற தனித்த இரட்டை எலக்ட்ரான்களைப் பெற்றுள்ள மூலக்கூறுகள் தங்களிடம் உள்ள உலக்ட்ரான் இரட்டையினை எலக்ட்ரான் பற்றாக்குறை உள்ள BF_3 போன்ற மூலக்கூறுகளுக்கு வழங்கி ஈதல் சப்பிணைப்பினை உருவாக்குகின்றன.



படம் 10. 12 $BF_3 \leftarrow NH_3$ வடிவமைப்பு

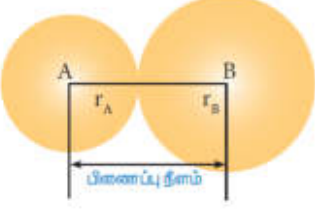
பிணைப்பு அளவீட்டுக் காரணிகள்

ஒரு சகப்பிணைப்பானது பிணைப்பு நீளம், பிணைப்புக் கோணம், பிணைப்புத் தரம் போன்ற அளவீட்டுக் காரணிகளால் வரையறுக்கப்படுகிறது. சில பிணைப்பு அளவீட்டுக் காரணிகள் பின்வரும் பகுதியில் சுருக்கமாக தரப்பட்டுள்ளன.

பிணைப்பு நீளம்

சகப்பிணைப்பால் பிணைக்கப்பட்டுள்ள இரு அணுக்களின் அணுக்கருக்களுக்கு இடைப்பட்ட தொலைவு பிணைப்பு நீளம் எனப்படுகின்றது. என்ற சகப்பிணைப்பு மூலக்கூறினைக் கருதுக. பிணைப்பு

நீளமானது பிணைக்கப்பட்டுள்ள அணுக்களின் அணு ஆரங்களின் கூடுதல் ($r_A + r_B$) மதிப்பால் பெறப்படுகிறது. நிறமாலை முடிவுகள் X-கதிர் விளிம்பு விளைவு மற்றும் எலக்ட்ரான் விளிம்பு விளைவு நுட்பங்களைப் பயன்படுத்திப் பிணைப்பு நீளத்தினைக் கண்டறியலாம். இணையும் அணுக்களின் உருவளவு மற்றும் அவைகளுக்கிடையேயான பிணைப்புகளின் எண்ணிக்கை ஆகியவற்றினைப் பொறுத்து பிணைப்பு நீளம் அமைகின்றது.



படம் 10.13 A - B அணுக்களின் மூலக்கூறின் பிணைப்பு நீளம்

அணுவின் உருவளவு அதிகமாக உள்ளபோது, பிணைப்பு நீளம் அதிகமாக இருக்கும். எடுத்துக்காட்டாக கார்பன் - கார்பன் ஒற்றை பிணைப்பின் நீளமானது (1.54\AA) கார்பன் - நைட்ரஜன் ஒற்றை பிணைப்பின் நீளத்தைக் (1.43\AA) காட்டிலும் அதிகமாகும்.

இணையும் இரு அணுக்களுக்கிடையேயான பிணைப்புகளின் எண்ணிக்கை அதிகமாக இருப்பின் பிணைப்பு நீளம் குறைவாக இருக்கும். எடுத்துக்காட்டாக கார்பன் - கார்பன் ஒற்றை பிணைப்பின் நீளம் (1.54\AA) ஆனது, கார்பன் - கார்பன் முப்பிணைப்பின் நீளம் (1.20\AA) மற்றும் கார்பன்-கார்பன் இரட்டைப் பிணைப்பு நீளம் (1.33\AA) ஆகியவற்றைக்காட்டிலும் அதிகம்.

பிணைப்புத்தரம்

ஒரு மூலக்கூறில் உள்ள இரு அணுக்களுக்கு இடையேயான பிணைப்புகளின் எண்ணிக்கை பிணைப்புத்தரம் என்றழைக்கப்படுகிறது. லூயிஸ் கொள்கையில், பிணைப்புத்தரம் என்பது பிணைக்கப்பட்டுள்ள இரு அணுக்களுக்கிடையே சமமாகப் பங்கிடப்பட்டுள்ள எலக்ட்ரான் இரட்டைகளின் எண்ணிக்கை ஆகும்.

எடுத்துக்காட்டாக ஹைட்ரஜன் மூலக் கூறில், ஒரே ஒரு எலக்ட்ரான் இரட்டையானது இரு ஹைட்ரஜன் அணுக்களுக்கிடையே பங்கிடப்பட்டுள்ளது. எனவே, ஹைட்ரஜனின் பிணைப்புத்தரம் ஒன்று. இதைப் போலவே H_2O , HCl மீத்தேன் போன்றவற்றில் மைய மீத்தேன் போன்றவற்றில் மைய அணுவானது ஒற்றைப் பிணைப்பை கொண்டுள்ளது, எனவே அம்மைய அணுவின் பிணைப்புத்தரம் ஒன்று.

அட்டவணை 10.2 சில பொதுவான பிணைப்புகளுக்கான பிணைப்புத்தரம்:

வ.எண்.	மூலக்கூறு	பிணைக்கப்பட்டுள்ள அணுக்கள்	பிணைப்புத்தரம் பிணைக்கப்பட்டுள்ள அணுக்களுக்கிடையே பங்கிடப்பட்ட எலக்ட்ரான் இரட்டைகளின் எண்ணிக்கை)
1	H_2	H-H	1
2	O_2	O=O	2
3	N_2	$N\equiv N$	3
4	HCN	$C\equiv N$	3
5	$HCHO$	C=O	2
6	CH_4	C-H	1
7	C_2H_4	C=C	2

பிணைப்புக் கோணம்

சகப்பிணைப்புகள் திசைப்பண்புடையவை அவைகள் புறவெளியில் குறித்த திசையினை நோக்கி அமைகின்றன. இத்திசைப் பண்பின் காரணமாக ஒரு மூலக்கூறின் இருசகப் பிணைப்புகளுக்கிடையே குறிப்பிட்ட நிலையான கோணம் உருவாகிறது. இக்கோணம் பிணைப்புக் கோணம் என்றழைக்கப்படுகின்றது. இது வழக்கமாக டிகிரி (°) அலகில் குறிப்பிடப்படும். நிறமலை முறைகளைப் பயன்படுத்தி பிணைப்புக் கோணத்தைக் கண்டறியலாம். மேலும் பிணைப்புக் கோணம் மூலக்கூறின் வடிவமைப்பு பற்றிய கருத்தினைத் தருகிறது.

அட்டவணை 10.3 சில மூலக்கூறுகளுக்கான பிணைப்புக் கோணம்

வ. எண்.	மூலக்கூறு	கோணம் வரையறுக்கப்படும் பிணைப்பு	பிணைப்புக் கோணம் (°)
1	CH ₄	H-C-H	109° 28'
2	NH ₃	H-N-H	107° 18'
3	H ₂ O	H-O-H	104° 35'

பிணைப்பு ஆற்றல்

ஒரு மூலக்கூறானது அதன் வாயுநிலையில் உள்ளபோது அதிலுள்ள ஒரு மோல் அளவுள்ள ஒரு குறிப்பிட்ட பிணைப்பினை பிளப்பதற்குத் தேவைப்படும் குறைந்தபட்ச ஆற்றல் அக்குறிப்பிட்ட பிணைப்பின் பிணைப்பு ஆற்றல் என வரையறுக்கப்படுகிறது. பிணைப்பு ஆற்றலின் அலகு KJmol⁻¹ பிணைப்பு ஆற்றலின் மதிப்பு அதிகமெனில், பிணைப்பு அதிகவலிமை உடையது. பிணைக்கப்பட்டிருக்கும் அணுக்களின் உருவளவு மற்றும் அவைகளுக்கிடையேயான பிணைப்புகளின் எண்ணிக்கை ஆகியவற்றினைப் பொறுத்து பிணைப்பு ஆற்றல் அமையும். பிணைப்பில் ஈடுபட்டுள்ள அணுவின் உருவளவு மற்றும் அவைகளுக்கிடையேயான பிணைப்புகளின் எண்ணிக்கை ஆகியவற்றினைப் பொறுத்து பிணைப்பு ஆற்றல் அமையும். பிணைப்பில் ஈடுபட்டுள்ள அணுவின் உருவளவு அதிகம் எனில், பிணைப்பு ஆற்றலின் மதிப்பு குறைவாகும்.

இரண்டு அல்லது அதற்கு மேற்பட்ட ஒரே மாதிரியான பிணைப்பினைக் கொண்டுள்ள பல்லணு மூலக்கூறுகளில் சராசரி பிணைப்பு ஆற்றல் என்ற சொற்கூறு (term) பயன்படுத்தப்படுகிறது. அத்தகைய பிணைப்புகளில் ஒரே மாதிரியான பிணைப்புகளின் பிணைப்பு ஆற்றல்களின் கூட்டு சராசரி மதிப்பானது சராசரி பிணைப்பு ஆற்றலாகக் கருதப்படுகிறது. எடுத்துக் காட்டாக நீர்மூலக்கூறில் இரு O - H பிணைப்புகள் காணப்படுகின்றன. மேலும் இவ்விரண்டு பிணைப்புகளை பிளப்பதற்கு தேவையான ஆற்றல் வெவ்வேறு மதிப்புகளை உடையது.



எனவே, நீர்மூலக்கூறில் உள்ள பிணைப்புகளின் பிணைப்பு ஆற்றல்களின் சராசரி மதிப்பு

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

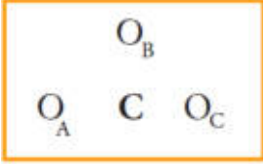
கூட்டவணை 10.4 சில பொதுவான பிணைப்புகளுக்கான பிணைப்பு நீளம் மற்றும் பிணைப்பு ஆற்றல்:

வ. எண்.	பிணைப்பு வகை	பிணைப்பு ஆற்றல் (kJ mol ⁻¹)	பிணைப்பு நீளம் (Å)
1	H-H	432	0.74
2	H-F	565	0.92
3	H-Cl	427	1.27
4	H-Br	363	1.41
5	H-I	295	1.61
6	C-H	413	1.09
7	C-C	347	1.54
8	C-Si	301	1.86
9	C-N	305	1.47
10	C-O	358	1.43
11	C-P	264	1.87
12	C-S	259	1.81
13	C-F	453	1.33
14	C-Cl	339	1.77
15	C-Br	276	1.94
16	C-I	216	2.13

உடனியைவு:

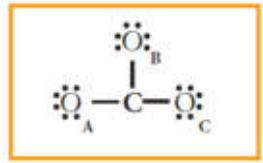
சில நேர்வுகளில், ஒரு மூலக்கூறிற்கு ஒன்றிற்கும் மேற்பட்ட சாத்தியமான லூயிஸ் வடிவமைப்புகளை வரைய இயலும் எடுத்துக்காட்டாக, கார்பனேட் அயனியின் (CO_3^{2-}) லூயிஸ் வடிவமைப்புகளைக் கருதுவோம்.

கார்பனேட் அயனியின் அணுஅமைவு அமைப்பு (ஆக்சிஜன் அணுக்கள் O_A , O_B மற்றும் O_C என குறிப்பிடப்பட்டுள்ளன.)

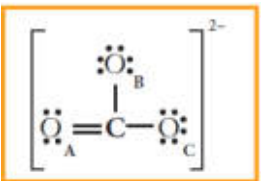


இணைதிற எலக்ட்ரான்களின் மொத்த எண்ணிக்கை = $[1 \times 4 \text{ (கார்பன்)}] + [3 \times 6 \text{ (ஆக்சிஜன்)}] + [2 \text{ (எதிர் மின்சுமை)}] = 24$ எலக்ட்ரான்கள்.

இந்த இணைதிறன் எலக்ட்ரான்களைப் பங்கீடு செய்வதால் பின்வரும் அமைப்பு கிடைக்கப் பெறுகிறது.



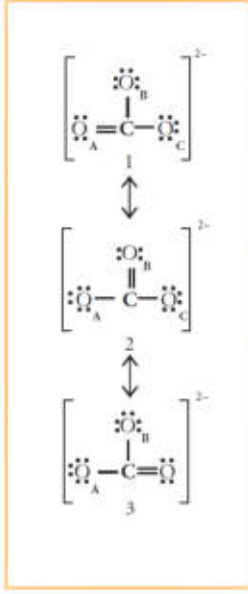
கார்பன் எட்டு எலக்ட்ரான்களைப் பெறும் வகையில் ஒரு ஆக்சிஜன் அணுவிலிருந்து (O_A) ஒரு தனித்த எலக்ட்ரான் இரட்டையினை இடம் பெயரச் செய்து அவற்றிற்கிடையே கூடுதல் பிணைப்பை உருவாக்குக. படத்தில் காட்டியுள்ளவாறு வலது மேல்புறத்தில் மின்சுமை (2-)ஐ குறித்துக்காட்டுக.



(அ) CO_3^{2-} அயனியின் லூயிஸ் வடிவ அமைப்பு

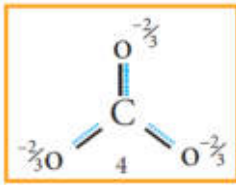
இந்நேர்வில் O_A விற்கு பதிலாக மற்ற இரு ஆக்சிஜனில் (O_B மற்றும் O_C) உள்ள தனித்த இரட்டை எலக்ட்ரான்களை இடம் பெயரச் செய்வதன் மூலமாகவும், மேலும் இரு லூயிஸ் வடிவங்களை நாம் வரைய இயலும்.

எனவே, நாம் (CO_3^{2-}) அயனிக்கு கீழ்க்கண்டவாறு மூன்று ஒத்த லூயிஸ் வடிவமைப்புகளை வரைய இயலும். இவ்வடிவமைப்புகளில் அணுக்களின் ஒப்பீட்டு இட அமைவு மாறுவதில்லை. ஆனால் பிணைப்பின் இட அமைவு மற்றும் தனித்த இரட்டை எலக்ட்ரான்களின் இட அமைவு ஆகியன மட்டுமே மாறுபடுகின்றன. இத்தகைய வடிவமைப்புகள் உடனிசைவு அமைப்புகள் என அழைக்கப்படுகின்றன. மேலும் இந்நிகழ்வு உடனிசைவு எனப்படுகிறது.



படம் 10.14 (b) CO_3^{2-} அயனியின் உடனிசைவு அமைப்புகள்

கார்பனேட் அயனியில் உள்ள அனைத்து கார்பன் - ஆக்சிஜன் பிணைப்புகளும் சமமாக உள்ளன என சோதனை முடிவுகளின் அடிப்படையில் அறிய முடிகிறது. எனவே கார்பனேட் அயனியின் உண்மையான அமைப்பு என்பது. மேற்கண்டுள்ள மூன்று உடனிசைவு ஆகும். இந்நேர்வில், கார்பனேட் அயனியானது ஒரு வடிவமைப்பிலிருந்து மற்றொரு வடிவமைப்பிற்கு மாறுவதாக கருதக்கூடாது. கார்பனேட் அயனியை ஒரே ஒரு லூயிஸ் வடிவமைப்பினைக் கொண்டு குறிப்பிட்டுக் காட்ட இயலாது, எனினும் பின்வரும் அமைப்பானது அதன் சரியான வடிவமைப்பு பற்றிய ஒரு கருத்தினைத் தருகிறது.



படம் 10.14 (இ) CO_3^{2-} அயனியின் இனக்கலப்பு உடனிசைவு அமைப்பு

இனக்கலப்பு உடனிசைவு அமைப்பின் (வடிவம் 4) ஆற்றலானது மற்ற அனைத்து உடனிசைவு அமைப்புகளின் (வடிவம் 1, 2 மற்றும் 3) ஆற்றலைக் காட்டிலும் குறைவானது. அதிக நிலைப்புத் தன்மையுடைய உடனிசைவு அமைப்பின் (வடிவம் 1(அ)2(அ)3) ஆற்றலுக்கும் இனக்கலப்பு உடனிசைவு அமைப்பின் ஆற்றலுக்கும் (வடிவம் 4) இடையேயான ஆற்றல் வேறுபாடு உடனிசைவு ஆற்றல் என்றழைக்கப்படுகின்றது.

பிணைப்புகளின் முனைவுத் தன்மை

சகப்பிணைப்பின் பகுதி அயனித் தன்மை:

இரு ஒத்த அணுக்களுக்கிடையே (போன்றவற்றில் உள்ளவாறு) சகப்பிணைப்பு உருவாகும் போது இணைந்துள்ள இரண்டு அணுக்களும் பிணைப்பு எலக்ட்ரான் இரட்டையை தங்களை நோக்கி சம அளவில் ஈர்க்கின்றன. எனவே பங்கிடப்பட்ட பிணைப்பு எலக்ட்ரான் மிகச்சரியாக பிணைக்கப்பட்டுள்ள இரு அணுக்களுக்கு மையத்தில் அமையும். எனினும், மாறுபட்ட எலக்ட்ரான் கவர்தன்மை மதிப்புகளைக் கொண்டுள்ள அணுக்களுக்கு இடையே சகப்பிணைப்பு உருவாகும் நேர்வுகளில், பிணைக்கப்பட்டுள்ள அணுக்களில் அதிக எலக்ட்ரான் அணுவைக்காட்டிலும் சகப்பிணைப்பு எலக்ட்ரான்களை தனக்கு அருகில் ஈர்க்கும் தன்மையினை அதிகமாகப் பெற்றுள்ளது. இதன் விளைவாக பங்கிடப்பட்ட எலக்ட்ரான் இரட்டையின் திரள் முகில் (Cloud of Shared electron pair) உருக்குலைகிறது.

ஹைட்ரஜன் புளூரைடில் உள்ள ஹைட்ரஜனுக்கும் புளூரினுக்கும் இடையேயான சகப்பிணைப்பைக் கருதுக. பாலிங் அளவீட்டு முறையில் ஹைட்ரஜன் மற்றும் புளூரினின் எலக்ட்ரான் கவர் தன்மை மதிப்புகள் முறையே 2.1 மற்றும் 4. இதிலிருந்து புளூரினானது, ஹைட்ரஜனைக் காட்டிலும் ஏறத்தாழ இரு மடங்கு கவர்ச்சி விசையுடன் சகப்பிணைப்பு எலக்ட்ரான்களை தன்மை நோக்கி கவரும் தன்மையினைப் பெற்றுள்ளது என அறிய முடிகிறது. இதன் விளைவாக HFல் உள்ள புளூரின் ஆனது பகுதி எதிர்மின் சமையையும், ஹைட்ரஜன் ஆனது பகுதி நேர்மின் சமையையும் பெறுகின்றன. எனவே பிணைப்பானது முனைவுற்ற சகப்பிணைப்பு என அழைக்கப்படுகிறது. இங்கு, மிகச் சிறிய சமமான எதிர் மின்சமையுடைய மின்சமைகள் மிகச்சிற தொலைவில் (91 pm) பிரித்து வைக்கப்பட்டுள்ளன. இத்தகைய அமைப்பு இருமுனை (dipole) என அழைக்கப்படுகிறது.

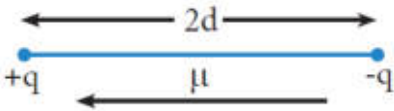
இருமுனை திருப்புத் திறன்:

ஒரு சகப்பிணைப்பின் முனைவுத் தன்மையை இருமுனை திருப்புத் திறனின் அடிப்படையில் அளவிட இயலும். இது,

$$\mu = q \times 2d$$

என்று வரையறுக்கப்படுகிறது.

இங்கு μ என்பது இருமுனை திருப்புத் திறனையும், q என்பது மின்சமை மற்றும் $2d$ என்பது இரு மின்சமைகளுக்கு இடையேயானத் தொலைவினையும் குறிப்பிடுகின்றன. இருமுனை திருப்புத் திறனானது ஒரு வெக்டர் அளவீடாகும். இவ்வெக்டரின் திசையானது எதிர்மின் சமையிலிருந்து நேர்மின்சமையினை நோக்கி அமையும்.



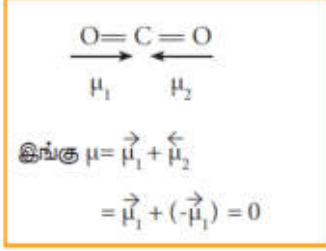
படம் 10.15 இருமுனையினை குறித்துக்காட்டுதல்

இருமுனை திருப்புத் திறனின் அலகு கூலாம் மீட்டர் (Cm), இது பொதுவாக டிபை அலகில் (D) குறிப்பிடப்படுகிறது. 1 டிபை = 3.336×10^{-30} Cm என்ற சமன்பாட்டினைப் பயன்படுத்தி டிபை அலகினை கூலாம்-மீட்டர் அலகிற்கு மாற்றலாம்.

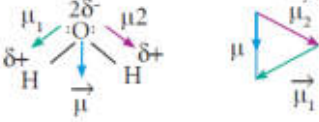
H₂, O₂, F₂ போன்ற ஈரணு மூலக்கூறுகள் பூஜ்ய இருமுனைதிருப்புத் திறனைப் பெற்றுள்ளன. மேலும் இவைகள் முனைவுற்ற மூலக்கூறுகள் (non polar molecules) எனப்படுகின்றன. HF, HCl, CO, NO போன்ற மூலக்கூறுகள் பூஜ்யமற்ற இருமுனை திருப்புத்திறன் மதிப்புகளைப் பெற்றுள்ளன. இத்தகைய மூலக்கூறுகள் முனைவுற்ற மூலக்கூறுகள் (Polar Molecules) என அழைக்கப்படுகின்றன.

முனைவுற்ற பிணைப்புகளைப் பெற்றுள்ள மூலக்கூறுகள் அனைத்தும் இருமுனை திருப்புத் திறன்களைப் பெற்றிருப்பதற்கான அவசியமில்லை எடுத்துக்காட்டாக நேர்கோட்டு வடிவமைப்பைப் பெற்றுள்ள கார்பன்-டை-ஆக்சைடானது இரண்டு முனைவுற்ற ($C^{\delta+} - C^{\delta-}$) பிணைப்புகளைப் பெற்றிருந்த போதிலும், அதன் இருமுனை திருப்புத் திறன் பூஜ்ஜியமாகும். நேர்கோட்டு CO_2 ல் இரு முனைவுற்ற (CO) பிணைப்பு, சம மதிப்புத் திறன்களைப் பெற்றுள்ளன. எனவே, CO_2 ன் இருமுனை திரப்புத் திறனின் நிகர மதிப்பு பூஜ்ஜியமாகும்.

$$\mu = \mu_1 + \mu_2 = \mu_1 + (-\mu_1) = 0$$



நீர் மூலக்கூறை பொறுத்த வரையில், நிகர இருமுனை திருப்புத்திறன் என்பது μ_1 , μ_2 ஆகியவற்றின் வெக்டர் கூடுதலாகும். இவை கீழே காட்டப்பட்டுள்ளது.



படம் 10.16 நீரின் இருமுனை திருப்புத் திறன்

நீரின் இருமுனை திருப்புத் திறனின் மதிப்பு 1.85D

அட்டவணை 10.5 சில மூலக்கூறுகளுக்கான இருமுனை திருப்புத் திறனின் மதிப்பு

வ. எண்.	மூலக்கூறு	இருமுனை திருப்புத் திறன் (D யில்)
1	HF	1.91
2	HCl	1.03
3	H ₂ O	1.85
4	NH ₃	1.47
5	CHCl ₃	1.04

ஒரு சகப்பிணைப்பில் எந்த அளவிற்கு அயனித்தன்மை காணப்படுகிறது. என்பதனை இணைக்கப்பட்டுள்ள இரு அணுக்களுக்கிடையேயான எலக்ட்ரான் கவர் தன்மை வேறுபாடோடு தொடர்புபடுத்த இயலும்

$A^{\delta-} - B^{\delta+}$ என்ற முனைவுற்ற மூலக்கூறினைக் கருதுவோம். இம்மூலக்கூறிலுள்ள அணுக்களின் எலக்ட்ரான் கவர் தன்மை வேறுபாடு ($X_A - X_B$) ஆனது,

- i. 1.7க்குச் சமம் எனில் பிணைப்பு A-B யானது 50% அயனித் தன்மையைப் பெற்றுள்ளது.
- ii. 1.7ஐ விட அதிகமாக இருந்தால், பிணைப்பு A-B யானது 50% க்கும் அதிகமான அயனித் தன்மையைப் பெற்றிருக்கும்.
- iii. 1.7ஐ விடக் குறைவு எனில், பிணைப்பு A-B யானது 50%க்கும் குறைவாக அயனித் தன்மையைப் பெற்றிருக்கும்.

அயனிப் பிணைப்பில் பகுதி சகப்பிணைப்புத் தன்மை:

சகப்பிணைப்பு சேர்மங்களில் பகுதி அயனித் தன்மை காணப்படுவது போன்று, அயனிச் சேர்மங்களும் பகுதி சகப்பிணைப்புத் தன்மையினைப் பெற்றுள்ளன. எடுத்துக்காட்டாக அயனிச் சேர்மமாக லித்தியம் குளோரைடானது சகப்பிணைப்புத் தன்மையினை பெற்றிருப்பதால் எத்தனால் போன்ற கரிமக் கரைப்பான்களில் கரைகிறது.

அயனிச் சேர்மங்களில் காணப்படும் பகுதி சகப்பிணைப்புத் தன்மையினை முனைவுறுதல் (polarisation) என்ற நிகழ்வின் மூலம் விளக்கலாம். அயனிச் சேர்மங்களில் நேர் அயனிக்கும், எதிர் அயனிக்கும் இடையில் நிலை மின்னியியல் கவர்ச்சி விசை காணப்படுகிறது என்பதை நாம் அறிவோம். நேர் மின்சுமை உடைய நேர் அயனியானது எதிர் அயனியின் இணைதிறன் எலக்ட்ரான்களைக் கவருகிறது. அதே நேரத்தில் அதன் அணுக்கருவினை விலக்குகிறது. இதன் விளைவாக எதிர் அயனியின் எலக்ட்ரான் திரற் முகில் உருக்குலைவுறுகிறது. மேலும், எலக்ட்ரான் அடர்த்தியானது நேர்மின் அயனியை நோக்கி நகர்கிறது. இதன் விளைவாக இவ்விரு அயனிகளுக்கிடையே இணைதிற எலக்ட்ரான்களின் பங்கீடு சிறிதளவு ஏற்படுகிறது. எனவே அவைகளுக்கிடையே பகுதி சகப்பிணைப்புத் தன்மை ஏற்படுகிறது. இந்நிகழ்வு முனைவுறுதல் எனப்படும்.

ஒரு எதிர் அயனியை முனைவுறச் செய்யும் ஒரு நேர் அயனியின் திறன் அதன் முனைவுறுத்தும் திறன் (polarising ability) எனப்படும். மேலும் எதிர் அயனியின் முனைவுறும் தன்மை அதன் முனைவுறும் திறன் (Polarisibility) எனப்படும்.

ஒரு அயனிச் சேர்மத்தில் எந்த அளவிற்கு முனைவுறுதல் நிகழ்கிறது என்பதனை பெஜான்ஸ் விதி மூலம் அறியலாம்

பெஜான்ஸ் விதிகள்

அதிக சகப்பிணைப்புத் தன்மையினை பெற்றிருக்க வேண்டுமெனில் நேர்அயனி மற்றும் எதிர் அயனி ஆகிய இரண்டின் மின்சுமைகளும் அதிகமாக இருக்க வேண்டும். நேர் அயனியின் மீதுள்ள மின்சுமை அதிகமாக இருப்பின், எதிர் அயனியின் எலக்ட்ரான் திரள்முகிலின் மீது செலுத்தும் கவர்ச்சி விசையும் அதிகமாக இருக்கும். இதைப் போலவே எதிர் அயனியின் மீதுள்ள எதிர் மின்சுமையின் எண்மதிப்பு அதிகம் எனில் அதன் முனைவுறும் திறன் அதிகம். எனவே, நேர் அயனி அல்லது எதிர் அயனியின் மின்சுமை அதிகமாக இருப்பின் சகப்பிணைப்புத் தன்மை அதிகரிக்கும்.

அலுமினியம் குளோரைடு, மெக்னீசியம் குளோரைடு மற்றும் சோடியம் குளோரைடு ஆகிய மூன்று வகை அயனிச் சேர்மங்களை நாம் மூன்று வகை அயனிச் சேர்மங்களை நாம் கருதுவோம். நேர் அயனிகள் மீதுள்ள மின்சுமை $Na^+ < Mg^{2+} < Al^{3+}$ என்ற வரிசையில் அதிகரிப்பதால் சகப்பிணைப்புத் தன்மையும் $NaCl < MgCl_2 < AlCl_3$ என்ற அதே வரிசையில் அதிகரிக்கின்றது.

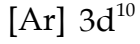
நேர் அயனியின் உருவளவு சிறியதாகவும், எதிரயனியின் உருவளவு பெரியதாகவும் இருப்பின் முனைவுறுத்தும் திறன் அதிகமாக இருக்கும். மேலும் சகப்பிணைப்புத் தன்மை அதிகமாக அமையும்.

சோடியம் குளோரைடைக் காட்டிலும் லித்தியம் குளோரைடு அதிக சகப்பிணைப்புத் தன்மை உடையது. Na^+ அயனியைக் காட்டிலும் Li^+ ன் உருவளவு சிறியது. எனவே Li^+ ன் முனைவுறுத்தும் திறன் அதிகம். லித்தியம் குளோரைடைக் காட்டிலும் லித்தியம் அயோரைடு அதிக சகப்பிணைப்புத் தன்மை உடையது. ஏனெனில் Cl^- ஐக் காட்டிலும் I^- -ன் உருவளவு பெரியது. எனவே Li^+ நேர் அயனியால், Cl^- ஐக் காட்டிலும் I^- அயனியானது அதிகமாக முனைவுறுகின்றது.

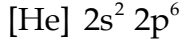
$ns^2 np^6 nd^{10}$ எலக்ட்ரான் அமைப்பினைப் பெற்றுள்ள நேர் அயனிகள் $ns^2 np^6$ எலக்ட்ரான் அமைப்பினைப் பெற்றுள்ள நேர்அயனிகளைக் காட்டிலும் அதிக முனைவுறுத்தும் திறனைப் பெற்றுள்ளன, எனவே அதிக சகப்பிணைப்புத் தன்மையினைப் பெற்றுள்ளன.

$CuCl$ ஆனது $NaCl$ ஐக் காட்டிலும் அதிக சகப்பிணைப்புத் தன்மையினைப் பெற்றுள்ளது. Na^+ அயனியோடு ஒப்பிடும்போது (1.13\AA), Cu^+ (0.6\AA) அயனியானது உருவளவில் சிறியது. மேலும் $3s^2 3p^6 3d^{10}$ எலக்ட்ரான் அமைப்பினைப் பெற்றுள்ளது.

Cu^+ ன் எலக்ட்ரான் அமைப்பு



Na^+ ன் எலக்ட்ரான் அமைப்பு



VSEPR கொள்கை (இணைதிறன் எலக்ட்ரான் இரட்டை விலக்கல் கொள்கை)

மூலக்கூறுகளின் வடிவமைப்பு பற்றிய லூயிஸின் கொள்கையானது மூலக்கூறுகளில் அணுக்களின் இடம், மற்றும் அவைகளுக்கிடையே பங்கிடப்பட்ட எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை ஆகியனவற்றைப் பற்றி விளக்குகிறது. எனினும் லூயிஸின் கொள்கையினைப் பயன்படுத்தி நம்மால் மூலக்கூறுகளின் வடிவமைப்பினை கணிக்க இயலாது. லூயிஸ் கொள்கையை VSEPR கொள்கையுடன் இணைத்துப் பயன்படுத்துவதன் மூலம் மூலக்கூறுகளின் வடிவத்தினை தீர்மானிக்க இயலும்.

VSEPR கொள்கையின் முக்கிய கோட்பாடுகள் பின்வருமாறு:

1. ஒரு மூலக்கூறின் வடிவமானது அதிலுள்ள மைய அணுவைச் சுற்றி காணப்படும் இணைதிற கூடு எலக்ட்ரான் இரட்டைகளின் எண்ணிக்கையினைப் பொருத்து அமைகிறது.
2. எலக்ட்ரான் இரட்டைகள் இருவகைப்படும். அவையாவன (i) பிணைப்பு எலக்ட்ரான் இரட்டைகள் (ii) தனித்த எலக்ட்ரான் இரட்டைகள். இரு அணுக்களுக்கிடையே பகிர்ந்து கொள்ளப்படும் எலக்ட்ரான் இரட்டைகள் ஆனவை பிணைப்பு எலக்ட்ரான் இரட்டைகள் எனப்படுகின்றன. அதே நேரத்தில் பிணைப்பில் ஈடுபடாத, இணைதிற எலக்ட்ரான் இரட்டைகள் ஆனவை தனித்த இரட்டைகள் எனப்படுகின்றன.
3. மைய அணுவினை சூழ்ந்துள்ள எலக்ட்ரான் இரட்டைகள் ஒவ்வொன்றும் தங்களுக்குள் ஒன்றையொன்று விலக்குகின்றன. எனவே, இந்த விலக்குவிசையினை எந்த அளவிற்கு சிறுமமாக்க இயலுமோ, அதற்கேற்றவாறு முப்பரிமாண வெளியில் அவைகள் விலகி அமைகின்றன.
4. வெவ்வேறு வகை எலக்ட்ரான் இரட்டைகளுக்கு இடையேயான விலக்குவிசை பின்வரும் வரிசையில் அமைகிறது.



lp- தனித்த இரட்டை (lone pair) ; bp பிணைப்பு இரட்டை (bond pair)

தனித்த இரட்டை எலக்ட்ரான்கள் என்பன மைய அணுவினை மட்டுமே சார்ந்து அமைந்திருக்கும், மேலும் அவைகள் ஒரே ஒரு அணுக்கருவோடு மட்டுமே இடையீடு செய்கின்றன. ஆனால் பிணைப்பு இரட்டை எலக்ட்ரான்கள் இரு அணுக்களுக்கு இடையே பங்கிடப்படுதலால் அவைகள் இரு அணுக்கருக்களோடும் இடையீடு புரிகின்றன. இதன் விளைவாக மூலக்கூறுகளில் உள்ள தனித்த இரட்டையானது பிணைப்பு இரட்டையைவிட அதிக இடத்தை ஆக்கிரமிக்கிறது. மேலும், அதிக விலக்கும் திறனையும் பெற்றுள்ளது.

VSEPR கொள்கையின்படி மூலக்கூறுகளின் வடிவங்கள் தீர்மானிக்கப்படுதலைக் கீழ்க்கண்டுகள் அட்டவணை விளக்குகிறது. AB_xL என்ற மூலக்கூறினைக் கருதுவோம். இதில் A என்ப துமைய அணுவையும், X என்பது A உடன் சகப்பிணைப்பால் பிணைக்கப்பட்டுள்ள B அணுக்களின் எண்ணிக்கையையும் L என்பது தனித்த எலக்ட்ரான் இரட்டையையும் குறிப்பிடுகின்றது.

இணைதிற பிணைப்புக் கொள்கை (Valence bond theory)

ஹைட்ரஜன் மற்றும் லண்டன் ஆகிய அறிவியல் அறிஞர்கள் ஹைட்ரஜன் மூலக்கூறில் சகப்பிணைப்பு உருவாதலை, எலக்ட்ரானின் அலை இயக்கவியலை அடிப்படையாகக் கொண்டு கருத்தியலாக விளக்கினார்கள். இக்கருத்துக்கள் பாலிங் மற்றும் ஸ்லேட்டர் ஆகியோர்களால் மேலும் மேம்படுத்தப்பட்டது. இணைதிறன் பிணைப்புக் கொள்கையினை (VB கொள்கை) அலை இயக்கவியல் கோட்பாடுகளின் அடிப்படையில் விளக்கவது இப்பாடப்பகுதியின் நோக்கத்திற்கு அப்பாற்பட்டது. ஹைட்ரஜன் மூலக்கூறு உருவாதலுக்கு, VB கொள்கையின் அடிப்படையில் அமைப்பு ஒரு எளிய, பண்புகள் அடிப்படையிலான விளக்கம் பின்வருமாறு.

இரு ஹைட்ரஜன் அணுக்கள் (H_a மற்றும் H_b ஆகியன) முடிவில்லாத தொலைவில் பிரித்து வைக்கப்பட்டிருக்கும் ஒரு நிலையினைக் கருத்திற்கொள்க. இந்நிலையில் அவ்விரு ஹைட்ரஜன் அணுக்களுக்கிடையே எவ்வித இடையீடுகளும் இல்லை. மேலும் இந்த அமைப்பின் நிலை ஆற்றல் பூஜ்யம் என தன்னிச்சையாக எடுத்துக்கொள்ளப்படுகிறது. இவ்விரு ஹைட்ரஜன் அணுக்களும் ஒன்றை ஒன்று நெருங்கும் பொழுது, ஒவ்வொரு அணுவின் அணுக்கருக்களுக்கும், அவற்றினுடைய எலக்ட்ரான்களுக்கும் இடையேயான கவர்ச்சி விசை (ஊதா நிற அம்புக் குறியால் காட்டப்பட்டுள்ளது) யுடன் பின்வரும் புதிய விசைகளும் செயல்பட துவங்குகின்றன.

புதிய கவர்ச்சி விசைகள் (பச்சை நிற அம்புக்குறி)

1. H_a ன் அணுக்கருவிற்கும், H_b ன் இணைதிற எலக்ட்ரானுக்கும் இடையே உருவாகிறது.
2. H_b ன் அணுக்கருவிற்கும், H_a ன் இணைதிற எலக்ட்ரானுக்கும் இடையே உருவாகிறது.

புதிய விலக்கு விசைகள் (சிவப்பு நிற அம்புக்குறி)

- i. H_a மற்றும் H_b ஆகியவற்றின் அணுக்கருக்களுக்கிடையே உருவாகிறது.
- ii. H_a மற்றும் H_b ஆகிய இணைதிறன் எலக்ட்ரான்களுக்கு இடையே உருவாகிறது.

கவர்ச்சி விசையின் காரணமாக ஆகியன ஒன்றோடொன்று நெருங்குகின்றன. ஆனால் நேரத்தில் விலக்குவிசைகள் அவைகளை விலகலடையுமாறுச் செய்கின்றன. ஆரம்ப நிலையில், இரு ஹைட்ரஜன் அணுக்களும் ஒன்றோடொன்று நெருங்கும்போது, விலக்குவிசையினைக் காட்டிலும், கவர்ச்சி விசைகள் அதிக வலிமையுடையதாக உள்ளன. மேலும் நிலை ஆற்றல் குறைந்துக் கொண்டே வருகின்றது. ஒரு குறிப்பிட்ட நிலையை அடைந்ததும் நிகர கவர்ச்சி விசையானது விலக்கு விசைகளுக்குச் சரி சமமாகிறது. இந்நிலையில் அமைப்பானது, மிகக் குறைந்த நிலை ஆற்றலைப் பெற்றிருக்கும்.

இந்நிலையில் ஹைட்ரஜன் அணுக்களின் (H_a மற்றும் H_b) அணு ஆர்பிட்டால்களுக்கிடையே அதிகபட்ச மேற்பொருந்துதல் நிகழ்கிறது. மேலும் அவைகள் ஒன்றோடொன்று சகப்பிணைப்பால் பிணைக்கப்பட்டுள்ளன. எனப்படுகின்றது. இந்நிலையில் அவ்விரு ஹைட்ரஜன் அணுக்கருக்களுக்கிடையேயானத் தொலைவு பிணைப்பு நீளத்தைத் தருகிறது. இதன் மதிப்பு இந்நிலையில் வெளியிடப்படும் ஆற்றல் ஆகும். மேலும், இவ்வாற்றல் பிணைப்பாற்றல் (bond energy) எனப்படுகிறது.

இந்தபிணைப்பு உருவாதலின்போது, ஆற்றல்வெளியிடப்படுகிறது. எனவே உருவான மூலக்கூற்றுணாது அதிக நிலைப்புத்தன்மை உடையது. இவ்விரு அணுக்களுக்கு இடையேயான தொலைவினை மேலும் குறைக்கும் பொழுது கவர்ச்சி விசையினைக் காட்டிலும் விலக்கு விசையானது அதிகரிப்பதால் அமைப்பின் நிலையாற்றல் அதிகரிப்பதால் அமைப்பின் நிலையாற்றல் அதிகரிக்கிறது.

VB கொள்கையின் முக்கிய அம்சங்கள்:

- i. இரு அணுக்களின் சரிபாதி அளவு நிரப்பப்பட்ட ஆர்பிட்டால்கள் ஒன்றோடொன்று மேற்பொருந்தும் பொழுது அவைகளுக்கிடையே சகப்பிணைப்பு உருவாகின்றது.

ii. உருவான மேற்பொருந்திய ஆர்பிட்டாலில் எதிரெதிர் சுழற்ச்சியினைப் பெற்றுள்ள இரு எலக்ட்ரான்கள் இடம்பெறுகின்றன. எடுத்துக்காட்டாக, H_2 மூலக்கூறு உருவாகும்போது இரு ஹைட்ரஜன் அணுக்களின் $1s$ எலக்ட்ரான்களும் எதிர்சுழற்சியுடன் இரட்டை ஆகின்றன. மேலும் அவைகள் மேற்பொருந்திய ஆர்பிட்டாலில் இடம்பெறுகின்றன.

iii. அணு ஆர்பிட்டால்கள் எந்த அளவிற்கு மேற்பொருந்துகின்றனவோ, அதைப் பொருத்து சகப் பிணைப்பின் வலிமை அமைகிறது. மேற்பொருந்துதல் அதிகமாக இருக்கும் போது, வெளியிடப்படும் ஆற்றல் அதிகமாகும், மேலும் உருவாகும் பிணைப்பும் வலிமையுடையதாக இருக்கும்.

iv. ஒவ்வொரு அணு ஆர்பிட்டாலும் குறிப்பிட்ட திசையில் அமைந்துள்ளது (ஆர்பிட்டால் மட்டும் சீர்மைக்கோள வடிவம் பெற்றுள்ளது) எனவே, அறு ஆர்பிட்டால்கள் மேற்பொருந்துதலானது, அதிகபட்சமாக மேற்பொருந்துதல் நிகழும் திசையில் நடைபெறுகிறது.

ஹைட்ரஜன், புளூரின் மற்றும் ஹைட்ரஜன் புளுரைடில் சகப்பிணைப்பு உருவாதலை VB கொள்கையினைப் பயன்படுத்தி விளக்கிடுவோம்.

ஆர்பிட்டால் இனக்கலப்பு

அணுக்கள் இணைந்து சகப்பிணைப்பு மூலக்கூறினை உருவாக்கும் போது, இணையும் அணுக்களின், அணு ஆர்பிட்டால்கள் ஒன்றோடொன்று மேற்பொருந்தி சகப்பிணைப்பினை உருவாக்குகின்றது. ஆர்பிட்டால்கள் மேற்பொருந்தியுள்ள பகுதியில் பிணைப்பு இரட்டை எலக்ட்ரான்கள் இடம்பெறும். மேற்பொருந்துதலின் தன்மையினைப் பொறுத்து, இரு அணுக்களுக்கு இடையேயான சகப்பிணைப்பினை சிக்மா (σ) மற்றும் பை (π) பிணைப்புகள் என வகைப்படுத்தலாம்.

சிக்மா மற்றும் பை பிணைப்புகள்

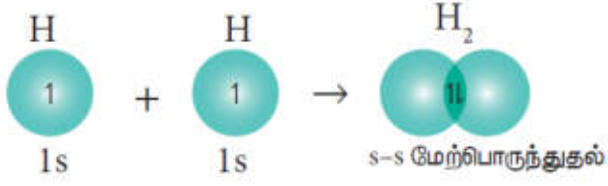
இரண்டு அணு ஆர்பிட்டால் அச்சுகளின் வழியே நேர்க்கோட்டில் மேற்பொருந்தும் போது உருவாகும் பிணைப்பு σ சகப்பிணைப்பு எனப்படுகிறது. இந்த மேற்பொருந்துதல் நேர் கோட்டு மேற்பொருந்துதல் (head on overlapping) அல்லது அச்சவழி மேற்பொருந்துதல் (axial overlapping) எனவும் அழைக்கப்படுகிறது. s ஆர்பிட்டால் இடம்பெறும் மேற்பொருந்துதல் நிகழ்வில் ($s-s$ மற்றும் $s-p$ மேற்பொருந்துதல்) எப்போதும் σ பிணைப்பே உருவாகும். ஏனெனில் s ஆர்பிட்டால் சீர்மைக்கோள வடிவத்தினைக் கொண்டது. எனவே, அதனுடன் நிகழும் மேற்பொருந்துதல் எப்பொழுதும் நேர் கோட்டு மேற்பொருந்துதலாகவே அமையும், இரு p ஆர்பிட்டால்கள் மூலக்கூறு அச்சின் வழியே மேற்பொருந்தும் σ நிகழ்விலும் பிணைப்பே உருவாகிறது. X அச்சினை மூலக்கூறு அச்சாக கருதும் நேர்வில் P_x-P_x ஆர்பிட்டால் மேற்பொருந்துதல் ஆனது σ -பிணைப்பினைத் தரும்.

இரு அணு ஆர்பிட்டால்கள் பக்கவாட்டில் மேற்பொருந்தும்போது உருவாகும் சகப்பிணைப்பு பை பிணைப்பு (π) எனப்படும். X -அச்சினை மூலக்கூறு அச்சாக கருதும் நேர்வில் P_y-P_y மற்றும் P_z-P_z ஆகிய ஆர்பிட்டால்கள் மேற்பொருந்துதலால் π பிணைப்பு உருவாகிறது. பின் வரும் எடுத்துக்காட்டுகள் மூலம் ஆர்பிட்டால்கள் மேற்பொருந்துதலைப் புரிந்து கொள்ளலாம்.

H_2 மூலக்கூறு உருவாதல்

ஹைட்ரஜன் அணுவின் எலக்ட்ரான் அமைப்பு $1s^1$

ஹைட்ரஜன் மூலக்கூறு உருவாகும் போது, ஒற்றை எலக்ட்ரானைக் கொண்டுள்ள இரு ஹைட்ரஜன் அணுக்களின், 1 ஆர்பிட்டால்களும் அவ்விரு அணுக்களுக்கிடையேயான அச்சின் வழியே மேற்பொருந்துகின்றன. இந்த மேற்பொருந்துதல் $s-s$ மேற்பொருந்துதல் எனப்படும். இத்தகைய அச்சவழி ஆர்பிட்டால் மேற்பொருந்துதல் காரணமாக சிக்மா (σ) பிணைப்பு உருவாகிறது.

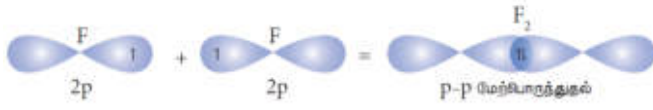


படம் 10.18 ஹைட்ரஜன் மூலக்கூறு உருவாதல்

F₂ மூலக்கூறு உருவாதல்:

புளரின் அணுவின் இணைதிற கூட்டின் எலக்ட்ரான் அமைப்பு: $2s^2 2p_x^2, 2p_y^2, 2p_z^1$

இரு புளரின் அணுக்களின், சரிபாதி நிரப்பப்பட்ட P_z ஆர்பிட்டால்கள் x -அச்சின் வழியே ஒன்றோடொன்று மேற்பொருத்தும் போது, அவைகளுக்கிடையே 'σ' சகப்பிணைப்பு உருவாகிறது.



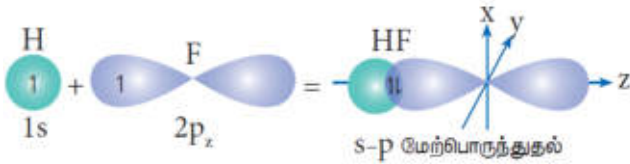
படம் 10.19 F₂ மூலக்கூறு உருவாதல்

HF மூலக்கூறு உருவாதல்:

ஹைட்ரஜன் அணுவின் எலக்ட்ரான் அமைப்பு $1s^1$

புளரின் அணுவின் இணைதிற கூட்டின் எலக்ட்ரான் அமைப்பு: $2s^2 2p_x^2, 2p_y^2, 2p_z^1$

ஹைட்ரஜனின் சரிபாதி நிரப்பப்பட்ட 1s ஆர்பிட்டாலானது, புளரின் பாத நிரப்பப்பட்ட 2P_z ஆர்பிட்டாலுடன் நேர்கோட்டில் மேற்பொருத்தும் போது ஹைட்ரஜனுக்கும் புளரினுக்கும் இடையே ஒரு σ-சகப்பிணைப்பு உருவாகிறது.



படம் 10.20 HF மூலக்கூறு உருவாதல்

O₂ மூலக்கூறு உருவாதல் (O₂)

ஆக்சிஜன் அணுவின் இணைதிற கூட்டின் எலக்ட்ரான் அமைப்பு: $2s^2 2p_x^2, 2p_y^2, 2p_z^1$

	1s	2s	2p _x	2p _y	2p _z
ஆக்சிஜன் 1	↑↓	↑↓	↑	↑	↑
ஆக்சிஜன் 2	↑↓	↑↓	↑	↑	↑

இரு ஆக்சிஜன் அணுக்களின் சரிபாதியளவு நிரப்பப்பட்ட P_z ஆர்பிட்டால்களும் Z -அச்சின் வழியாக நேர்கோட்டில் மேற்கோட்டில் மேற்பொருந்தும் போது (இந்நேர்வில் Z -அச்சனை மூலக்கூறு அச்சாகக் கருதுக) அவைகளுக்கிடையே σ -சகப்பிணைப்பு உருவாகிறது. மற்ற இரு ஆக்சிஜன்களின் சரிபாதியளவு நிரப்பப்பட்ட இரண்டு ஆர்பிட்டால்களும் பக்கவாட்டில் மேற்பொருந்துவதால் அவைகளுக்கிடையே π -சகப்பிணைப்பு உருவாகிறது. எனவே, ஆக்சிஜன் மூலக்கூறில், இரு ஆக்சிஜன் அணுக்களும் இரட்டை சகப்பிணைப்பால் பிணைக்கப்பட்டுள்ளன. $2s$ மற்றும் $2p_x$ ஆர்பிட்டால்களில் காணப்படும் மற்ற இரு தனித்த எலக்ட்ரான் தனித்த எலக்ட்ரான் இரட்டைகளாக உள்ளன.

இனக்கலப்பதால்

ஹைட்ரஜன், புளூரின் போன்ற எளிய மூலக்கூறுகளில் காணப்படும் பிணைப்புகளை, தொடர்புடைய பிணைந்துள்ள அணுக்களின் அணு ஆர்பிட்டால்கள் மேற்பொருந்துதல் மூலம் எளிதாக விளக்க இயலும், ஆனால் மீத்தேன், அம்மோனியா, பெரிலியம் குளோரைடு முதலிய பல்லணு மூலக்கூறுகளின் கண்டறியப்பட்ட பண்புகளை, அணு ஆர்பிட்டால்களின் எளிய மேற்பொருந்துதல் மூலம் விளக்க இயலவில்லை. எடுத்துக்காட்டாக, சோதனை முடிவுகளின் அடிப்படையில், மீத்தேன் மூலக்கூறுறானது நான்முகி வடிவத்தினை பெற்றுள்ளது எனவும் அதில் காணப்படும், நான்கு C-H பிணைப்புகளும் சமமானவை எனவும் நிரூபணம் செய்யப்பட்டுள்ளது. இப்பண்புகளை நான்கு ஹைட்ரஜன் அணுக்களின் ($1s$) ஆர்பிட்டால்கள், கார்பனின் வெவ்வேறு ஆற்றலுடைய ($2s^2 2p_x^2, 2p_y, 2p_z$) அணு ஆர்பிட்டால்களுடன் மேற்பொருந்துதல் மூலம் விளக்க இயலாது.

சோதனை முடிவுகளின் அடிப்படையில் கண்டறியப்பட்ட இத்தகைய பண்புகளை விளக்கும் பொருட்டு லினஸ் பாலிங் என்பவர் மூலக்கூறுகளில் காணப்படும் இணைதிற அணு ஆர்பிட்டால்கள் என்பன தனித்த அணுவின் ஆர்பிட்டாலிலிருந்து மாறுபட்டிருக்கின்றன என்ற கருத்தினை முன்மொழிந்தார். மேலும் அவர் இனக்கலப்பாதல் என்ற கோட்பாட்டினை அறிமுகப்படுத்தினார்.

ஒரே அணுவின், ஒப்பிடத்தக்க அளவு ஆற்றலுடைய அணு ஆர்பிட்டால்கள் ஒன்றோடொன்று கலந்து, சம எண்ணிக்கையில் சம ஆற்றலை பெற்றுள்ள புதிய சமமான ஆர்பிட்டால்களை தரும் செயல்முறை இனக்கலப்பாதல் என வரையறுக்கப்படுகிறது. இச்செயல்முறையில் உருவான புதிய ஆர்பிட்டால்கள் இனக்கலப்படைந்த ஆர்பிட்டால்கள் என அழைக்கப்படுகின்றன.

இனக்கலப்பு ஆர்பிட்டால்கள் அதிகபட்ச சமச்சீர் தன்மையை பெற்றிருப்பதுடன், அவைகளில் காணப்படும் எலக்ட்ரான்களின் விலக்கு விசையினை சிறுமமாக்கும் வகையில் புறவெளியில் குறித்த திசையினை நோக்கியும் அமைகின்றன.

இனக்கலப்பாதலின் வகைகள் மற்றும் மூலக்கூறுகளின் வடிவங்கள்

sp இனக்கலப்பாதல்:

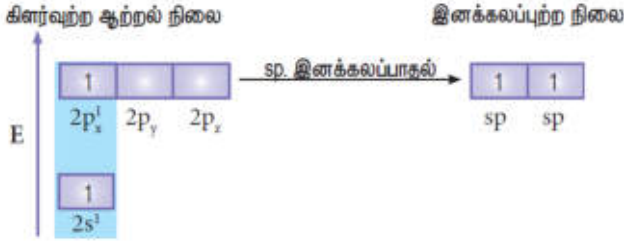
பெரிலியம் குளோரைடில் பிணைப்பு உருவாதலை நாம் கருதுவோம். இயல்பு ஆற்றல் நிலையில் உள்ள பெரிலியம் அணுவின் இணைதிற கூட்டு எலக்ட்ரான் அமைப்பு $[He] 2s^2 2p_x^0 2p_y^0 2p_z^0$



பெரிலியம் குளோரைடில் உள்ள இரு Be-Cl பிணைப்புகளும் சமமானவை. மேலும், அம்மூலக்கூறு நேர்கோட்டு வடிவத்தினைப் பெற்றுள்ளது என கண்டறியப்பட்டுள்ளது. இப்பண்பினை sp இனக்கலப்பாதல் மூலம் VB கொள்கையினைப் பயன்படுத்தி விளக்கலாம்.

பெரிலியத்தின் 2s ஆர்பிட்டாலில் உள்ள இரு எலக்ட்ரான்களில் ஒரு எலக்ட்ரானானது கிளர்வுற்று 2p ஆர்பிட்டாலுக்குச் செல்கிறது. கிளர்வுற்ற நிலையில் எலக்ட்ரான் அமைப்பு $[He]2s^1 2p_x^1 2p_y^0 2p_z^0$

இந்நிலையில் பெரியலித்தின் 2s மற்றும் 2p ஆர்பிட்டால்கள் இனக்கலப்பாதலுக்கு உட்பட்டு, இரு சமமான sp இனக்கலப்படைந்த ஆர்பிட்டால்களைத் தருகின்றன. இந்த புதிய ஆர்பிட்டால்கள் 50% s-பண்பினையும், 50% p-பண்பினையும் பெற்றுள்ளன. sp இனக்கலப்படைந்த ஆர்பிட்டால்கள் படத்தில் (படம் 10.22) காட்டியுள்ளவாறு நேரெதிர் திசைகளில் (180°) அமைகின்றன.



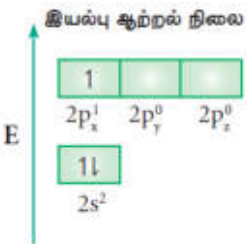
படம் 10.22(அ) $BeCl_2$ உருவாதல்-Be இன் எலக்ட்ரான் அமைப்பு

குளோரினின் ஆர்பிட்டாலுடன் மேற்பொருந்துதல்

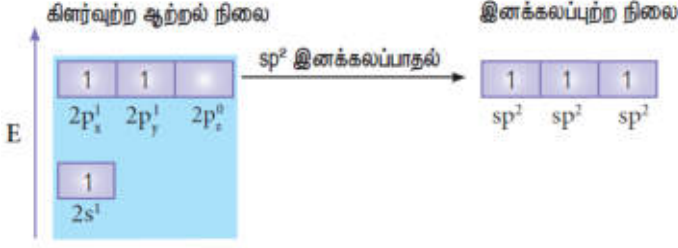
ஒவ்வொரு sp இனக்கலப்படைந்த ஆர்பிட்டால்களும், குளோரினின் p_z ஆர்பிட்டாலுடன் நேர்கோட்டில் மேற்பொருந்துவதால் படத்தில் காட்டியுள்ளவாறு Be மற்றும் Cl க்கு இடையே சகப்பிணைப்புகள் உருவாகின்றன.

sp^2 இனக்கலப்பு:

போரான் ட்ரை புளூரைடு (BF_3) மூலக்கூறில் பிணைப்பு உருவாதலை கருதுக. போரான் அணுவின் இணைதிற கூட்டு எலக்ட்ரான் அமைப்பு $[He]2s^2 2p^1$



இயல்பு ஆற்றல் நிலையில் போரான் அணுவின் இணைதிறன் கூட்டில் இணையாகாத எலக்ட்ரான் ஒன்று மட்டுமே உள்ளது. ஆனால், புளூரினுடன் மூன்று சகப்பிணைப்பை ஏற்படுத்த மூன்று இணையாகாத எலக்ட்ரான்கள் தேவை. இதனை பெறும் பொருட்டு, போரானின் 2s ஆர்பிட்டாலில் உள்ள இரு எலக்ட்ரான்களில் ஒரு எலக்ட்ரானானது $2p_y$ ஆர்பிட்டாலுக்கு கிளர்வுற்று இனக்கலப்பாதலுக்கு உட்பட்டு, படத்தில் காட்டியுள்ளவாறு மூன்று சமமான sp^2 இனக்கலப்படைந்த ஆர்பிட்டால்களைத் தருகின்றன. இம்மூன்று ஆர்பிட்டால்களும் xy என்ற சம தளத்தில் அமைகின்றன. மேலும் இரு ஆர்பிட்டால்களுக்கு இடையேயான பிணைப்புக் கோணம் 120° ஆகும்.

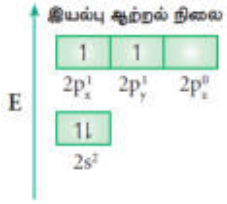


புளூரினின் $2p_z$ ஆர்பிட்டால்கள் மேற்பொருந்துதல்:

போரானின் மூன்று sp^2 இனக்கலப்படைந்த ஆர்பிட்டால்களுடன் மூன்று புளூரின் அணுக்களின் $2p_z$ ஆர்பிட்டால்கள் நேர்கோட்டில் மேற்பொருந்துவதால் படத்தில் காட்டியுள்ளவாறு B மற்றும் F க்கு இடையே சகப்பிணைப்புகள் உருவாகின்றன.

sp^3 இனக்கலப்பு:

மீத்தேன் மூலக்கூறை எடுத்துக்காட்டாகக் கொண்டு sp^3 இனக்கலப்பிணை விளக்கலாம். மீத்தேன் மூலக்கூறில் மைய கார்பன் அணு நான்கு ஹைட்ரஜன் அணுக்களுடன் பிணைக்கப்பட்டுள்ளது. கார்பன் அணுவின் இணைதிரு கூட்டு எலக்ட்ரான் அமைப்பு இயல்பு ஆற்றல் நிலையில் $[He]2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^0$



நான்கு ஹைட்ரஜன் அணுக்களுடன் நான்கு சகப்பிணைப்புகளை ஏற்படுத்த கார்பனின் 2s ஆர்பிட்டாலில் உள்ள இரு எலக்ட்ரான்களில் ஒரு எலக்ட்ரானானது $2p_z$ ஆர்பிட்டாலுக்கு கிளர்வுறுகிறது. கார்பனின் ஒரு 2s ஆர்பிட்டாலும், மூன்று 2p ஆர்பிட்டால்களும் இனக்கலப்பு அடைந்து நான்கு சமமான sp^3 இனக்கலப்பு ஆர்பிட்டால்களைத் தருகின்றன. மேலும், இரு sp^3 ஆர்பிட்டால்களுக்கு இடையேயுள்ள பிணைப்புக் கோணம் $109^\circ 28'$ ஆகும்.

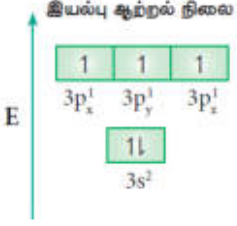
ஹைட்ரஜனின் 1s ஆர்பிட்டால்கள் மேற்பொருந்துதல்:

நான்கு ஹைட்ரஜன் அணுக்களின் 1s ஆர்பிட்டால்கள், கார்பன் அணுவின் நான்கு sp^3 இனக்கலப்பு ஆர்பிட்டால்களுடன் நேர்கோட்டில் மேற்பொருந்தி மீத்தேன் மூலக்கூறினில் 4C-H σ -பிணைப்பினை படத்தில் காட்டியுள்ளவாறு ஏற்படுத்துகின்றன.

$sp^3 d$ இனக்கலப்பு:

PCl_5 போன்ற மூலக்கூறுகளில் மைய பாஸ்பரஸ் அணு ஐந்து குளோரின் அணுக்களுடன் சகப்பிணைப்பில் பிணைக்கப்பட்டுள்ளது. இங்கு பாஸ்பரஸின் அணு ஆர்பிட்டால்கள், அதாவது ஒரு 3s ஆர்பிட்டால் மூன்று 3p ஆர்பிட்டால்கள் மற்றும் ஒரு நிரப்பப்பட்டாத 3d ஆர்பிட்டால்கள் மற்றும் ஒரு

நிரப்பப்படாத 3d ஆர்பிட்டால்கள் மற்றும் ஒரு நிரப்பப்படாத 3d ஆர்பிட்டால் (d_{z^2}) ஆகியவைகள் sp^3d இனக்கலப்பில் ஈடுபடுகின்றன. பாஸ்பரஸ் அணுவின் இயல்பு ஆற்றல் நிலையில் எலக்ட்ரான் அமைப்பு $[Ne]3s^2 3p_x^1 3p_y^1 3p_z^1$ வில் காட்டப்பட்டுள்ளது. பாஸ்பரஸின் இரட்டை நிலையில் உள்ள 3s எலக்ட்ரானில் ஒன்று ஒரு காலியாக உள்ள 3d ஆர்பிட்டாலுக்கு ($3d_{z^2}$) கிளர்வுறுகின்றது. பாஸ்பரஸ் அணுவின் ஒரு 3s ஆர்பிட்டால், மூன்று 3p ஆர்பிட்டால்கள் மற்றும் ஒரு $3d_{z^2}$ ஆர்பிட்டால்களைத் தருகின்றன. sp^3d இனக்கலப்பு ஆர்பிட்டால்களைத் தருகின்றன. இனக்கலப்பு ஆர்பிட்டால்கள் முக்கோண இரு பிரமிடு வடிவமைப்பில் படத்தில் உள்ளவாறு அமைந்துள்ளன.

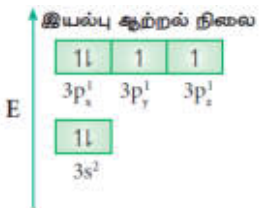


குளோரின் $3p_z$ ஆர்பிட்டால்கள் மேற்பொருந்துல்:

பாஸ்பரஸின் ஐந்து sp^3d ஆர்பிட்டால்கள், ஐந்து குளோரின் அணுக்களின் $3p_z$ ஆர்பிட்டால்களுடன் நேர்கோட்டில் மேற்பொருந்துவதால் ஐந்து P-Cl (σ) சகப்பிணைப்புகள் படத்தில் காட்டப்பட்டுள்ளவாறு உருவாகின்றன.

sp^3d^2 இனக்கலப்பு:

சல்பர் ஹெக்சா ஃபுளூரைடு (SF_6) மூலக் கூறில் மைய சல்பர் அணுவானது அதன் இணைதிறன் கூட்டினை விரிவாக்கி sp^3d^2 இனக்கலப்பிற்கு உட்பட்டு ஆறு சம ஆற்றலுடைய sp^3d^2 இனக்கலப்பு ஆர்பிட்டால்களை உருவாக்குகின்றன. இவைகள் ஆறு சமமான S-F (σ) சகப்பிணைப்புகள் உருவாக காரணமாகின்றன. சல்பர் அணுவின் இயல்பு ஆற்றல் நிலை எலக்ட்ரான் அமைப்பு $[Ne]3s^2 3p_x^2 3p_y^1 3p_z^1$



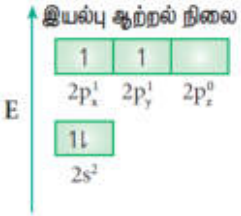
3s ஆர்பிட்டால் மற்றும் 3p ஆர்பிட்டால் ஆகிய ஒவ்வொன்றிலிருமும் இருந்தும் ஒரு எலக்ட்ரான், காலியாக உள்ள 3d ஆர்பிட்டால்களுக்கு (d_{z^2} மற்றும் $d_{x^2-y^2}$) கிளர்வுறுகின்றன. சல்பரின் இந்த ஆறு இணைதிற ஆர்பிட்டால்களும் (ஒரு 3s ஆர்பிட்டால், மூன்று 3p ஆர்பிட்டால்கள் மற்றும் இரண்டு 3d ஆர்பிட்டால்கள் மற்றும் இரண்டு 3d ஆர்பிட்டால்கள்) கலந்து ஆறு சமமான sp^3d^2 இனக் கலப்பு ஆர்பிட்டால்களைத் தருகின்றன. இந்த ஆர்பிட்டால்கள் படத்தில் காட்டப்பட்டுள்ளவாறு எண்முகி வடிவமைப்பினைக் பெற்றுள்ளன.

புளூரின் $2p_z$ ஆர்பிட்டால்கள் மேற்பொருந்துதல்:

சல்பரின் ஆறு sp^3d^2 இனக்கலப்பு ஆர்பிட்டால்கள் ஆறு புளூரின் $2p_z$ ஆர்பிட்டால்களுடன் நேர்கோட்டில் மேற்பொருந்தி சல்பர் ஹெக்சா புளூரைடில் ஆறு S-F பிணைப்புகளை உருவாக்குகின்றன.

எத்திலீனில் காணப்படும் பிணைப்புகள்:

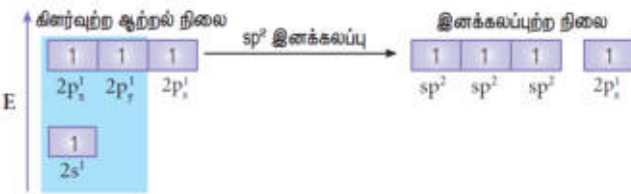
எத்திலீனில் பிணைப்பு உருவாதலை இனக்கலப்பாதல் கோட்பாட்டினைப் பயன்படுத்தி விளக்கலாம். எத்திலீனின் மூலக்கூறு வாய்பாடு C_2H_4 . கார்பனின் இணைதிறன் நான்கு. அதன் இணைதிற கூட்டு எலக்ட்ரான் அமைப்பு இயல்பு ஆற்றல் நிலையில் $[He]2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^0$. கார்பனின் நான்கு இணை திறனை நிறைவு செய்யும் பொருட்டு, 2s ஆர்பிட்டாலிலிருந்து ஒரு எலக்ட்ரானை $2p_z$ ஆர்பிட்டாலுக்கு கிளர்வுறச் செய்க.



எத்திலீனில் உள்ள இரண்டு கார்பன் அணுக்களும் sp^2 இனக்கலப்பாதலுக்கு உட்பட்டுள்ளன. கார்பனின் 2s, $2p_x$ மற்றும் $2p_y$ ஆகிய ஆர்பிட்டால்கள் ஒன்றோடொன்று கலந்து மூன்று சமமான இனக்கலப்படைந்த ஆர்பிட்டால்களை உருவாக்கின்றன. இந்த ஆர்பிட்டால்கள் ஒன்றுக்கொன்று 120° கோண இடைவெளியில் xy தளத்தில் அமைகின்றன. கார்பனின் இனக்கலப்படையாத ஆர்பிட்டாலானது இந்த தளத்திற்கு செங்குத்தான திசையில் அமைகின்றது. கார்பனின் இனக்கலப்படையாத ஆர்பிட்டாலானது $2p_z$ இந்த xy தளத்திற்கு செங்குத்தான திசையில் அமைகின்றது.

சிக்மா பிணைப்பு உருவாதல்:

மூலக்கூறு அச்சில் (x-அச்சு) அமைந்த, ஒவ்வொரு கார்பன் அணுவின் ஒரு sp^2 இனக்கலப்பு அடைந்த ஆர்பிட்டால்கள் ஒன்றோடொன்று நேர்கோட்டில் மேற்பொருந்தி C-C சிக்மா பிணைப்பினை உருவாக்குகிறது. இரண்டு கார்பன் அணுக்களின் மற்ற இரு sp^2 இனக்கலப்படைந்த ஆர்பிட்டால்களும், நான்கு ஹைட்ரஜன் அணுக்களின் நான்கு 1s ஆர்பிட்டால்களுடன் நேர்கோட்டில் மேற்பொருந்துவதால், ஒவ்வொரு கார்பனும், ஹைட்ரஜனுடன் இரு C-H சிக்மா பிணைப்புகளை உருவாக்குகின்றன.



π பிணைப்பு உருவாதல்

இரு கார்பன் அணுக்களில் காணப்படும் இனக்கலப்பாதலுக்கு உட்படாத இரு $2p_z$ ஆர்பிட்டால்களும் மூலக்கூறு அச்சில் அமையாததால் பக்கவாட்டின் வழியாக மட்டுமே மேற்பொருந்து இயலும். இத்தகைய பக்கவாட்டு மேற்பொருந்துதலால் இரு கார்பன் அணுக்களுக்கும் இடையே படத்தில் காட்டியுள்ளவாறு ஒரு π பிணைப்பு உருவாகின்றது.

அசிட்டிலீனில் காணப்படும் பிணைப்புகள்:

எத்திலீனைப் போலவே, இனக்கலப்பாதல் கொள்கையினைப் பயன்படுத்தி அசிட்டிலீனில் பிணைப்பு உருவாதலை விளக்கலாம். அசிட்டிலீனின் மூலக்கூறு வாய்ப்பாடு C_2H_2 . இயல்பு ஆற்றல் நிலையில் உள்ள கார்பனின் இணைதிற கூட்டின் எலக்ட்ரான் அமைப்பு $[He]2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^0$. கார்பனின் நான்கு இணைதிறனை நிறைவு செய்யும் பொருட்டு 2s ஆர்பிட்டாலில் உள்ள ஒரு எலக்ட்ரானை $2p_z$ ஆர்பிட்டாலுக்கு கிளர்வுறச் செய்க.

அசிட்டிலீன் மூலக்கூறில், இரு கார்பன் அணுகளும் sp இனக்கலப்பு நிலையில் காணப்படுகிறது. அவற்றின் 2s மற்றும் ஆர்பிட்டால்கள் ஒன்றோடொன்று கலந்து இரு சமமான sp இனக்கலப்படைந்த ஆர்பிட்டால்களை உருவாக்குகின்றன. இவைகள் மூலக்கூறு அச்சின் (x-அச்ச) வழியே நேர்கோட்டில் அமைகின்றன. இனக்கலப்பு அடையாத $2p_y$ மற்றும் $2p_z$ ஆர்பிட்டால்கள் மூலக்கூறு அச்சிற்கு செங்குத்தாக அமைந்துள்ளன.

சிம்மா பிணைப்பு உருவாதல்:

ஒவ்வொரு கார்பனிலும் உள்ள ஒரு sp இனக்கலப்படைந்த ஆர்பிட்டால் ஒன்றோடொன்று நேர்கோட்டில் மேற்பொருந்தி ஒரு C-C சிம்மா பிணைப்பினை ஏற்படுத்துகின்றது. இரு கார்பன்களின் மற்றுமொரு sp இனக்கலப்பு ஆர்பிட்டால்களுடன் இரு ஹைட்ரஜன் அணுக்களின் இரு 1s ஆர்பிட்டால்கள் நேர்கோட்டில் மேற்பொருந்துவதால், ஒவ்வொரு கார்பன் அணுவும், ஒரு ஹைட்ரஜனுடன் ஒரு C-H சிம்மா பிணைப்பினை ஏற்படுத்துகின்றன.

பை பிணைப்பு உருவாதல்:

ஒவ்வொரு கார்பன் அணுவிலும் காணப்படும் இனக்கலப்படையாத $2p_y$ மற்றும் $2p_z$ ஆர்பிட்டால்கள் பக்கவாட்டில் மேற்பொருந்துகின்றன. இதன் விளைவாக இரு கார்பன் அணுக்களுக்கிடையே இரு பை பிணைப்புகள் ($p_y - p_y$ மற்றும் $p_z - p_z$) படத்தில் காட்டியுள்ளவாறு உருவாகின்றன.



மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால் கொள்கை:

லூயிஸ் கொள்கை மற்றும் இணைதிற பிணைப்புக் கொள்கை (VB கொள்கை) ஆகியன வேதிப்பிணைப்பு உருவாதல் மற்றும் மூலக்கூறு அமைப்புகளை பண்பு ரீதியாக விளக்கின. எனினும், மூலக்கூறுகளின் கண்டறியப்பட்ட சில பண்புகளை விளக்குவதற்கு மேற்கண்டுள்ள இரு கொள்கைகளும் போதுமானதாக இல்லை. எடுத்துக்காட்டாக இவ்விரு கொள்கைகளின்படி ஆக்சிஜன் மூலக்கூறு படையாகாந்தப் பண்பினைப் பெற்றிருக்க வேண்டும் எனினும், வலுவான காந்தப் புலத்தில் திரவ நிலையில் உள்ள ஆக்சிஜன் காந்த துருவங்களுக்கிடையே கவரப்படுகின்றது. இதிலிருந்து ஆக்சிஜன் பாரா காந்தத் தன்மையுடையது என அறிகின்றோம். மேற்கண்டுள்ள இரு கொள்கைகளும் பிணைப்பு உருவாதலை எலக்ட்ரான் இரட்டையின் அடிப்படையில் விளக்கின. எனவே இக்கொள்கைகள் பாரா காந்தத் தன்மையுடைய மூலக்கூறுகளின் பிணைப்பு இயல்பினை விளக்க இயலவில்லை. F. ஹீண்ட் மற்றும் ராபர்ட் S. முல்லிகன் ஆகிய அறிஞர்கள் மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால் கொள்கை என்றழைக்கப்படும் பிணைப்புக் கொள்கையை உருவாக்கினார்கள். இக்கொள்கையானது மூலக்கூறுகளின் காந்தப் பண்பினை விளக்கியது.

இக்கொள்கையின் முக்கிய அம்சங்கள் பின்வருமாறு:

1. அணுக்கள் இணைந்து மூலக்கூறினை உருவாக்கும் போது, அவைகளின் அணு ஆர்பிட்டால்கள் தங்களது தனித்தன்மையை இழக்கின்றன. மேலும் மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால்கள் என்றழைக்கப்படும் புதிய ஆர்பிட்டால்கள் உருவாகின்றன.
2. இணையும் அணு ஆர்பிட்டால்களின் வடிவத்தினைப் பொறுத்து, உருவாகும் மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால்களின் வடிவங்கள் அமைகின்றன.
3. இணைகின்ற அணு ஆர்பிட்டால்களின் எண்ணிக்கையும் உருவான மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால்களின் எண்ணிக்கையும் சமம். இணையும் தொடர்புடைய அணு ஆர்பிட்டால்களின் எண்ணிக்கையும் சமம். இணையும் தொடர்புடைய அணு ஆர்பிட்டால்களின் ஆற்றலுடன் ஒப்பிடும்போது, உருவான மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால்களில் சரி பாதியளவு எண்ணிக்கையுடைய ஆர்பிட்டால்கள் அவற்றைவிட குறைவான ஆற்றலையும் மற்ற சரி பாதியளவு எண்ணிக்கையுடைய மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால்கள் அதிக ஆற்றலையும் பெற்றுள்ளன. குறைவான ஆற்றலைப் பெற்றிருக்கும் மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால்கள் பிணைப்பு மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால்கள் எனவும், அதிக ஆற்றலைப் பெற்றிருக்கும் மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால்கள் எதிர்பிணைப்பு மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால்கள் எனவும் அழைக்கப்படுகின்றன. பிணைப்பு மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால்கள் சிக்மா (σ), பை (π) டெல்டா (δ) எனவும், எதிர் பிணைப்பு மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால்கள் σ^* , π^* மற்றும் δ^* எனவும் அழைக்கப்படுகின்றன.
4. மூலக்கூறில், எலக்ட்ரான்கள் புதிதாக உருவான மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால்களில் நிரப்பப்படுகின்றன. இந்த ஆர்பிட்டால்களில் எலக்ட்ரான்கள் நிரப்பப்படுதல், அணு ஆர்பிட்டால்களில் எலக்ட்ரான்கள் நிரப்பப்படுவது போன்றே ஆ.பா தத்துவம், பௌலி தவிர்க்கைத் தத்துவம் மற்றும் ஹீண்ட் விதி ஆகியவற்றின் அடிப்படையிலேயே அமையும்.
5. இணையும் இரு அணுக்களுக்கிடையே காணப்படும் பிணைப்புகளின் எண்ணிக்கை பிணைப்புத்தரம் எனப்படுகிறது. ஒரு மூலக்கூறின் பிணைப்புத் தரத்தினை பின்வரும் சமன்பாட்டால் கண்டறியலாம்.

$$\text{பிணைப்புத்தரம்} = \frac{N_b - N_a}{2}$$

இங்கு,

N_b என்பது பிணைப்பு மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால்களில் காணப்படும் மொத்த எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை.

N_a என்பது எதிர்பிணைப்பு மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால்களில் காணப்படும் மொத்த எலக்ட்ரான்களின் எண்ணிக்கை.

மேலும் ஒரு மூலக்கூறின் பிணைப்புத் தரம் பூஜ்ஜியம் எனில் அத்தகைய மூலக்கூறு உருவாவதில்லை என அறியலாம்.

அணு ஆர்பிட்டால்களின் நேர்கோட்டு இணைவு (LCAO) Linear Combination of atomic orbitals

ஒரு மூலக்கூறிற்கான ஷ்ரோடிங்கர் அலைச் சமன்பாட்டிற்கு தீர்வு கண்டறிவதன் மூலம் அதன் மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால்களுக்கான அலைச் சார்பினைக் கண்டறிய இயலும். மூலக்கூறுகளின் ஷ்ரோடிங்கர் அலைச் சமன்பாட்டினை தீர்த்தல் என்பது மிகவும் சிக்கலானது என்பதால், மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால்களுக்கான அலைச்சார்பினைக் கண்டறிய தோராய முறைகள் பயன்படுகின்றன. அத்தகைய முறைகளில் பொதுவானதொரு முறை அணு ஆர்பிட்டால்களின் நேரிய இணைவு (LCAO) ஆகும்.

அணு ஆர்பிட்டால்களின் அலைச்சார்பு Ψ என குறிக்கப்படுவதை நாம் அறிவோம். ஒப்பிடத்தக்க ஆற்றலுடைய Ψ_A மற்றும் Ψ_B ஆகிய இரு அலைச்சார்புகளால் குறிப்பிடப்படும் இரு அணு ஆர்பிட்டால்கள் இணைந்து இரு மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால்களைத் தரும் ஒரு நேர்வினை நாம் கருதுவோம்.

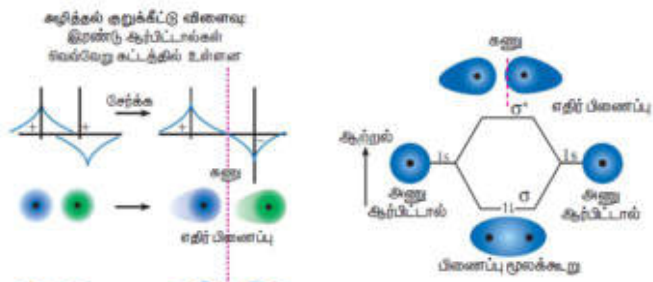
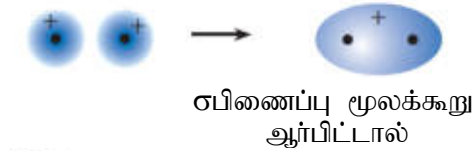
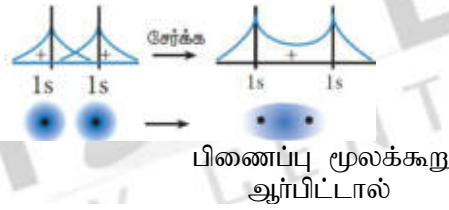
அவைகளுள் ஒன்று பிணைப்பு மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால் ($\Psi_{\text{பிணைப்பு}}$) மற்றொன்று எதிர் பிணைப்பு மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால் ($\Psi_{\text{எதிர் பிணைப்பு}}$) ஆகும். இவ்விரு மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால்களுக்கான அலைச்சார்பினை அணு ஆர்பிட்டால்களான Ψ_A மற்றும் Ψ_B ஆகியவைகளின் நேரிய இணைவின் மூலம் பெறலாம்.

$$\Psi_{\text{பிணைப்பு}} = \Psi_A + \Psi_B$$

$$\Psi_{\text{எதிர் பிணைப்பு}} = \Psi_A - \Psi_B$$

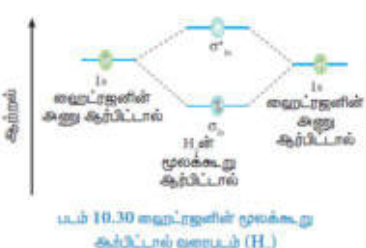
அணு ஆர்பிட்டால்களின் ஆக்கக் குறுக்கீட்டு விளைவால், பிணைப்பு மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால்கள் உருவாவதாகவும், அணு ஆர்பிட்டால்களின் அழித்தல் குறுக்கீட்டு விளைவின் காரணமாக எதிர் பிணைப்பு மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால்கள் உருவாவதாகவும் கருதலாம். இரு 1s ஆர்பிட்டால்களில் இருந்து இரு மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால்கள் உருவாவது பின்வரும் படத்தில் காட்டப்பட்டுள்ளது.

ஆக்கக் குறுக்கீட்டு விளைவு: இரண்டு 1s ஆர்பிட்டால்கள் ஒரே கட்டத்தில் உள்ளன. மற்றும் ஒரே குறிகளை பெற்றுள்ளன.

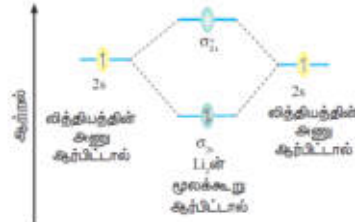


படம் 10.29 அணு ஆர்பிட்டால்களின் நேர்நேர் இணைவு

10.10.2 ஒத்த இரு அணுக்கள் கொண்ட ஈரணு மூலக்கூறுகளின் பிணைப்பு

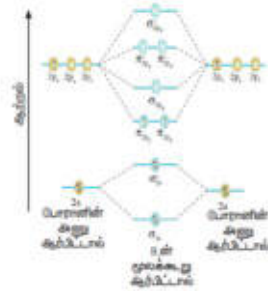


அணு ஆர்பிட்டால்களின் மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால் வரைபடம் (H_2)
 அணு ஆர்பிட்டால்களின் எலக்ட்ரான் அமைப்பு $1s^1$
 அணு ஆர்பிட்டால்களின் மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால்களின் எலக்ட்ரான் அமைப்பு σ_1^2
 பிணைப்பு குறம் = $\frac{N_b - N_a}{2} = \frac{2 - 0}{2} = 1$
 மூலக்கூறில் தனித்த எலக்ட்ரான்கள் இல்லை எனவே இது டையாகாந்தப் பண்புடையது.



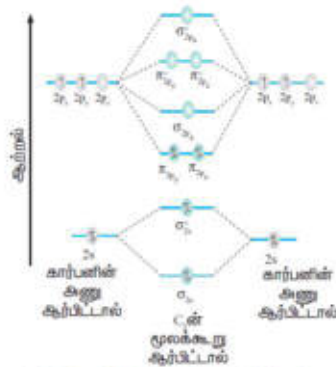
படம் 10.31 வித்தியத்தின் (L1) மூலக்கூறு ஆற்றிடலான வரைபடம்

வித்தியத்தின் (L1) மூலக்கூறு ஆற்றிடலான வரைபடம்
 வித்தியம் அனுபவிக்கக்கூடிய எலக்ட்ரான்களின் அமைப்பு = $1s^2, 2s^1$
 வித்தியம் மூலக்கூறின் எலக்ட்ரான்களின் அமைப்பு = $\sigma_{1s}, \sigma_{2s}, \sigma_{2p}$
 பிணைப்பு எண் = $\frac{N_b - N_f}{2} = \frac{4 - 2}{2} = 1$
 மூலக்கூறில் இரு தனித்த எலக்ட்ரான்கள் இம்மை எனவே இது அடையாளத்துப் பண்புடையது.



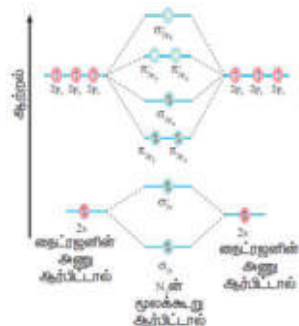
படம் 10.32 பெரியதின் (B1) மூலக்கூறு ஆற்றிடலான வரைபடம்

பெரியதின் (B1) மூலக்கூறு ஆற்றிடலான வரைபடம்
 பெரியதின் அனுபவிக்கக்கூடிய எலக்ட்ரான்களின் அமைப்பு = $1s^2, 2s^1, 2p^1$
 பெரியதின் மூலக்கூறின் எலக்ட்ரான்களின் அமைப்பு = $\sigma_{1s}, \sigma_{2s}, \sigma_{2p}, \pi_{2p}, \pi_{2p}, \pi_{2p}, \pi_{2p}$
 பிணைப்பு எண் = $\frac{N_b - N_f}{2} = \frac{6 - 4}{2} = 1$
 மூலக்கூறில் இரு தனித்த எலக்ட்ரான்கள் உள்ளது எனவே இது பரிமாண கார்த்தம் பண்புடையது.



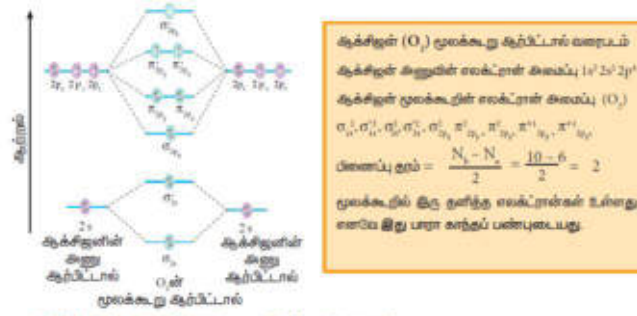
படம் 10.33 கார்பனின் (C1) மூலக்கூறு ஆற்றிடலான வரைபடம்

கார்பனின் (C1) மூலக்கூறு ஆற்றிடலான வரைபடம்
 கார்பன் அனுபவிக்கக்கூடிய எலக்ட்ரான்களின் அமைப்பு = $1s^2, 2s^1, 2p^2$
 கார்பன் மூலக்கூறின் எலக்ட்ரான்களின் அமைப்பு = $\sigma_{1s}, \sigma_{2s}, \sigma_{2p}, \pi_{2p}, \pi_{2p}, \pi_{2p}, \pi_{2p}$
 பிணைப்பு எண் = $\frac{N_b - N_f}{2} = \frac{8 - 4}{2} = 2$
 மூலக்கூறில் தனித்த எலக்ட்ரான்கள் இம்மை எனவே இது அடையாள கார்த்தம் பண்புடையது.



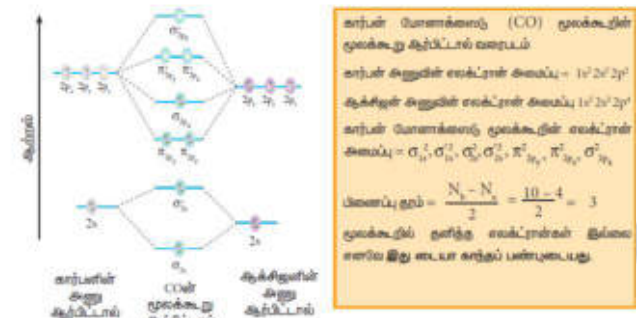
படம் 10.34 நைட்ரஜனின் (N1) மூலக்கூறு ஆற்றிடலான வரைபடம்

நைட்ரஜனின் (N1) மூலக்கூறு ஆற்றிடலான வரைபடம்
 நைட்ரஜன் அனுபவிக்கக்கூடிய எலக்ட்ரான்களின் அமைப்பு = $1s^2, 2s^1, 2p^3$
 நைட்ரஜன் மூலக்கூறின் எலக்ட்ரான்களின் அமைப்பு = $\sigma_{1s}, \sigma_{2s}, \sigma_{2p}, \pi_{2p}, \pi_{2p}, \pi_{2p}, \pi_{2p}$
 பிணைப்பு எண் = $\frac{N_b - N_f}{2} = \frac{10 - 4}{2} = 3$
 மூலக்கூறில் தனித்த எலக்ட்ரான்கள் இம்மை எனவே இது அடையாள கார்த்தம் பண்புடையது.

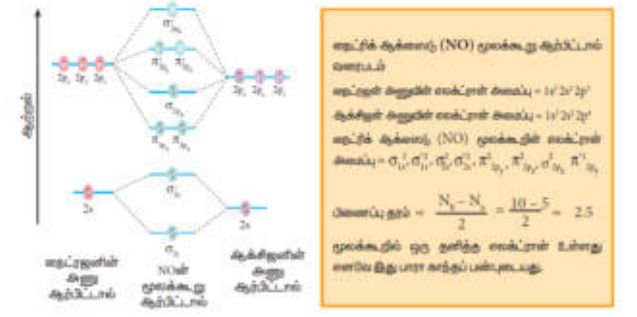


படம் 10.35. ஆக்சிஜன் (O₂) மூலக்கூறு ஆற்றிட்பம் வரைபடம்

10.10.3 வெவ்வேறு அணுக்களைக் கொண்ட இரு அணு மூலக்கூறுகளின் காணும் பிணைப்புகள்



படம் 10.36 கார்பன் மொனாக்சைடு (CO) மூலக்கூறு ஆற்றிட்பம் வரைபடம்



படம் 10.37. எட்டிக் ஆக்சைடு (NO) மூலக்கூறு ஆற்றிட்பம் வரைபடம்

உலோக பிணைப்பு

உலோகங்கள் பளபளப்புத் தன்மை, அதிக அடர்த்தி, மின் மற்றும் வெப்பங்கடத்தும் தன்மை, தட்டையாக்குதல் மற்றும் கம்பியாக நீட்டுதல் ஆகிய அவற்றிற்கே உரிய பண்புகளைப் பெற்றுள்ளன. மேலும், இவற்றின் கொதிநிலை மற்றும் உருகுநிலை மதிப்புகள் அதிகம். உலோகப் படிக்கத்தில், உலோக அணுக்கள் மிக அருகில் நெருங்கி அமைந்திருக்க காரணமாக அமையும் விசை உலோகப்பிணைப்பு என அறியப்படுகிறது. உலோகப்பிணைப்பானது ஒரு அயனிப்பிணைப்பல்ல. ஏனெனில், அயனிப்பிணைப்பானது வெவ்வேறு எலக்ட்ரான் கவர்தன்மை உடைய அணுக்களுக்கிடையே ஏற்படுகிறது. அதைப் போலவே இது ஒரு சகப்பிணைப்பும் அல்ல ஏனெனில் உலோக அணுக்களில் அதனை சூழ்ந்துள்ள 8 அல்லது 12 அணுக்களுடன் இணைதிற எலக்ட்ரான்களை சமமாகப் பங்கிடும் வகையில் அவைகளில் போதுமான எலக்ட்ரான்களும் இல்லை. எனவே உலோகப் பிணைப்பிணை விளக்க ஒரு புதியக் கொள்கை தேவைப்பட்டது.

ட்ரூட் மற்றும் லாரன்ஸ் ஆகியோர்களால் முதன் முதலில் உலோக பிணைப்பிற்கானக் கொள்கை முன்மொழியப்பட்டது. இக் கொள்கையின்படி உலோகப்படிக்கமானது, கட்டுறா எலக்ட்ரான்களின் வாயுவில், நேர்மின் சமை கொண்ட அயனிகள் அமிழ்ந்துள்ள ஒரு தொகுப்பாக கருதப்படுகிறது. உலோகங்களின் இணைதிற எலக்ட்ரான்கள் அயனியாதலால் இந்த கட்டுறா எலக்ட்ரான்கள் உருவாகின்றன. அணுக்களின் இணைதிற எலக்ட்ரான்கள் உலோக படிக்கத்தில் உள்ள அனைத்து அணுக்களாலும் கட்டுப்பாடின்றி பங்கிடப்படுவதால் உலோக பிணைப்பானது எலக்ட்ரானிய பிணைப்பு (electronic bonding) எனவும் அழைக்கப்படுகிறது. கட்டுறா எலக்ட்ரான்கள் ஒன்றையொன்று

விலக்குவதால் அவைகள் உலோக அயனிகளைச் சுற்றி சீராக விரவியுள்ளன. உலோகங்களின் பெரும்பாலான இயற்பண்புகளை இக்கொள்கை விளக்கினாலும் சில வரம்புகளும் உள்ளன.

உலோக அயனிகளுக்கும், கட்டுறா எலக்ட்ரான்களுக்கும் இடையே நிலைமின்னியல் கவர்ச்சி விசை காணப்படுவதால், உலோகமானது நெருங்கிப் பொதிந்த கணக்கற்ற உலோக அயனிகளைக் கொண்டுள்ள ஒரு முப்பரிமான வடிவமைப்பினைப் பெறுகிறது. எனவே உலோகங்கள் அதிக அடர்த்தியை பெற்றுள்ளன. உலோகத்தின் மீது வெளிப்புற இயந்திர தடை செயல்படும் போது, அதன் நெருங்கிப் பொதிந்த அமைப்பானது பல நழுவு தளங்களைக் கொண்டிருப்பதால், அதன் வழியே நகர்தல் நடைபெற இயலும். அதாவது உலோகமானது கம்பியாக நீளும் தன்மையைப் பெறுகிறது. வெளிப்புற இயந்திர தடை செயல்படும்போது தூய்மையான உலோகங்கள் உடையும் முன்னர் 40% முதல் 60% வரை நீட்சியடைகின்றன. ஒவ்வொரு உலோக அயனியும் அதனைச் சுற்றி அனைத்து திசைகளிலும் எலக்ட்ரான் திரள் முகிலால் சூழப்பட்டுள்ளதால், உலோகப் பிணைப்பிற்கு திசைப்பண்பு இல்லை.

நேர்மின்சுமை அயனிகளின் வழியே எலக்ட்ரான்கள் கட்டுப்பாடின்றி நகர்வதால், உலோகங்கள் அதிக வெப்ப மற்றும் மின்கடத்தும் திறனைப் பெற்றுள்ளன. எலக்ட்ரான் திரள் முகிலால் ஒளியானது எதிரொளிக்கப்படுவதால் உலோகங்கள் பளபளப்புத்தன்மையினைப் பெற்றுள்ளன. உலோகப் பிணைப்புகள் அதிக வலிமையுடையவை என்பதால், உலோக அயனிகள் தனித்தனியே பிரிகையுற்று திரவமாகவோ அல்லது வாயுவாகவோ நிலைமை மாற்றம் அடைதல் எளிதானது அல்ல. எனவே உலோகங்கள் அதிக உருகுநிலை மற்றும் கொதிநிலையைப் பெற்றுள்ளன.

உலோகங்களில் காணப்படும் பிணைப்பினை, மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால் கொள்கைப்படி நன்கு விளக்க இயலும். இக்கொள்கையின்படி, உலோக படிக்கத்தில் உள்ள அதிக எண்ணிக்கையிலான அணுக்களின் அணு ஆர்பிட்டால்கள் மேற்பொருந்தி எண்ணற்ற பிணைப்பு மற்றும் எதிர்பிணைப்பு மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால்களை, ஆற்றல் இடைவெளியின்றி உருவாக்குகின்றன.

பிணைப்பு மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால் ஒவ்வொன்றும், ஒரு ஜோடி எலக்ட்ரான்களுடன் முழுமையாக நிரப்பப்பட்டுள்ளன. எதிர்பிணைப்பு மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால்கள் காலியாக உள்ளன. ஆற்றல் இடைவெளி இன்மை உலோகங்களின் மின்கடத்தும் திறனுக்கு காரணமாக அமைகின்றன. இணைதிற பட்டையிலிருந்து, கடத்துப்பட்டைக்கு பல எலக்ட்ரான்கள் வெப்பக் கிளர்வுறுதன் காரணமாக, உலோகங்கள் வெப்பம் கடத்தும் தன்மையைப் பெற்றுள்ளன. வெப்பநிலை அதிகரிக்கும்போது மின்கடத்துத் திறன் குறைகிறது. ஏனெனில் உலோக அயனிகளின் வெப்ப இயக்கத்தால், உலோக படிக்கத்திலுள்ள, கட்டுறா எலக்ட்ரான்களின் தடையற்ற இயக்கத்திற்கு தேவையான சீரான படி அமைப்பானது குறைகிறது. தாமிரம், வெள்ளி மற்றும் தங்கத்தினை தவிர்த்த பெரும்பாலான உலோகங்கள் கருமை நிறத்தினை பெற்றுள்ளன. அனைத்து அலைநீளமுடைய ஒளியினை உட்கவர்தலே இதற்குக் காரணமாக அமைகிறது.