

کیمیائی بندش اور سالماتی ساخت

(Chemical Bonding and Molecular Structure)

سائنسدان مسلسل نئے مرکبات دریافت کر رہے ہیں، ان سے متعلق حقائق کو سلسلے وار ترتیب دے رہے ہیں، موجودہ علم کی بنیاد پر وضاحت کرنے کی کوشش کر رہے ہیں یا ابتدائی نظریات کو بہتر طور پر مرتب کر رہے ہیں یا مشاہدہ کیے گئے نئے حقائق کی وضاحت کے لیے نظریات کی تشکیل کر رہے ہیں۔

مادہ ایک یا مختلف قسم کے عناصر سے مل کر بنتا ہے۔ عام حالات میں نوبل گیسوں کے علاوہ اور کوئی عنصر قدرت میں آزاد حالت میں نہیں پایا جاتا ہے۔ تاہم ایٹموں کا ایک مجموعہ ایک نوع کی قسم میں نمایاں خاصیتوں کے ساتھ پایا جاتا ہے۔ ”ایٹموں کے ایسے گروپ کو سالمہ (Molecular) کہتے ہیں۔ ظاہر ہے کہ ایک سالمے میں ایٹموں کو باندھنے کے لیے کوئی قوت درکار ہوگی وہ قوت کشش جو مختلف اجزا (ایٹم، آئن وغیرہ) کو مختلف کیمیائی انواع میں ایک ساتھ باندھ رکھتی ہے، کیمیائی بند کھلاتا ہے۔“ چونکہ ایک کیمیائی مرکب کی تشکیل مختلف عناصر کے علیحدہ علیحدہ طریقوں سے ملنے کے نتیجہ میں ہوتی ہے۔ ایٹم کیوں متحد ہوتے ہیں؟ کچھ مخصوص اتحاد ہی کیوں ممکن ہیں؟ ایسا کیوں ہے کہ کچھ ایٹم متحد ہوتے ہیں اور کچھ نہیں؟ سالمات کی مخصوص ساخت کیوں ہوتی ہے؟ ان سوالات کا جواب دینے کے لیے وقتاً فوقتاً مختلف تصورات اور نظریات پیش کیے گئے ہیں۔ یہ کوہیل-لیوس اپروچ، ویلنس شیل الیکٹران پیئر ریپرن تھیوری (VSEPR)، ویلنس بونڈ (VB) تھیوری اور مولیکولر آرٹھل (MO) تھیوری ہیں۔ بندش کے مختلف نظریات کا ارتقاء اور کیمیائی بندش کی نوعیت کی وضاحت کا قریبی تعلق ایٹم کی ساخت، عناصر کا الیکٹرونی تشکل اور دوری جدول کی سمجھ پیدا کرنے کی کوششوں سے ہے۔ ہر نظام کی کوشش زیادہ مستحکم رہنے کی ہوتی ہے اور بندش نظام کو استحکام فراہم کرنے کے لیے توانائی کو کم کرنے کا ایک قدرتی طریقہ ہے۔

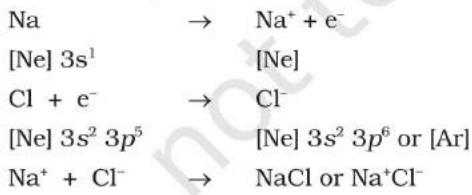
مقاصد

اس سبق کو پڑھنے کے بعد آپ اس لائق ہو جائیں گے کہ:

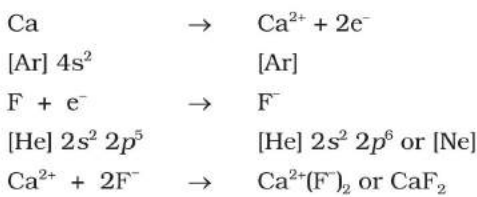
- کیمیائی بندش کے کوہیل-لیوس نظریے کو سمجھ سکیں؛
- آکٹیٹ قاعدے (Octate) کی وضاحت کر سکیں اور اس کی حدود بیان کر سکیں۔ سادہ سالموں کے لیے لیوس ساخت بنائیں؛
- مختلف قسم کے بند کی تشکیل کے عمل کو سمجھ سکیں؛
- وی ایس ای پی آر (VSEPR) نظریے کو بیان کر سکیں اور سادہ سالموں کی پیشین گوئی کر سکیں؛
- شریک گرفت بندش کے لیے ویلنس بانڈ طریقہ کار کی وضاحت کر سکیں؛
- شریک گرفت بندش کی سمتی خصوصیات کی پیشین گوئی کر سکیں؛
- s، p، d اور f آرٹھل کی شمولیت سے ہائبرائڈائزیشن (Hybridisation) کی مختلف اقسام کی وضاحت کر سکیں اور سادہ شریک گرفت سالموں کی شکل بنائیں؛
- آئونیٹکیر دو ایٹمی سالموں کے سالماتی آرٹھل نظریہ (Molecular Orbital Theory) کو بیان کر سکیں؛
- بانڈ روجن بند کے تصور کی وضاحت کر سکیں۔

Li Be ·B· ·C· ·N· ·O· ·F· ·Ne·
لیکس علامات کی اہمیت: علامت کے ارد گرد نقطوں کی تعداد ویلنس الیکٹرانوں کی تعداد کو ظاہر کرتی ہے۔ ویلنس الیکٹرانوں کا یہ عدد عناصر کی عام یا گروپ ویلنس معلوم کرنے میں مدد کرتا ہے۔ عناصر کا گروپ ویلنس عام طور پر لیکس علامت میں نقطوں کی تعداد کے برابر یا آٹھ میں سے نقطوں یا ویلنس الیکٹرانوں کی تعداد گھٹانے پر حاصل شدہ عدد کے برابر ہوتا ہے۔

- کیمیائی بندش سے متعلق کوسل نے مندرجہ ذیل حقائق کی سمت توجہ دلائی:
دوری جدول میں بہت زیادہ برقی منفی ہیلوجن اور بہت زیادہ برقی مثبت فلوی دھاتیں نوبل گیسوں کے ذریعہ جدا کی گئی ہیں۔
- ہیلوجن ایٹم سے منفی آئن کے بننے اور فلوی دھات سے ایک مثبت آئن بننے کا تعلق متعلقہ ایٹموں کے ذریعہ الیکٹران حاصل کرنے یا گنوانے سے ہے۔
- اس طرح بننے والے منفی اور مثبت آئن مستحکم نوبل گیسوں کا الیکٹرانی تشکل حاصل کر لیتے ہیں۔ نوبل گیسوں میں (ہیلیم کے علاوہ جس میں صرف دو الیکٹران ہوتے ہیں) خاص طور پر آٹھ الیکٹرانوں (Octet) کا مستحکم تشکل پایا جاتا ہے۔
- منفی اور مثبت آئن برقی سکونی کشش (Electrostatic Attraction) کے ذریعہ قائم رہتے ہیں۔
- مثال کے طور پر مندرجہ بالا اسکیم کے تحت سوڈیم اور کلورین سے سوڈیم کلورائیڈ کا بننا اس طرح واضح کیا جاسکتا ہے:



اسی طرح CaF_2 کا بننا بھی مندرجہ ذیل طریقے سے دکھایا جاسکتا ہے:



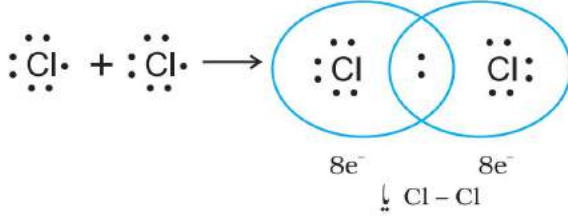
4.1 کیمیائی بندش کے لیے کوسل-لیوس کا طریقہ کار

(Kossel-Lewis Approach to Chemical Bonding)

الیکٹران کی اصطلاح میں کیمیائی بندش کی تشکیل کی وضاحت کے لیے متعدد کوششیں کی گئی ہیں لیکن یہ صرف 1916 میں ممکن ہوا جب کوسل اور لیوس نے آزادانہ طور پر ایک تسلی بخش وضاحت پیش کرنے میں کامیابی حاصل کی۔ وہ پہلے شخص تھے جنہوں نے نوبل گیسوں کی غیر عاملیت کی بنیاد پر بندش کی منطقی وضاحت پیش کی۔

لیوس نے ایٹم کی تصویر پیش کی جس کے مطابق مثبت چارج شدہ 'Kernel' (نیوکلیس اور اندرونی الیکٹران) ہوتا ہے اور بیرونی شیل میں زیادہ سے زیادہ آٹھ الیکٹران سما سکتے ہیں۔ اس نے مزید یہ تصور کیا کہ یہ آٹھ الیکٹران مکعب کے آٹھ کونوں کو گھیرتے ہیں جو 'Kernel' کو گھیرے ہوئے ہے۔ اس طرح سوڈیم کا باہری خول کا واحد الیکٹران مکعب کے ایک کونے کو گھیرے گا، جبکہ گیس میں آٹھوں کونے گھیرے ہوئے ہوں گے۔ الیکٹرانوں کا یہ آکٹیٹ (Octet) ایک مخصوص مستحکم الیکٹران تشکل کو ظاہر کرتا ہے۔ "لیوس نے مزید یہ بھی دعویٰ کیا کہ ایٹم اس وقت مستحکم آکٹیٹ حاصل کر لیتے ہیں جب وہ کیمیائی بند کے ذریعے جوڑے ہوئے ہوتے ہیں۔" سوڈیم اور کلورین کے معاملے میں یہ ایک الیکٹران کی منتقلی کی شکل میں ہو سکتا ہے جب سوڈیم کا ایک الیکٹران کلورین پر منتقل ہو جاتا ہے اور Na^+ اور Cl^- آئن بنتے ہیں۔ دوسرے سالموں جیسے H_2 ، F_2 وغیرہ میں دو ایٹموں کے درمیان ایک الیکٹران کے جوڑے کے اشتراک سے بند بنتا ہے۔ اس عمل میں ہر ایٹم الیکٹرانوں کے باہری مستحکم آکٹیٹ حاصل کر لیتا ہے۔

لیونس علامتیں: سالمہ کے بننے کے دوران کیمیائی اتحاد میں صرف باہری الیکٹران ہی حصہ لیتے ہیں اور وہ گرتی الیکٹران (Valence Electron) کہلاتے ہیں۔ اندرونی الیکٹران کافی محفوظ ہوتے ہیں اور عام طور پر اتحادی عمل میں حصہ نہیں لیتے۔ جی۔ این۔ لیوس، امریکی کیمیادان نے ایٹم میں گرتی الیکٹرانوں کو ظاہر کرنے کا آسان طریقہ بتایا۔ یہ اظہار لیوس علامتیں کہلاتا ہے۔ مثال کے طور پر دوسرے دور کے عناصر کی لیوس علامتیں مندرجہ ذیل ہیں۔

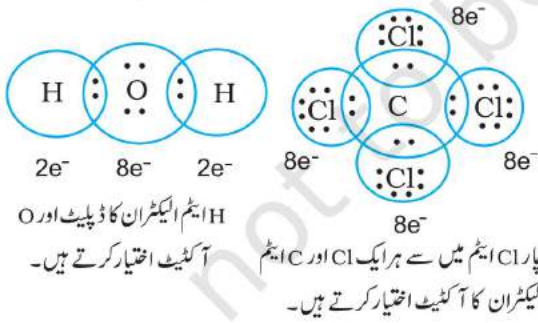


دو کلورین ایٹموں کے درمیان شریک گرفت بند

”یہ نقطے الیکٹران کو ظاہر کرتے ہیں۔ اس طرح کی ساخت کو لیوکس ڈاٹ ساخت کہا جاتا ہے۔“

لیوکس ڈاٹ ساخت دوسرے سالموں کے لیے بھی لکھے جاسکتے ہیں جن میں متحد ہونے والے ایٹم مماثل یا مختلف ہو سکتے ہیں۔ ضروری حالات یہ ہیں کہ:

- ہر ایک بند ایٹموں کے درمیان الیکٹران کے جوڑے میں ساجھے کے نتیجے میں بنتا ہے۔
- متحد ہونے والا ہر ایک ایٹم اس ساجھے کے جوڑے میں کم از کم ایک الیکٹران کی حصہ داری کرتا ہے۔
- الیکٹران کی شرکت کے نتیجے میں متحد ہونے والے ایٹم نوبل گیس کے بیرونی شیل کا تشکل حاصل کر لیتے ہیں۔
- اس طرح پانی اور کاربن ڈی آکسائیڈ میں شریک گرفت بندی تشکیل کو مندرجہ ذیل طریقے سے دکھایا جاسکتا ہے۔



”اس طرح جب دو ایٹم اپنے درمیان الیکٹران کے ایک جوڑے میں شرکت کرتے ہیں تو وہ واحد شریک گرفت بند کے ذریعہ جڑے ہوئے ہوتے ہیں۔“ بہت سے مرکبات میں ایٹموں کے درمیان کثیر بند ہوتے ہیں۔ دو ایٹموں کے درمیان ایک الیکٹران جوڑے سے زیادہ کی شرکت سے کثیر بند بنتے ہیں۔ اگر دو ایٹموں کے درمیان دو الیکٹران جوڑے

”مثبت اور منفی آئن کے درمیان برقی سکونی کشش کے نتیجے میں بننے والا بند برقی گرفت بند (Electrovalent Bond) کہلاتا ہے۔ اس طرح برقی گرفت (Electro Valence) آئن پر اکائی چارج کی تعداد کے برابر ہوتی ہے۔“ اس طرح کیلشیم کو مثبت الیکٹرو ویلنس دو اور کلورین کو منفی الیکٹرو ویلنس دیا جاتا ہے۔

کوسل کے اصول مسلمہ (Poslulates) الیکٹران کی منتقلی کے ذریعہ آئن بنے اور آئن قلمی مرکبات بننے سے متعلق جدید تصورات کے لیے بنیاد فراہم کرتے ہیں۔ آئن مرکبات کو سمجھنے اور انہیں منظم کرنے میں اس کے خیالات بہت اہم ثابت ہوئے ہیں۔ اس کے ساتھ ہی اس نے اس حقیقت کو بھی تسلیم کیا ہے کہ مرکبات کی ایک بڑی تعداد ان تصورات میں فٹ نہیں ہوتی۔

4.1.1 آکٹٹ کا قاعدہ (Octet Rule)

1916 میں کوسل اور لیوکس نے ایٹموں کے درمیان کیمیائی اتحاد کا ایک اہم نظریہ پیش کیا ہے جسے کیمیائی بندش کا الیکٹران نظریہ کہتے ہیں۔ اس کے مطابق ایک ایٹم دوسرے ایٹم کو برقی الیکٹران (Valence Electron) منتقل کر کے (حاصل کر کے یا گنوا کر) اتحاد کر سکتے ہیں یا برقی الیکٹرانوں کا ساجھا کر سکتے ہیں تاکہ وہ اپنے برقی خول میں آکٹٹ قائم کر سکیں۔ یہ آکٹٹ قاعدہ کہلاتا ہے۔

4.1.2 شریک بندش بند (Covalent Bond)

لینگوویز (1919) نے لیوکس کے اصول مسلمہ کو بہتر بنانے کے لیے آکٹٹ کے ساکن ملکہی ترتیب کے تصور کو رد کر کے شریک گرفت بند (Covalent Bond) کی اصطلاح پیش کی۔ لیوکس۔ لینگوویز نظریے کو کلورین کے سالمہ Cl_2 کے بننے کے عمل کے ذریعہ سمجھا جاسکتا ہے۔ Cl ایٹم جس کا الیکٹران تشکل $[\text{Ne}]3s^23p^5$ ہے آرگن (Ar) کے الیکٹران تشکل سے ایک الیکٹران کم ہے۔ کلورین (Cl_2) سالمہ کے بننے کے عمل کو اس طرح سمجھا جاسکتا ہے کہ دو کلورین ایٹم ایک الیکٹران کے جوڑے کا ساجھا کر لیتے ہیں، ہر کلورین ایٹم اس جوڑے کو اپنا ایک الیکٹران دے رہا ہے۔ نتیجے کے طور پر دونوں کلورین ایٹم اپنے نزدیک ترین نوبل گیس (یعنی آرگن) بیرونی شیل آکٹٹ حاصل کر لیتے ہیں۔

یہ کسی حد تک سالمے کے بننے اور اس کی خصوصیات کو سمجھنے میں مدد کرتی ہے۔ لہذا سالمے کا لیوکس ڈاٹ ساخت لکھنا بہت فائدے مند ہوتا ہے۔ مندرجہ ذیل اقدامات کی مدد سے لیوکس ڈاٹ ساخت لکھی جاسکتی ہیں۔

- ساخت لکھنے کے لیے درکار الیکٹرانوں کی کل تعداد کو اتحادی ایٹموں کے گرتی الیکٹرانوں کو جمع کر کے حاصل کیا جاتا ہے۔ مثال کے طور پر CH_4 سالمے میں بندش کے لیے 8 گرتی الیکٹران دستیاب ہیں (چار کاربن سے اور 4 ہائڈروجن کے چار ایٹموں سے)۔

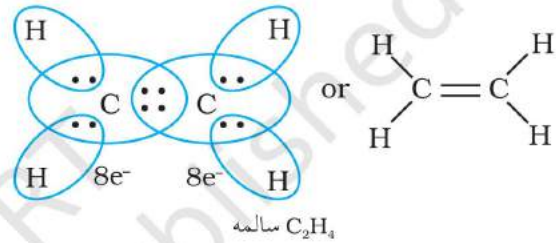
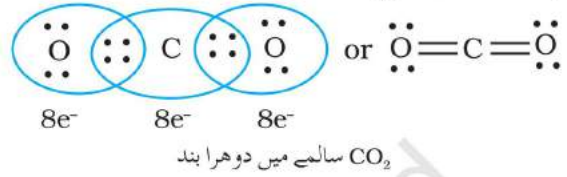
این آئن کے لیے ہر ایک منفی چارج کا مطلب ہے ایک الیکٹران کا داخل ہونا۔ کیٹ آئن کے لیے ہر مثبت چارج کے لیے گرتی الیکٹرانوں کی کل تعداد میں سے ایک الیکٹران گھٹایا جائے گا۔ مثال کے طور پر CO_3^{2-} آئن کے لیے دو منفی چارج کا مطلب ہے تبدیلی ایٹموں کے ذریعے مہیا کیے گئے الیکٹرانوں کے علاوہ دو الیکٹران زائد ہیں۔ NH_3^+ آئن کے لیے ایک مثبت چارج کا مطلب ہے کہ تبدیلی ایٹموں کے گروپ میں سے ایک الیکٹران کم ہو گیا۔

متحد ہونے والے ایٹموں کی کیمیائی علامتیں جانتے ہوئے اور مرکب کے ساختی ڈھانچے کا علم رکھتے ہوئے (جانتے ہوئے یا اندازہ کرتے ہوئے) الیکٹران کی کل تعداد کو ایٹموں کے درمیان کل بند کے تناسب میں مشترک گرتی جوڑوں کو تقسیم کرنا آسان ہو جاتا ہے۔

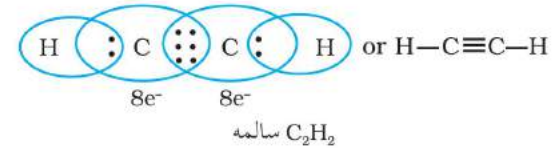
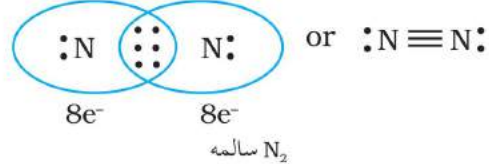
عام طور پر کسی سالمے/آئن میں برقی منفی ایٹم مرکزی مقام پر رہتا ہے۔ مثال کے طور پر CO_3^{2-} اور NF_3 میں نائٹروجن اور کاربن مرکزی ایٹم ہیں جبکہ کلورین اور آکسیجن کا مقام سروں پر ہے۔ اکہرے بند میں مشترک الیکٹران جوڑوں کی تقسیم کے بعد باقی ماندہ الیکٹرانوں کے جوڑے کثیر بندش میں استعمال ہو جاتے ہیں یا تنہا جوڑے (Lone Pair) کی حیثیت سے باقی رہتے ہیں بنیادی ضرورت تو یہ ہے کہ ہر بندشی ایٹم کے پاس آٹھ الیکٹران ہوں۔

جدول 4.1 میں کچھ سالموں/آینوں کے لیوکس نمونے پیش کیے گئے ہیں۔

مشترک ہیں تو ان کے درمیان شریک گرفت بند دوہرا بند (Double Bond) کہلائے گا۔ مثال کے طور پر کاربن ڈائی آکسائیڈ کے سالمے میں ہمارے پاس کاربن اور آکسیجن کے درمیان دوہرے بند ہوتے ہیں۔ اسی طرح آکسیجن کے سالمے میں دو کاربن ایٹم دوہرے بند کے ذریعے بندھے ہوئے ہوتے ہیں۔



جب ساجھا کرنے والے ایٹم تین الیکٹران جوڑوں میں شرکت کرتے ہیں جیسا کہ دو نائٹروجن ایٹم ایک نائٹروجن سالمے میں یا دو کاربن ایٹم ایک استھائین کے سالمے میں تو ایک تہرا بند (Triple Bond) بنتا ہے۔



4.1.3 سادہ سالموں کا لیوکس اظہار (لیوکس ساخت)

[Lewis Representation of Simple Molecules (the Lewis Structures)]

لیوکس ڈاٹ ساخت سالموں اور آئنوں میں مشترک الیکٹران جوڑوں اور آکٹیٹ قاعدے کی اصطلاح میں بندش کی تصویر مہیا کرتے ہیں۔ اگرچہ یہ شکل سالمے کی بندش اور خصوصیات کو مکمل طور پر واضح نہ کر سکتی ہو پھر بھی

جدول 4.1 کچھ سالموں کے لیوکس نمونے

لیوکس اظہار	سائے/آین
H ₂	H : H [*]
O ₂	:Ö::Ö:
O ₃	:Ö::Ö::Ö:
NF ₃	:F::N::F: :F:
CO ₃ ²⁻	[:Ö::C::Ö:] ²⁻ :Ö:
HNO ₃	:Ö::N::Ö:H :Ö:

* ہائڈروجن کاہر ایک ایٹم، ہیلیم کا تشکل اختیار کرتا ہے۔
(الیکٹرانوں کا ڈپلیٹ)

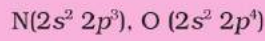


مسئلہ 4.2

نائٹرائٹ آئن کے لیے لیوکس ساخت بنائیے۔

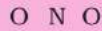
حل

قدم 1: نائٹروجن ایٹم، آکسیجن ایٹم اور مزید ایک منفی چارج کے لیے کل گرفتی الیکٹرانوں کی تعداد شمار کیجیے۔



18 الیکٹران = 5 + (2 × 6) + 1

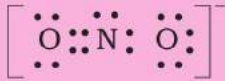
قدم 2: NO₂⁻ کا ساختی ڈھانچہ اس طرح لکھا جائے گا:



قدم 3: نائٹروجن اور ہر ایک آکسیجن کے درمیان اکھرا بند (ایک مشترک الیکٹران جوڑا) بنائیے کہ آکسیجن ایٹم کا آکٹیت مکمل ہو جائے۔ یہ پھر بھی نائٹروجن کے آکٹیت کو مکمل نہیں کرے گا اگر باقی دو الیکٹران اس پر تنہا جوڑے کی شکل میں ہوں گے۔



لہذا ہمیں نائٹروجن اور ایک آکسیجن کے درمیان کثیر بندش بنانی ہوگی (یہاں دوہری بندش) اس طرح مندرجہ ذیل لیوکس ڈاٹ ساخت حاصل ہوگی۔



or



4.1.4 فارمل چارج (Formal Charge)

لیوکس ڈاٹ ساخت عام طور پر سالموں کی اصل شکل کو ظاہر نہیں کرتے۔ کثیر ایٹمی آئنوں میں چارج گُل آئن پر ہوتا ہے نہ کہ کسی ایک ایٹم پر۔ لہذا یہ ممکن ہے کہ ہر ایک ایٹم کو ایک فارمل چارج دیا جائے۔ ایک کثیر ایٹمی سالمے یا آئن میں کسی ایٹم کا فارمل چارج تنہا یا آزاد حالت میں اس ایٹم

مسئلہ 4.1

CO کے لیے لیوکس ڈاٹ ساخت لکھیے

حل

قدم 1: کاربن اور آکسیجن ایٹموں کے کل گرفتی الیکٹرانوں کی تعداد معلوم کیجیے۔ کاربن اور آکسیجن کے باہری (گرفتگی) خول تشکل بالترتیب اس طرح ہیں 2s² 2p² اور 2s² 2p⁴۔ دستیاب گرفتگی الیکٹران ہیں 4 + 6 = 10

قدم 2: CO کا ساختی ڈھانچہ اس طرح لکھا جائے گا: C O

قدم 3: C اور O کے درمیان اکھری بندش (ایک مشترک الیکٹرانوں کا جوڑا) بنائیے اور O پر آکٹیت مکمل کیجیے۔ باقی ماندہ دو الیکٹران C پر تنہا جوڑا ہے۔



یہ کاربن کے آکٹیت کو مکمل نہیں کرتی لہذا ہمیں C اور O کے درمیان کثیر بندش کی ضرورت ہوتی ہے (اس معاملے میں ایک تہری بندش) یہ دونوں ایٹموں کے لیے آکٹیت قاعدے کے اصول کو پورا کرتا ہے۔

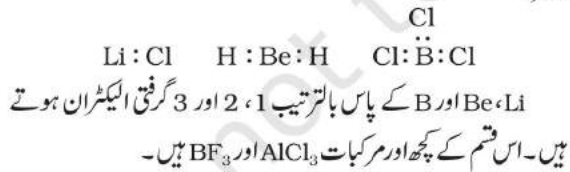
ہمیں یہ سمجھنا چاہیے کہ فارمل چارج سالے کے اندر چارج کی علیحدگی کو ظاہر نہیں کرتے۔ لیوکس ساخت میں چارج ظاہر کرنے سے صرف سالے کے اندر ویلنس الیکٹرانوں کا مقام معلوم کرنے میں مدد ملتی ہے۔ فارمل چارج کسی نوع کی ممکنہ مختلف لیوکس ساختوں میں سے سب سے کم توانائی والی ساخت کو چننے میں مدد کرتا ہے۔ عام طور پر سب سے کم توانائی والی ساخت وہ ہوتی ہے جس میں ایٹم کے اوپر سب سے چھوٹے (کم) فارمل چارج ہوں۔ فارمل چارج ایک ایسا عامل ہے جس کی بنیاد بندش کے خالص تصور پر ہوتی ہے جہاں الیکٹران کے جوڑے کا اشتراک آس پاس کے ایٹموں کے مابین مساوی طور پر ہوتا ہے۔

4.1.5 آکٹیٹ قاعدے کی حدود (Limitation of the Octet Rule)

آکٹیٹ قاعدہ اگرچہ مفید ہے پھر بھی آفاقی نہیں ہے۔ زیادہ تر نامیاتی مرکبات کی ساختیں سمجھنے میں یہ کافی مفید ہے اور یہ زیادہ تر دوری جدول کے دوسرے دور کے لیے خاص طور پر استعمال ہوتا ہے۔ آکٹیٹ کلیہ تین قسم کے استثنیٰ ہیں۔

مرکزی ایٹم کا نا مکمل آکٹیٹ (The incomplete octet of the central atom)

کچھ مرکبات میں مرکزی ایٹم کے گرد الیکٹرانوں کی تعداد آٹھ سے کم ہوتی ہے۔ یہ خاص طور پر ان عناصر کے ساتھ ہوتا ہے جن میں ویلنس الیکٹران کی تعداد چار سے کم ہوتی ہے۔ مثال کے طور پر BeH_2 ، LiCl اور BCl_3 وغیرہ۔



طاق الیکٹران سالمے (Odd-electron Molecules)

وہ سالے جن میں الیکٹران کی تعداد طاق ہوتی ہے جیسا کہ نائٹروکس NO اور نائٹروجن ڈائی آکسائیڈ NO_2 میں آکٹیٹ قاعدہ تمام ایٹموں کے لیے اطمینان بخش نہیں ہے۔



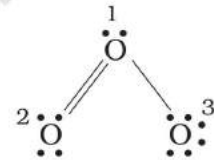
کے گرتی الیکٹرانوں اور لیوکس ساخت میں اس کو دیے گئے الیکٹرانوں کے فرق کے برابر ہوتا ہے۔ اسے اس طرح ظاہر کرتے ہیں:

$$= \frac{\text{لیوکس ساخت میں کسی ایٹم پر فارمل چارج}}{\text{فارمل چارج}}$$

$$\left[\begin{array}{c} \text{آزاد ایٹم پر گرتی الیکٹرانوں کی کل تعداد} \\ \text{غیر بندشی (تنہا جوڑے) کے الیکٹرانوں کی کل تعداد} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{بندشی الیکٹرانوں (مشترک) کی کل تعداد} \end{array} \right] - (1/2)$$

یہ شمار اس مفروضے پر کیا جاتا ہے کہ سالے میں ایٹم ہر ایک مشترک جوڑے میں سے ایک الیکٹران اور تنہا جوڑے کے دونوں الیکٹرانوں کا مالک ہے۔

آئیے اوزون سالے کو دیکھتے ہیں۔ O_3 کی لیوکس ساخت اس طرح لکھی جاسکتی ہے۔



ایٹموں کو 1، 2 اور 3 عدد دیے گئے ہیں۔

• درمیانی O ایٹم کو 1 عدد دیا گیا ہے

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

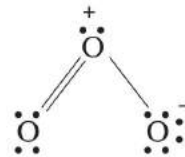
• سرے پر O جسے 2 نشان دیا گیا ہے

$$= 6 - 4 - \frac{1}{2}(4) = 0$$

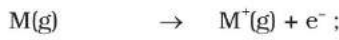
• سرے پر O جسے 3 نشان دیا گیا ہے

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

لہذا ہم O_3 کو اس کے فارمل چارج کے ساتھ اس طرح ظاہر کرتے ہیں:



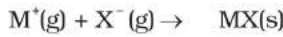
- تعدیل ایٹموں سے ان کے مثبت اور منفی آئن بننے میں آسانی؛
 - ٹھوس میں مثبت اور منفی آئن کی ترتیب، یعنی قلمی مرکبات کی لیس (Lattice)۔
- مثبت آئن کے بننے میں آئیونائزیشن شامل ہوتا ہے یعنی ایک تعدیلی ایٹم سے الیکٹران کا خارج ہونا اور منفی آئن کے لیے تعدیلی ایٹم میں الیکٹران کا شامل ہونا۔



آئیونائزیشن انتھالپی



الیکٹران گین انتھالپی



الیکٹران گین انتھالپی، $\Delta_{eg}H$ انتھالپی کی وہ تبدیلی (کائی 3) ہوتی ہے کہ جب گیلی حالت میں ایٹم اپنی گراؤنڈ اسٹیٹ میں ایک الیکٹران حاصل کرتا ہے۔ الیکٹران گین کا عمل حرارت زا (Exothermic) ہوسکتا ہے۔ آئیونائزیشن، دوسری طرف، صرف حرارت خور (Endothermic) ہوتا ہے۔ الیکٹران الیفینٹی الیکٹران گین کے ساتھ شامل منفی توانائی تبدیل ہوتی ہے۔

”ظاہر ہے کہ آئیونائزیشن ان عناصر میں زیادہ آسانی سے ہوگی جن کی آئیونائزیشن انتھالپی نسبتاً کم ہوگی اور وہ عناصر جن کی الیکٹران گین انتھالپی کی منفی قدر نسبتاً زیادہ ہوگی۔“

زیادہ تر آئیونائزیشن میں مثبت آئن دھاتی عناصر سے اور منفی آئن غیر دھاتی عناصر سے حاصل ہوتے ہیں۔ امونیم آئن (دو غیر دھاتی عناصر سے مل کر بنتا ہے) ایک استثنیٰ ہے۔ یہ بہت سے آئیونائزیشن مرکبات کے کیٹ آئن بناتا ہے۔

قلمی حالت میں آئیونائزیشن مرکبات میں کیٹ آئن اور این آئن آپس میں کولمبی باہمی عمل توانائیوں (Coulombic Interaction Energies) کے ذریعہ جو کرسہ البعدی ترتیب میں پائے جاتے ہیں۔ یہ مرکبات مختلف قلمی ساختوں میں کرسٹلائز ہوتے ہیں جس کا انحصار آئن کے سائز، پیکنگ کی ترتیب اور دوسرے عوامل پر ہوتا ہے۔ مثال کے طور پر NaCl، سوڈیم کلورائیڈ کا قلمی ڈھانچہ نیچے دکھایا گیا ہے۔

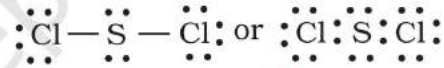
توسیعی آکٹیٹ (The Expanded Octet)

دوری جدول میں تیسرے دور اور اس کے بعد کے عناصر میں 3s- اور 3p- اور 3d اور 4d کے علاوہ بندش کے لیے 3d اور 4d بھی دستیاب ہیں۔ ان عناصر کے بہت سے مرکبات میں مرکزی عنصر کے پاس 8 سے زیادہ گرتی الیکٹران ہوتے ہیں۔ اسے توسیعی آکٹیٹ کہتے ہیں۔ ظاہر ہے کہ ان مثالوں میں آکٹیٹ قاعدہ استعمال نہیں ہوتا۔

ایسے مرکبات کی چند مثالیں H_2SO_4 ، SF_6 ، PF_5 اور بہت سے ہم ربط مرکبات (Coordination Compound) ہیں۔



S کے گرد 12 الیکٹران، S کے گرد 12 الیکٹران، P کے گرد 10 الیکٹران۔ دلچسپ بات یہ ہے کہ، سلفر ایسے بہت سے مرکبات بناتا ہے جن میں آکٹیٹ قاعدہ کا استعمال ہوتا ہے۔ سلفر ڈائی کلورائیڈ میں سلفر کے گرد الیکٹرانوں کا آکٹیٹ ہوتا ہے۔



آکٹیٹ نظریے کی دیگر خامیاں (Other Drawbacks of the Octet Theory)

- یہ واضح ہے کہ آکٹیٹ قاعدہ کی بنیاد نوئل گیسوں کی غیر عاملیت ہے۔ تاہم کچھ نوئل گیسوں (مثلاً زینان اور کرپٹون) بھی آکسیجن اور فلورین کے ساتھ مل کر بہت سے مرکبات جیسے KrF_2 ، XeF_2 اور $XeOF_2$ وغیرہ بناتی ہیں۔
- یہ نظریہ سالے کی ساخت کی وضاحت نہیں کرتا۔
- یہ سالموں کے اضافی استحکام کی وضاحت نہیں کرتا اور سالموں کی توانائی کے بارے میں خاموش ہے۔

4.2 آئیون یا برق گرتی بند

(Ionic or Electrovalent Bond)

آئیون بند بننے کے سلسلے میں کوئل اور یونس ٹریڈنٹ سے یہ معلوم ہوتا ہے کہ بنیادی طور پر آئیون مرکبات بننے کا انحصار مندرجہ ذیل پر ہوگا۔

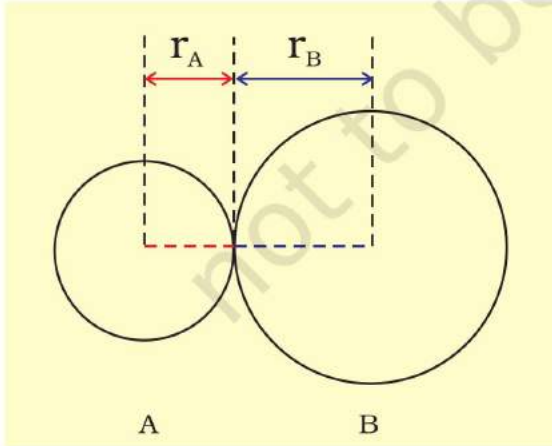
اس عمل میں مخالف چارج والے آئن کے درمیان قوت کشش اور یکساں چارج والے آئنوں کے درمیان دافع قوت شامل ہوتی ہے۔ چونکہ ٹھوس قلم سہ ابعادی ہوتے ہیں اس لیے یہ ممکن نہیں ہوتا کہ لیٹس کی اینتھالپی براہ راست قوت کشش اور دافع قوت کے باہمی عمل سے معلوم کی جاسکے۔ کرٹل جیومیٹری سے تعلق رکھنے والے عوامل کو بھی اس میں شامل کرنا پڑے گا۔

4.3 بندشی پیرامیٹر (Bond Parameters)

4.3.1 بندشی لمبائی (Bond Length)

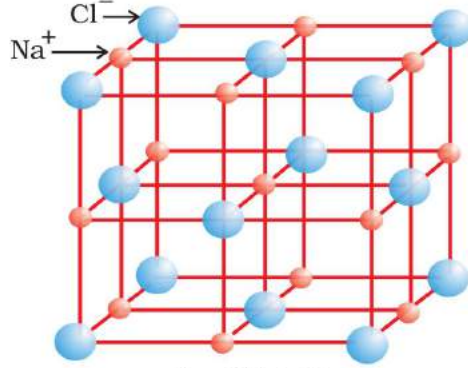
ایک سالے میں بندھے ہوئے دو ایٹموں کے مرکزوں کے درمیان توازن فاصلہ بندشی لمبائی کہلاتا ہے۔ بندشی لمبائی کی پیمائش اسپیکٹرواسکوپ، ایکسرے ڈیفریکشن اور الیکٹران ڈیفریکشن کے طریقوں سے کی جاتی ہے جس کے بارے میں آپ اعلیٰ جماعتوں میں پڑھیں گے۔ بندشی جوڑے کا ہر ایک ایٹم بندشی لمبائی میں شریک ہوتا ہے (شکل 4.1)۔ شریک گرفت بندش میں ہر ایک ایٹم کا تعاون اس ایٹم کا شریک گرفت نصف قطر (Covalent Radius) کہلاتا ہے۔

شریک گرفت نصف قطر کی پیمائش اندازاً ایک ایٹم کے مرکز کا نصف قطر ہوتی ہے جو بندشی حالت میں برابر والے ایٹم کے مرکز کے تعلق میں ہوتا ہے۔ شریک گرفت نصف قطر ایک ہی سالے میں شریک گرفت بندسے بندھے ہوئے دو یکساں ایٹموں کے درمیانی فاصلے کا نصف حصہ ہوتا ہے۔



شکل 4.1 شریک گرفت سالمے AB میں بندشی لمبائی

$$R = r_A + r_B \quad (R \text{ بندشی لمبائی ہے اور } r_A \text{ اور } r_B \text{ ایٹم A اور B کے شریک بندش نصف قطر ہیں})$$



چٹانی نمک کی ساخت

آینی ٹھوس میں الیکٹران گین اینتھالپی اور آئیونائزیشن اینتھالپی کی گل مقدار مثبت ہو سکتی ہے لیکن قلمی ساخت کرٹل لیٹس بننے کے دوران خارج ہونے والی توانائی کی وجہ سے ہی مستحکم ہوتا ہے۔ مثال کے طور پر $\text{Na(g)} \rightarrow \text{Na}^+(\text{g})$ بننے کے دوران آئیونائزیشن اینتھالپی $495.8 \text{ kJ mol}^{-1}$ ہوتی ہے؛ جبکہ $\text{Cl(g)} + e^- \rightarrow \text{Cl}^-(\text{g})$ تبدیلی کے لیے الیکٹران گین اینتھالپی صرف $-348.7 \text{ kJ mol}^{-1}$ ہی ہے۔ دونوں کی گل توانائی NaCl(s) کی لیٹس تشکیل کی اینتھالپی -788 kJ mol^{-1} سے کہیں زیادہ ہے۔ لہذا اس عمل میں خارج ہونے والی توانائی جذب ہونے والی توانائی سے زیادہ ہے۔ لہذا ایک آینی مرکب لیٹس استحکام کے لیے کیفیتی پیمائش اس کی لیٹس تشکیل کی اینتھالپی کے ذریعہ فراہم کیے جاتے ہیں نہ کہ صرف کسی حالت میں آینی انواع کے گرد الیکٹرانوں کے آکلیٹ حاصل کر کے۔

چونکہ لیٹس اینتھالپی آینی مرکبات کی تشکیل میں اہم کردار ادا کرتی ہے، یہ ضروری ہے کہ ہم اس کے بارے میں مزید معلومات حاصل کریں۔

4.2.1 لیٹس اینتھالپی (Lattice Enthalpy)

کسی آینی ٹھوس کی لیٹس اینتھالپی کی تعریف اس توانائی کی شکل میں کی جاتی ہے جو ایک مول ٹھوس آینی مرکب کو اس کے گسی آئنوں میں مکمل طور پر علیحدہ کرنے کے لیے درکار ہوتی ہے۔ مثال کے طور پر NaCl کی لیٹس اینتھالپی 788 kJ mol^{-1} ہے۔ اس کا مطلب ہے کہ ایک مول ٹھوس NaCl کو ایک مول $\text{Na}^+(\text{g})$ اور ایک مول $\text{Cl}^-(\text{g})$ کو لاتنا ہی فاصلے تک علیحدہ کرنے کے لیے 788 kJ توانائی کی ضرورت ہوتی ہے۔

جدول 4.2 کچھ اکھرے، دوہرے اور تہرے بند کی اوسط بندشی لمبائیاں

بند کی قسم	شریک بندش لمبائی (pm)
O-H	96
C-H	107
N-O	136
C-O	143
C-N	143
C-C	154
C=O	121
N=O	122
C=C	133
C=N	138
C≡N	116
C≡C	120

جدول 4.3 عام سالموں میں بندشی لمبائیاں

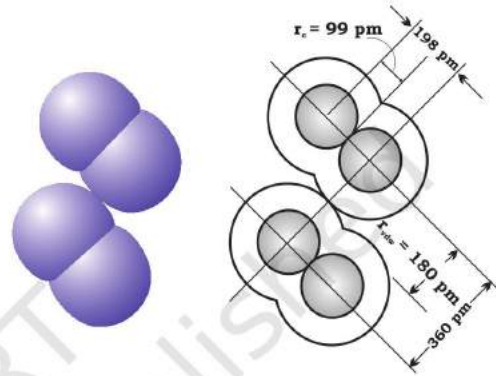
سالمہ	بندشی لمبائی (pm)
H ₂ (H - H)	74
F ₂ (F - F)	144
Cl ₂ (Cl - Cl)	199
Br ₂ (Br - Br)	228
I ₂ (I - I)	267
N ₂ (N ≡ N)	109
O ₂ (O ≡ O)	121
HF (H - F)	92
HCl (H - Cl)	127
HBr (H - Br)	141
HI (H - I)	160

جدول 4.4 شریک بندش نصف قطر (pm) r_{cov}

H	37				
C	77(1)	N	74 (1)	O	66(1)
				F	64
	67 (2)		65(2)		57 (2)
				Cl	99
	60(3)		55(3)		
		P	110	S	104(1)
				Br	114
					95(2)
		As	121	Se	104
				I	133
		Sb	141	Te	137

* قیمتیں اکھرے بند کے لیے دی گئی ہیں، سوائے ان کے جہاں قوسین میں قیمت دی گئی ہے۔ (دوری رجحان کے لیے اکائی 3 بھی دیکھتے)

ون ڈر والز نصف قطر ایٹم کے پورے سائز کو ظاہر کرتا ہے جس میں غیر بندشی حالت میں ان کا گرتی خول شامل ہوتا ہے۔ مزید، ون ڈر والز نصف قطر اس فاصلے کا آدھا حصہ ہوتا ہے جو ایک ٹھوس کے علیحدہ سالموں میں یکساں ایٹموں کے درمیان ہوتا ہے۔ شکل 4.2 میں کلورین کے شریک گرفت اور ون ڈر والز نصف قطر دکھائے گئے ہیں۔

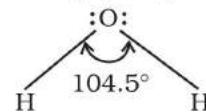


شکل 4.2 کلورین سالمے میں شریک گرفت اور ون ڈر والز نصف قطر اندرونی دائرے کلورین ایٹم کے سائز کے مطابق ہیں r_{vdw} اور r_c بالترتیب ونڈروالز اور شریک گرفت نصف قطر ہیں)

جدول 4.2 میں کچھ عام اکھرے، دوہرے اور تہرے بند کی اوسط بندشی لمبائیاں دکھائی گئی ہیں۔ کچھ عام سالموں کی بندشی لمبائیاں جدول 4.3 میں دکھائی گئی ہیں۔ جدول 4.4 میں کچھ عام عناصر کے شریک گرفت نصف قطر دکھائے گئے ہیں۔

4.3.2 بندشی زاویہ (Bond Angle)

اس کی تعریف اس زاویہ کی طرح کی جاتی ہے جو کسی سالمے/پچیدہ آئن کے مرکزی ایٹم اور بندشی الیکٹران کا جوڑا رکھنے والے اربٹل کے درمیان ہوتا ہے۔ بندشی زاویے کو ڈگری میں ظاہر کرتے ہیں جو اسپیکٹر واسکوپک طریقوں سے تجرباتی طور پر معلوم کیے جاسکتے ہیں۔ یہ ہمیں کسی سالمے/پچیدہ آئن میں مرکزی ایٹم کے گرد اربٹل کی تقسیم کا اندازہ فراہم کرتے ہیں جس کی مدد سے ہمیں اس کی ساخت کا تعین کرنے میں مدد ملتی ہے۔ مثال کے طور پر پانی میں H-O-H میں بندشی زاویہ کو مندرجہ ذیل طریقہ سے ظاہر کیا جاتا ہے۔



$$\text{اوسط بانڈ اینتھالپی} = \frac{502 + 427}{2} = 465.5 \text{ kJ mol}^{-1}$$

4.3.4 بانڈ آرڈر (Bond Order)

شریک گرفت بند کے لیوئس کے بیان میں بانڈ آرڈر ایک سالمہ میں دو ایٹموں کے درمیان بند کی تعداد کی شکل میں دیا جاتا ہے۔ مثال کے طور پر H_2 (جس میں مشترک الیکٹران جوڑا ایک ہے)، O_2 (جس میں مشترک الیکٹران جوڑے دو ہیں) اور N_2 (جس میں مشترک الیکٹران جوڑے تین ہیں) بانڈ آرڈر بالترتیب 1، 2 اور 3 ہوگا۔ اسی طرح CO میں (C اور O کے درمیان مشترک الیکٹران کے تین جوڑے) میں بانڈ آرڈر 3 ہوگا۔ N_2 کے لیے بانڈ آرڈر 3 ہوگا اور اس کی $\Delta_a H^\circ$ 946 kJ mol^{-1} ہے جو ایک دواہٹی سالمہ کے لیے سب سے زیادہ ہوتی ہے۔ آئسو الیکٹرنی سالموں اور آئین میں بانڈ آرڈر مماثل ہوتے ہیں۔ مثال کے طور پر F_2 اور O_2^{2-} کے بانڈ آرڈر 1 ہیں اور NO^+ ، CO ، N_2 اور F_2 کے بانڈ آرڈر 3 ہوتے ہیں۔

”سالموں کے استحکام کو سمجھنے کے لیے ایک عام ربط یہ ہے کہ: بانڈ آرڈر بڑھنے کے ساتھ بندش اینتھالپی بڑھتی ہے اور بندش لمبائی گھٹتی ہے۔“

4.3.5 گمک ساختیں (Resonance Structures)

کبھی کبھی یہ دیکھا گیا ہے کہ واحد لیوئس ساخت کسی سالمے کے اظہار میں اس کے تجرباتی طور پر متعین کیے گئے پیرامیٹر سے مطابقت رکھنے میں ناکافی ہوتی ہے۔ مثال کے طور پر، اوزون، O_3 سالمے کو ساخت I اور ساخت II دونوں طرح سے ظاہر کیا جاسکتا ہے۔

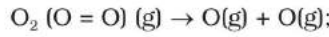
دونوں ساختوں میں ایک O - O اکہرا بند اور ایک O = O دوہرا بند ہے۔ عام طور پر O-O اور O=O بندش لمبائیاں بالترتیب 148 pm اور 121 pm ہوتی ہیں۔ تجرباتی طور پر معلوم کی گئی O - O بندش لمبائیاں O_3 میں برابر ہوتی ہیں (128 pm)۔ لہذا O_3 سالمے میں O-O بند اکہرے اور دوہرے بند کے درمیان ہوتے ہیں۔ ظاہر ہے کہ انہیں مندرجہ بالا دونوں لیوئس ساختوں میں سے کسی کے ذریعہ نہیں دکھایا جاسکتا۔

4.3.3 بانڈ اینتھالپی (Bond Enthalpy)

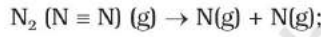
اس کی تعریف اس توانائی کی مقدار کی شکل میں کی جاتی ہے جو کسی حالت میں دو ایٹموں کے درمیان ایک مخصوص قسم کے 1 مول کو توڑنے میں خرچ ہوتی ہے۔ بانڈ اینتھالپی کی اکائی kJ mol^{-1} ہوتی ہے۔ مثال کے طور پر بانڈ روجن سالمے میں H-H بانڈ اینتھالپی $435.8 \text{ kJ mol}^{-1}$ ہوتی ہے۔



اسی طرح ان سالموں میں جن میں کثیر بند ہوتے ہیں مثلاً O_2 اور N_2 ، میں بانڈ اینتھالپی اس طرح ہوگی:

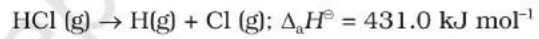


$$\Delta_a H^\circ = 498 \text{ kJ mol}^{-1}$$

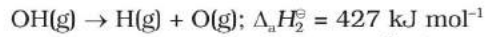
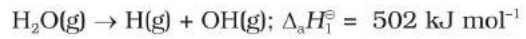


$$\Delta_a H^\circ = 946.0 \text{ kJ mol}^{-1}$$

یہ بات اہم ہے کہ بندشی افتراق اینتھالپی (Bond Dissociation Anthalpy) جتنی زیادہ ہوگی، اتنا ہی مضبوط بند سالمے میں ہوگا۔ ایک ہیٹرو نیوکلیر ڈائی اٹامک مالیکیول (Heteronuclear Diatomic Molecule) جیسے HCl کے لیے



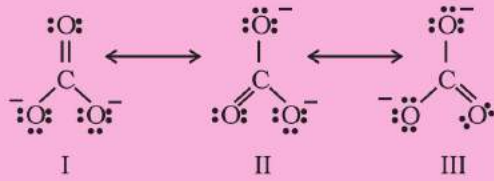
کثیر ایٹمی سالموں میں بندش توانائی کی پیمائش زیادہ پیچیدہ ہوتی ہے۔ مثال کے طور پر H_2O سالمے میں دو O - H بند کو توڑنے میں یکساں توانائی کی ضرورت نہیں ہوتی۔



$\Delta_a H_2^\circ$ کی قیمتوں کا فرق بتاتا ہے کہ دوسرے O - H بند میں کیمیائی ماحول تبدیل ہونے کی وجہ سے کچھ تبدیلی آ جاتی ہے۔ یہی وجہ ہے کہ مختلف سالموں جیسے $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ (Ethanol) اور پانی کے سالموں میں یکساں O - H بند کے لیے توانائی میں فرق پایا جاتا ہے۔ لہذا کثیر

ایٹمی سالموں میں اوسط بانڈ اینتھالپی (Average Bond Enthalpy) کی اصطلاح استعمال کی جاتی ہے۔ اسے حاصل کرنے کے لیے کل بندشی افتراق اینتھالپی کی اصطلاح استعمال کی جاتی ہے۔ اسے حاصل کرنے کے لیے کل بندشی افتراق اینتھالپی کو ٹوٹنے والے بند کی تعداد سے تقسیم کر دیتے ہیں۔ جیسا کہ پانی کے سالمے کے لیے مندرجہ ذیل طریقہ میں سمجھایا گیا ہے۔

کو مستند اشکال I، II اور III کے گمک مخلوط کی شکل میں مندرجہ ذیل طریقے سے ظاہر کیا جاسکتا ہے۔



شکل 4.4 CO_3^{2-} میں گمک I، II اور III تین مستند اشکال دکھاتے ہیں۔

مسئلہ 4.4

CO_2 سالمے کی ساخت کی وضاحت کیجیے۔

حل

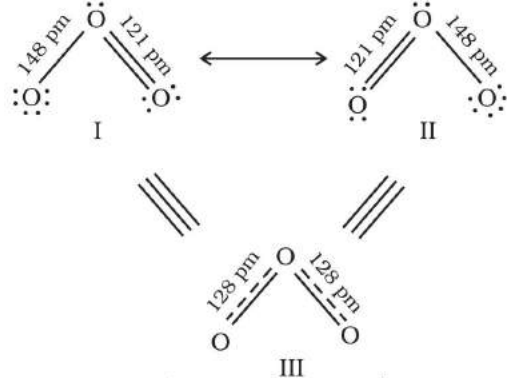
CO_2 میں کاربن اور آکسیجن کے درمیان بندشی لمبائی تجرباتی طور پر 115 pm معلوم کی گئی ہے۔ کاربن اور آکسیجن کے درمیان دوہرے بند (C=O) اور کاربن اور آکسیجن کے درمیان تہرے بند (C≡O) کی لمبائی عام طور پر بالترتیب 121 pm اور 110 pm ہوتی ہے۔ CO_2 میں کاربن اور آکسیجن کے درمیان بندشی لمبائی 115 pm، C=O اور C≡O کی قیمتوں کے درمیان ہے۔ ظاہر ہے کہ ایک واحد لیونکس ساخت اس صورت حال کو ظاہر نہیں کر سکتا اور یہ لازمی ہو جاتا ہے کہ ایک سے زیادہ لیونکس ساختیں لکھی جائیں اور یہ خیال کیا جائے کہ CO_2 کی ساخت، مستند یا گمک اشکال I، II اور III کے مخلوط کی شکل میں زیادہ صحیح طور پر دکھائی جاسکتی ہے۔



شکل 4.5 CO_2 سالمے میں گمک I، II اور III مستند اشکال دکھاتے ہیں

عمومی طور پر کہا جاسکتا ہے

- گمک سالمے کو مستحکم کر دیتا ہے کیونکہ گمک مخلوط کی توانائی کسی بھی ایک مستند ساخت سے کم ہوتی ہے؛ اور



شکل 4.3 O_3 سالمے میں گمک

(ساخت I اور ساخت II مستند (Cononical) اشکال کا اظہار کرتی ہیں اور ساخت III اس کی گمک مخلوط ہے)

O_3 جیسے سالموں کی صحیح ساخت کے اظہار میں آنے والی دشواریوں سے نمٹنے کے لیے ہی گمک کا تصور پیش کیا گیا ہے ”گمک کے تصور کے مطابق جب کبھی بھی کوئی ایک لیونکس ساخت کسی سالمے کی ساخت کو صحیح طور پر ظاہر نہیں کر سکے گی تو بہت سی ساختیں جو توانائی، مرکزوں کے مقام، الیکٹرانوں کے بندشی اور غیر بندشی جوڑے میں یکساں ہوں گی تو انہیں مخلوط کی مستند ساختوں کے طور پر لیا جائے گا جو سالمے کی ساخت کو بالکل صحیح طور پر ظاہر کریں گی۔“ لہذا O_3 کے لیے مندرجہ بالا دو ساختیں مستند یا گمک ساختیں بناتی ہیں اور ان کا مخلوط یعنی ساخت III O_3 کی ساخت کو زیادہ صحیح طور پر ظاہر کرتی ہے۔ اس کو ”گمک مخلوط“ (Resonance Hybrid) بھی کہتے ہیں۔ گمک کو دوسروں والے تیر سے ظاہر کرتے ہیں۔ کاربونیٹ آئن اور کاربن ڈائی آکسائیڈ کے سالمے گمک ساختوں کی کچھ اور مثالیں ہیں۔

مسئلہ 4.3

گمک کی اصطلاح میں CO_3^{2-} آئن کی وضاحت کیجیے۔

حل

کاربن اور آکسیجن کے درمیان دو اکہرے بند اور ایک دوہرے بند پر منحصر واحد لیونکس ساخت سالمے کو ظاہر کرنے کے لیے ناکافی ہے کیونکہ وہ غیر مساوی بندش کو ظاہر کرتا ہے۔ تجربات کی بنیاد پر نتائج کے مطابق CO_3^{2-} کے تمام بند مساوی ہیں۔ لہذا کاربونیٹ آئن

چارچ (Q) × علیحدگی کا فاصلہ (r) = ڈائپول مومنٹ (u) سے ظاہر کرتے ہیں۔
کنورژن فیکٹر مندرجہ ذیل ہے:

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

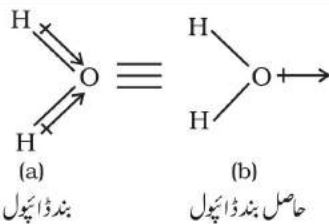
جہاں C کولمب اور m میٹر ہے۔

مزید یہ کہ ڈائپول مومنٹ ایک ویکٹر ہے اور اسے ایک چھوٹے سے تیر کے ذریعہ ظاہر کرتے ہیں جس کی ڈم منفی مرکز کی طرف اور سر مثبت مرکز کی طرف ہوتا ہے۔ لیکن کیمیا میں ڈائپول مومنٹ کی موجودگی کو صلیبی تیر (+) کے ذریعہ ظاہر کیا جاتا ہے جو سالے کی لیوکس ساخت کے اوپر ہوتا ہے۔ اس کا صلیب مثبت جانب جب کہ سر منفی جانب ہوتا ہے۔ مثال کے طور پر HF کے ڈائپول مومنٹ کو اس طرح ظاہر کرتے ہیں:



یہ تیر سالے میں الیکٹران کی کثافت میں تبدیلی کی سمت کو ظاہر کرتا ہے۔ نوٹ کیجیے کہ صلیبی تیر کی سمت ڈائپول مومنٹ کی روایتی سمت کے مخالف ہے۔ کثیر ایٹمی سالموں میں ڈائپول مومنٹ نہ صرف بندشوں کے منفرد ڈائپول مومنٹ، جس کو بانڈ ڈائپول (Bond Dipole) بھی کہتے ہیں، پر منحصر ہوتا ہے بلکہ سالے میں مختلف بندشوں کے مکانی تنظیم پر بھی منحصر ہوتا ہے۔ ایسی حالت میں سالے کے ڈائپول مومنٹ مختلف بند کے ڈائپول مومنٹ کا ویکٹر حاصل جمع ہوتا ہے۔ مثال کے طور پر H_2O کا سالہ جس کی ساخت نمیدہ ہوتی ہے O-H کے دو بندوں کے درمیان 104.5° کا زاویہ ہوتا ہے۔ 10^{-3} Cm دو OH بند کے ڈائپول مومنٹ کا حاصل ہوتا ہے۔

پینٹر ڈبائی، ڈچ کیمیادان جسے 1936 میں ایکسرس ڈیفریکشن اور ڈائی پول مومنٹ میں اپنے کام پر نوبل انعام ملا تھا۔ ان کے اعزاز میں ڈائپول مومنٹ کی مقدار ڈبائی اکائی میں ظاہر کی جاتی ہے۔



• گمک بندش کی خصوصیات بحیثیت کل اوسط کر دیتا ہے۔

لہذا O_3 مخلوط گمک کی توانائی اس کی دو مستند اشکال I اور II (شکل 4.3) سے کم ہوتی ہے۔

گمک سے متعلق کچھ غلط فہمیاں ہیں جن کو دور کرنا لازمی ہے۔ آپ کو یاد رکھنا چاہیے کہ:

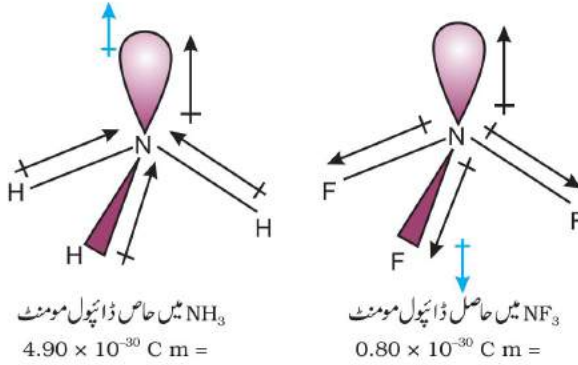
- مستند اشکال کی کوئی حقیقت نہیں ہوتی۔
- کوئی سالہ ایک لمحہ کے لیے ایک مستند شکل اور دوسرے لمحے میں دوسری مستند شکل میں نہیں پایا جاتا۔
- مستند اشکال کے درمیان ایسا کوئی توازن نہیں ہوتا جیسے کہ ٹوٹو میرزم میں ٹوٹو میرک (کینو اور اینول) شکلوں میں دیکھتے ہیں۔
- سالے کی ایک ہی ساخت ہوتی ہے جو مستند اشکال کی گمک مخلوط ہوتی ہے اور جسے ایک لیوکس ساخت سے ظاہر نہیں کیا جاسکتا۔

4.3.6 بند کی قطبیت (Polarity of Bonds)

سو فیصد آئینی یا شریک گرفت بندش کا وجود ایک مثالی صورت حال ہے۔ حقیقت میں کوئی بھی بندش پوری طرح سے آئینی یا شریک بندش نہیں ہوتی۔ یہاں تک کہ ہائڈروجن کے دو ایٹموں کے درمیان شریک گرفت بندش میں کچھ آئینی خصوصیت بھی ہوتی ہے۔

جب دو یکساں ایٹموں مثال کے طور پر H_2 ، O_2 ، Cl_2 یا N_2 کے درمیان شریک گرفت بندش ہوتی ہے۔ تو مشترک الیکٹرانوں کے جوڑے پر دونوں ایٹموں کے ذریعہ برابر کی کشش ہوتی ہے۔ نتیجہ کے طور پر الیکٹران جوڑا مماثل مرکزوں کے عین درمیان ہوتا ہے۔ اس طرح سے بننے والا بند غیر قطبی شریک گرفت بند کہلاتی ہے۔ اس کے برخلاف غیر متجانس مرکزی سالموں (Heteronuclear Molecule) جیسے HF میں دو ایٹموں کے درمیان مشترک الیکٹرانوں کا جوڑا فلورین کی سمت جھک جاتا ہے کیونکہ فلورین کی الیکٹران منفیت ہائڈروجن کے مقابلے میں بہت زیادہ ہوتی ہے (اکائی 3)۔ حاصل شدہ شریک گرفت بند قطبی شریک گرفت بند ہے۔

قطبیت کی وجہ سے سالموں میں ڈائپول مومنٹ (Dipole Moment) ہوتا ہے (جیسا کہ ذیل میں ظاہر کیا گیا ہے) جس کی تعریف اس طرح بیان کی جاسکتی ہے کہ یہ مثبت اور منفی چارج کے مرکز کے درمیان فاصلے اور چارج کی قدر کے حاصل ضرب کے برابر ہوتا ہے۔ اس کو یونانی حرف 'μ' (میو) سے ظاہر کرتے ہیں۔ ریاضیاتی طور پر اسے مندرجہ ذیل طریقے سے ظاہر کرتے ہیں۔



جیسا کہ تمام شریک گرفت بند میں جزوی آئنی خصوصیت ہوتی ہے۔ آئنی بند میں بھی جزوی شریک گرفت خصوصیت ہوتی ہے۔ آئنی بند کی جزوی شریک گرفت خصوصیت کو فاجان نے مندرجہ ذیل اصول کی شکل میں بیان کیا ہے۔

- کیٹ آئن کا سائز جتنا چھوٹا اور این آئن کا سائز جتنا بڑا ہوگا آئنی بند کا شریک گرفتی کردار اتنا ہی زیادہ ہوگا۔

- کیٹ آئن پر جتنا زیادہ چارج ہوگا۔ آئنی بند کی شریک گرفت خصوصیت اتنی ہی زیادہ ہوگی۔

- یکساں سائز اور چارج والے کیٹ آئن میں جس کا الیکٹرانئی شکل عام عبوری دھات کی طرح $d^n ns^0$ ہوگا اس سے وہ زیادہ قطبی ہوگا جس کا الیکٹرانئی شکل نوہل گیس $ns^2 np^6$ خاص قلوبی اور قلوبی ارضی دھاتوں کے دھاتی کیٹ آئن کی طرح ہوگا۔
- کیٹ آئن الیکٹرانئی چارج کو اپنی سمت کھینچ کر این کی تقطیب کرتا ہے اور اس طرح دونوں کے درمیان الیکٹرانئی چارج بڑھ جاتا ہے۔ بالکل یہی شریک گرفت بند میں ہوتا ہے۔ یعنی نیوکلیس کے درمیان الیکٹرانئی چارج کثافت بڑھ جاتی ہے۔ کیٹ آئن کی تقطیب کی صلاحیت، این آئن کی تقطیب کی صلاحیت اور این آئن کے مخ آئن سازی ہونے کی حد وہ عوامل ہیں جو آئنی بند کی فی صد شریک گرفت خصوصیت کا تعین کرتے ہیں۔

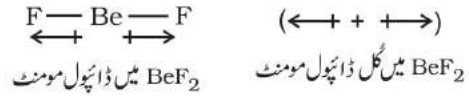
4.4 ویلنس شیل الیکٹران پیئر ریپلوں تھیوری (VSEPR)

جیسا کہ پہلے وضاحت کی جا چکی ہے، لیوکس کا نظریہ سالموں کی ساخت کی وضاحت کرنے میں ناکام رہا ہے۔ یہ نظریہ شریک گرفت سالموں کی شکل کی پیشین گوئی کا آسان طریقہ فراہم کرتا ہے۔ سڈوک اور پاول نے

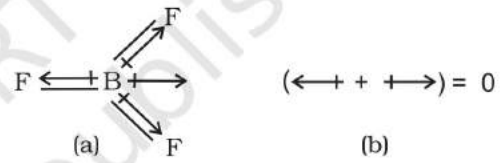
کل ڈائپول مومنٹ $1.85 \text{ D} = \mu$

$$1.85 \times 3.33564 \times 10^{-30} \text{ C m} = 6.17 \times 10^{-30} \text{ C m}$$

BeF₂ میں ڈائپول مومنٹ صفر کے برابر ہوتا ہے۔ یہ اس وجہ سے کہ دو مساوی بند ڈائپول نقطے مخالف سمت میں ہوتے ہیں ایک دوسرے کے اثر کو ختم کر دیتے ہیں۔



ٹیٹرا ایٹمی سالموں جیسے BF₃ میں، ڈائپول مومنٹ صفر ہوتا ہے حالانکہ B - F بند ایک دوسرے سے 120° پر ہوتے ہیں۔ تین بانڈ مومنٹ کا کل مجموعہ صفر ہوتا ہے کیونکہ کوئی بھی دو حاصل کا تیسرے کے مخالف اور مساوی ہوتا ہے۔



BF₃ سالمہ: (a) ڈائپول مومنٹ، (b) کل ڈائپول مومنٹ کو ظاہر کرتے ہوئے

آئیے ہم NH₃ اور NF₃ کے دلچسپ کیس کا مطالعہ کرتے ہیں۔ دونوں سالموں کی شکل پائیرامڈل ہے جس میں نائٹروجن ایٹم کے اوپر ایک الیکٹران کا تنہا جوڑا ہے۔ حالانکہ کلورین، نائٹروجن سے زیادہ الیکٹرونگٹیو ہے NH₃ کا حاصل ڈائپول مومنٹ $4.90 \times 10^{-30} \text{ C m}$ NF₃ سے زیادہ ہے $(0.8 \times 10^{-30} \text{ C m})$ ۔ یہ اس وجہ سے ہے کہ NH₃ میں تنہا جوڑے کی وجہ سے ارٹل ڈائپول اسی سمت میں ہے جس سمت میں N - H بانڈ کا حاصل ڈائپول مومنٹ ہے، جبکہ NF₃ میں ارٹل ڈائپول N - F بانڈ کے حاصل ڈائپول مومنٹ کی مخالف سمت میں ہے۔ تنہا جوڑے کی وجہ سے ڈائپول مومنٹ N - F کے حاصل مومنٹ کے اثر کو زائل کر دیتا ہے جس کی وجہ NF₃ کا ڈائپول مومنٹ کم ہوتا ہے۔ جیسا کہ نیچے دکھایا گیا ہے۔

کچھ سالموں کے ڈائپول مومنٹ جدول 4.5 میں دکھائے گئے ہیں۔

جدول 4.5 کچھ چنندہ سالمات کے ڈائپول مومنٹ

مثال	ڈائپول مومنٹ $\mu(D)$	جیومیٹری	سالمے کی قسم
(AB)			
HF	1.78	خطی (Linear)	
HCl	1.07	خطی (Linear)	
HBr	0.79	خطی (Linear)	
HI	0.38	خطی (Linear)	
H ₂	0	خطی (Linear)	
(AB ₂)			
H ₂ O	1.85	خمیدہ (Bent)	
H ₂ S	0.95	خمیدہ (Bent)	
CO ₂	0	خطی (linear)	
(AB ₃)			
NH ₃	1.47	ثلاثی کونل بائیسپر ایڈل (Trigonal-pyramidal)	
NF ₃	0.23	ثلاثی کونل بائیسپر ایڈل (Trigonal-pyramidal)	
BF ₃	0	ثلاثی کونل پلینر (Trigonal-planar)	
(AB ₄)			
CH ₄	0	ٹیتراہیڈرل (Tetrahedral)	
CHCl ₃	1.04	ٹیتراہیڈرل (Tetrahedral)	
CCl ₄	0	ٹیتراہیڈرل (Tetrahedral)	

- 1940 میں ایٹم کے گرفتہ خول میں الیکٹران جوڑوں کے درمیان دافع باہمی عمل کی بنیاد پر سادہ نظریہ پیش کیا۔ اس کو نیہوم اور گلپسی نے 1957 میں مزید آگے بڑھایا اور دوبارہ تعریف بیان کی۔
 - **VSEPR نظریہ** کے اہم مفروضات مندرجہ ذیل ہیں:
 - سالمے کی شکل کا انحصار مرکزی ایٹم کے گرد گرفتہ خول کے الیکٹران جوڑوں (بندشی یا غیر بندشی) کی تعداد پر ہوتا ہے۔
 - گرفتہ خول میں الیکٹران کے جوڑے ایک دوسرے کو دھکیلتے ہیں کیونکہ ان الیکٹران بادلوں پر منفی چارج ہوتا ہے۔
 - الیکٹرانوں کے یہ جوڑے ایسی مقام حاصل کرنے کی کوشش کرتے ہیں جہاں قوت دافعہ کم سے کم ہو لہذا ان کے درمیان فاصلہ زیادہ سے زیادہ ہوگا۔

VSEPR نظریہ سالموں کی ایک بڑی تعداد خاص طور پر پی-بلاک کے عناصر کی جیومیٹری کی پیشین گوئی کر سکتا ہے۔ یہ اس وقت بھی سالے کی جیومیٹری کو بہت حد تک بالکل صحیح بتانے میں کامیاب ہوتا ہے جب ممکنہ اشکال کے درمیان توانائی کے فرق بہت کم ہوں۔ VSEPR نظریہ کی سالموں کی اشکال پر الیکٹران جوڑوں کے دفاعی عمل سے متعلق اثرات کی نظریاتی بنیاد بہت زیادہ مضبوط نہیں ہے اور یہ شبہات اور بحث کا موزوں بنا ہوا ہے۔

4.5 گرفت بند نظریہ (Valence Bond Theory)

ہم جانتے ہیں کہ لیٹس کا نظریہ سالموں کی ساخت لکھنے میں ہماری مدد کرتا ہے لیکن یہ کیمیائی بند کے بننے کی وجوہات کی وضاحت کرنے میں ناکام ہے۔ یہ H_2 اور F_2 جیسے سالموں میں بند افتراق انتھالپی اور بندشی لمبائی (H_2 کے لیے $435.8 \text{ kJ mol}^{-1}$ ، 74 pm اور F_2 کے لیے $150.6 \text{ kJ mol}^{-1}$ ، 42 pm کے فرق کی وجوہات کی بھی وضاحت نہیں کرتا حالانکہ دونوں میں اپنے اپنے ایٹموں کے درمیان ایک الیکٹران جوڑے کے اشتراک سے تنہا شریک بندش بند بنتا ہے۔ یہ کثیر ایٹمی سالموں کی شکل کے بارے میں بھی کوئی تصور پیش نہیں کرتا۔

اسی طرح VSEPR کا نظریہ سادہ سالموں کی جیومیٹری بتاتا ہے لیکن نظریاتی طور پر یہ ان کی وضاحت نہیں کرتا اور اس کے محدود استعمال ہیں۔ ان حدود کو پار کرنے کے لیے کوآرڈینیٹ میکانیکی اصولوں کی بنیاد پر دو اہم نظریات پیش کیے گئے ہیں۔ یہ ویلنس بانڈ نظریہ اور مولیولیولر آرٹل نظریات ہیں۔

ویلنس بانڈ تھیوری ہیلر اور لنڈن نے 1927 میں پیش کی اور پالنگ اور دیگر سائنسدانوں نے اسے مزید آگے بڑھایا۔ ویلنس بانڈ تھیوری پر بحث عناصر کے الیکٹرانوں کی شکل (اکائی 2)، ایٹمی آرٹل کا اوور لپنگ کرائسٹر یا ایٹمی آرٹل کی ہائبرڈائزیشن تغیر اور انطباق کے اصولوں کے علم پر مبنی ہے۔ ان پہلوؤں کے مطابق ویلنس بانڈ تھیوری پر تفصیلی بحث اس کتاب کے احاطہ سے باہر ہے۔ لہذا آسانی کے لیے ویلنس بانڈ تھیوری پر بحث کیفیت اور غیر ریاضیاتی طرز عمل کی اصطلاح میں ہی کی گئی ہے۔ ابتدا میں آئیے ہائڈروجن سالے کے بننے کے عمل کو دیکھتے ہیں جو تمام سالموں میں سب سے سادہ ہے۔

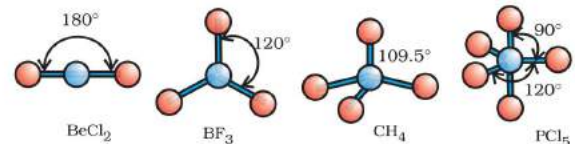
نیوہوم اور گلسی (1957) نے VSEPR ماڈل کو الیکٹرانوں کے تنہا جوڑے اور بندشی جوڑے کے درمیان اہم فرق کو سمجھا کر بہتر بنانے کی کوشش کی۔ الیکٹرانوں کا تنہا جوڑا مرکزی ایٹم پر ہی قائم رہتا ہے جبکہ ہر گرتی جوڑا دو ایٹموں کے درمیان مشترک ہوتا ہے۔ نتیجہ کے طور پر سالے میں تنہا الیکٹرانوں کا جوڑا الیکٹرانوں کے گرتی جوڑے کے مقابلے میں زیادہ جگہ گھیرتا ہے۔ اسی لیے لون پیئر-لون پیئر میں ہٹاؤ زیادہ ہوتا ہے بہ نسبت لون پیئر-بانڈ پیئر اور بانڈ پیئر-بانڈ پیئر کے اسی ہٹاؤ کی وجہ سے سالموں کے بندشی زاویوں میں تبدیلی اور ان کی مثالی شکلوں میں فرق پائے جاتے ہیں۔

VSEPR نظریے کے مطابق سالموں کی جیومیٹریائی اشکال کی پیشین گوئی کے لیے سالموں کو دو جماعتوں میں تقسیم کرنا آسان ہوتا ہے جیسے (i) ایسے سالے جن کے مرکزی ایٹم پر الیکٹرانوں کا تنہا جوڑا نہ ہو اور (ii) ایسے سالے جن کے مرکزی ایٹم پر ایک یا ایک سے زیادہ الیکٹرانوں کے تنہا جوڑے ہوں۔“

جدول 4.6 میں AB قسم کے کچھ سالموں/آینوں کی جیومیٹری اور مرکزی ایٹم A پر (بغیر تنہا الیکٹران کے جوڑے کے) الیکٹران کے جوڑوں کی ترتیب کو دکھایا گیا ہے۔ جدول 4.7 میں کچھ سادہ سالموں اور آینوں کی اشکال کو دکھایا گیا ہے جن میں مرکزی ایٹم پر ایک یا دو لون پیئر ہیں۔

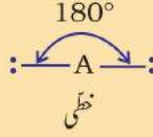
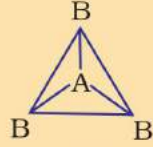
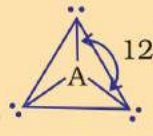
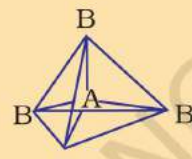
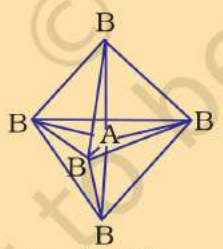
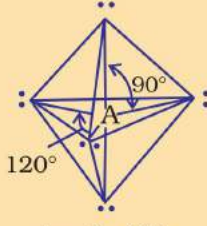
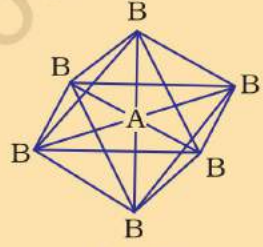
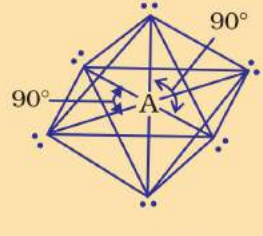
جدول 4.8 ان وجوہات کی وضاحت کرتی ہے جو سالموں کی جیومیٹری منحنی ہونے کے لیے ذمہ دار ہیں۔

جیسا کہ جدول 4.6 میں دکھایا گیا ہے، AB_5 ، AB_4 ، AB_3 ، AB_2 اور AB_6 مرکبات میں مرکزی ایٹم A کے گرد الیکٹران جوڑوں اور B ایٹموں کی ترتیب خطی (Linear)، ٹرائی گونل پلینر ٹریانگلر، ٹرائی گونل بائی پرائمڈل اور آکٹاہیڈرل ہے۔ اس طرح کی ترتیب $(AB_3) BF_3$ اور $(AB_4) PCl_5$ جیسے سالموں میں دیکھنے کو ملتی ہے اور انہیں نیچے گیند اور چھڑ ماڈل کے ذریعہ دکھایا گیا ہے۔

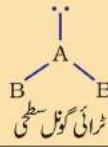
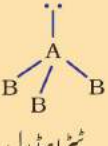
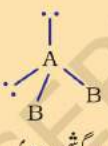
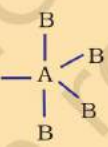
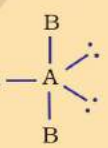
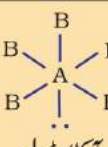
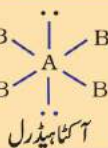


شکل 4.6 ان سالمات کی شکل جن کے مرکزی ایٹم پر تنہا جوڑا نہیں ہے

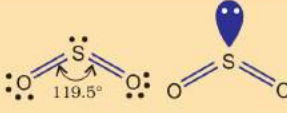
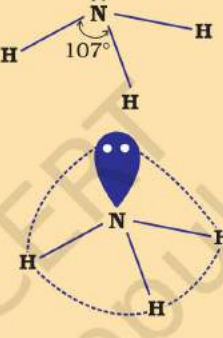
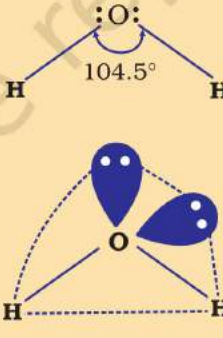
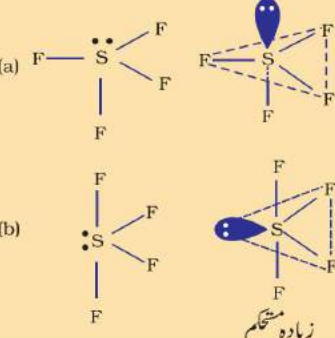
جدول 4.6 ان سالموں کی جیومیٹری جن کے مرکزی ایٹم پر لون پیئر الیکٹران نہیں ہوتے

مثالیں	سالمے کی جیومیٹری	الیکٹران جوڑوں کی ترتیب	الیکٹران جوڑوں کی تعداد
$\text{BeCl}_2, \text{HgCl}_2$	$\text{B}-\text{A}-\text{B}$ خطی	180° 	2
BF_3	 ثلاثی کون پلیر		3
$\text{CH}_4, \text{NH}_4^+$	 ٹیتراہیڈرل		4
PCl_5	 ثلاثی کون پلیر بائی پیرامیڈل		5
SF_6	 آکٹاہیڈرل		6

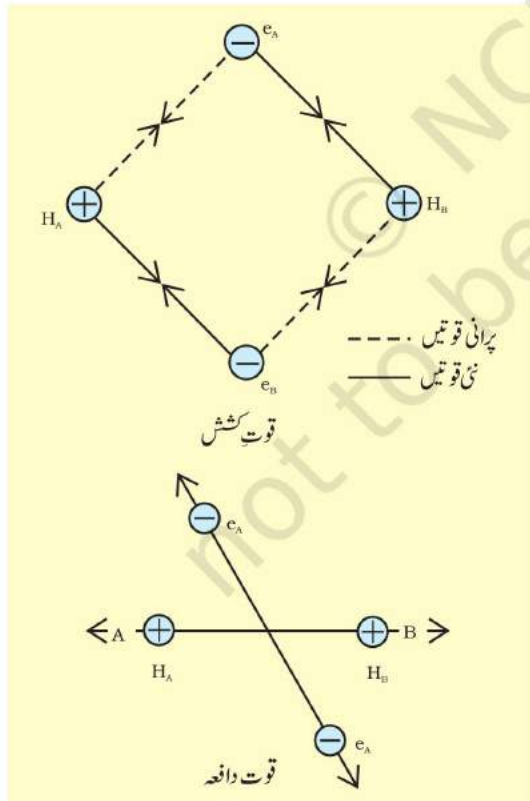
جدول 4.7 کچھ سادہ سالموں/آیوں کی شکل (جیومیٹری) جن کے مرکزی ایٹم پر ایک یا ایک سے زیادہ تنہا الیکٹرانوں کا جوڑا ہے۔

مثال	جیومیٹری	الیکٹران جوڑوں کی ترتیب	تنہا جوڑوں کی تعداد	بندھی جوڑوں کی تعداد	سالموں کی قسم
SO_2, O_3	خمیدہ		1	2	AB_2E
NH_3	ٹرائی گونل پیرامڈل		1	3	AB_3E
H_2O	خمیدہ		2	2	AB_2E_2
SF_4	سی سا		1	4	AB_4E
ClF_3	شکل-T		2	3	AB_3E_2
BrF_5	مربع پیرامڈ		1	5	AB_5E
XeF_4	مربع سطحی		2	4	AB_4E_2

جدول 4.8: بوئنڈ پیئر اور لون پیئر رکھنے والے سالموں کی اشکال

سالمے کی قسم	بندشی جوڑوں کی تعداد	تہا جوڑوں کی تعداد	الیکٹرانوں کی ترتیب	شکل	حاصل شدہ شکل کی وجوہات
AB ₂ E	4	1			نظریاتی طور پر اس کی شکل ٹرائی انگیولر سطحی ہونی چاہیے لیکن اس کی شکل خمیدہ ہے۔ اس کی وجہ یہ ہے کہ اس میں لون پیئر - بوئنڈ پیئر قوت دافعہ زیادہ ہے بہ نسبت بوئنڈ پیئر - بوئنڈ پیئر قوت دافعہ کے۔ لہذا زاویہ 120° سے گھٹ کر 119.5° رہ گیا۔
AB ₃ E	3	1			اگر یہاں lp کی جگہ bp ہوتا تو اس کی شکل ٹیٹراہیڈرل ہوتی لیکن ایک تہا جوڑا موجود ہے لہذا lp - bp قوت دافعہ (جو bp - bp قوت دافعہ سے زیادہ ہے) کی وجہ سے گرفتہ جوڑوں کے درمیان زاویہ 109.5° سے گھٹ کر 107° ہو گیا ہے۔
AB ₂ E ₂	2	2			یہ شکل ٹیٹراہیڈرل ہوتی اگر یہاں چاروں بوئنڈ پیئر (bp) ہوتے لیکن دو لون پیئر (lp) موجود ہیں جس کی وجہ سے شکل مسخ شدہ ٹیٹراہیڈرل یا خمیدہ ہے۔ اس کی وجہ یہ ہے کہ lp - lp قوت دافعہ - bp قوت دافعہ سے زیادہ ہے لہذا زاویہ 109.5° سے گھٹ کر 104.5° رہ گیا۔
AB ₄ E	4	1			(a) میں lp محوری مقام پر موجود ہے لہذا 90° پر تین lp - bp قوت دافعہ ہیں۔ (b) میں lp خط استوائی مقام پر ہے اور دو lp - bp قوت دافعہ ہیں لہذا (b) کی تنظیم زیادہ مستحکم ہے۔ (b) میں ظاہر کی گئی شکل مسخ شدہ ٹیٹراہیڈرل، تہہ دار مربع یا سی سا کہلاتی ہے۔

حاصل شدہ شکل کی وجوہات	شکل	الیکٹرانوں کی ترتیب	تہا جوڑوں کی تعداد	بندش جوڑوں کی تعداد	سالمے کی قسم
(a) میں 1p استوائی مقام پر ہیں لہذا 1p-bp قوت دافعہ کم ہوگی بہ نسبت دوسروں کے جن میں 1p محوری مقام پر ہیں لہذا (a) کی شکل زیادہ مستحکم ہوگی۔ (شکل-T)	شکل-T	(a)	2	3	AB ₃ E ₂
	(b)				
	(c)				



شکل 4.7 H₂ سالمے کی تشکیل کے دوران کشش اور دافع قوتیں

مان لیجیے ہائڈروجن کے دو ایٹم A اور B جن کے مرکز N_A اور N_B ہیں، ایک دوسرے کی سمت آرہے ہیں۔ ان میں موجود الیکٹرانوں کو C_A اور C_B سے دکھایا گیا ہے۔ جب یہ دونوں ایٹم ایک دوسرے سے زیادہ فاصلے پر ہیں تو ان کے درمیان کوئی کشش نہیں ہوتی۔ جیسے جیسے یہ ایک دوسرے کے نزدیک آتے ہیں، نئی قوت کشش اور دافع قوت عمل پیرا ہیں۔ قوت کشش پیدا ہوتی ہے:

(i) ایک ایٹم کے مرکز اور اس کے ہی الیکٹران کے درمیان یعنی -N_A - e_A اور e_B - N_B

(ii) ایک ایٹم کے نیوکلیس اور دوسرے ایٹم کے الیکٹران کے درمیان یعنی N_A - e_B ، N_B - e_A

اسی طرح دافع قوت پیدا ہوگی:

(i) دونوں ایٹموں کے الیکٹرانوں کے درمیان یعنی -e_A - e_B

(ii) دونوں ایٹموں کے نیوکلیس کے درمیان یعنی -N_A - N_B

قوت کشش دونوں ایٹموں کو ایک دوسرے کے نزدیک لانے کی کوشش کرے گی جبکہ قوت دافعہ انہیں ایک دوسرے سے الگ کرنے کی کوشش کرے گی (شکل 4.7)۔

الیکٹرانوں کے جوڑے بنتے ہیں۔ اور لیپ کی مقدار شریک گرفت بند کی توانائی کو طے کرتی ہے۔ عام طور پر جتنی اور لیپنگ ہوگی دو ایٹموں کے درمیان بننے والا بند اتنا ہی مضبوط ہوگا۔ لہذا ارٹل اور لیپ کے تصور کے مطابق دو ایٹموں کے درمیان شریک گرفت بند کی تشکیل بندش خول میں موجود متضاد اسپن والے الیکٹرانوں کے جوڑے بننے کے نتیجے میں ہوتی ہے۔

4.5.2 بندشوں کی سمتی خصوصیات

(Directional Properties of Bonds)

جیسا کہ ہم دیکھ چکے ہیں کہ شریک گرفت بند کی تشکیل ایٹموں کے ارٹل کی اور لیپنگ کے نتیجے میں ہوتی ہے۔ ہائڈروجن کا سالمہ دو H ایٹموں کے 1s ارٹل کی اور لیپنگ کی وجہ سے ہوتا ہے۔

کثیر ایٹمی سالموں جیسے NH_3 ، CH_4 اور H_2O میں بند کی تشکیل کے علاوہ ان کی جیومیٹری بھی اہم ہوتی ہے۔ مثال کے طور پر ایسا کیوں ہے کہ CH_4 سالمہ کی شکل ٹیٹراہیڈرل اور بندش زاویہ 109.5° ہے؟ NH_3 سالمہ کی شکل پیہرامیڈل کیوں ہوتی ہے؟

وینس ہائڈتھیوری H_2O اور NH_3 ، CH_4 جیسے کثیر ایٹمی سالموں میں بند کی شکل، ان کے بننے کے عمل اور سمتی خصوصیات کی وضاحت ایٹمی ارٹل کی اور لیپنگ اور ہائبرڈائزیشن کی اصطلاح میں کرتی ہے۔

4.5.3 ایٹمی ارٹل کی اور لیپنگ

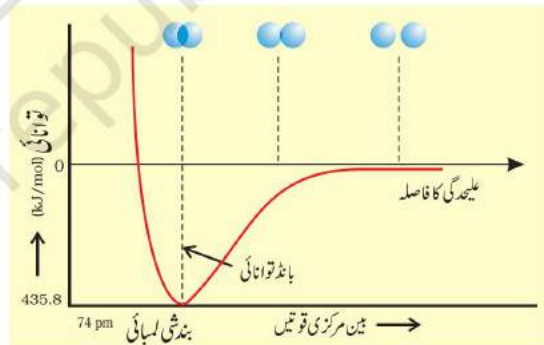
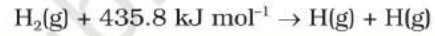
(Overlapping of Atomic Orbitals)

جب ارٹل کے دو ایٹم بند تشکیل دینے کے لیے قریب آتے ہیں تو ان کا یہ اور لیپ مثبت، منفی یا صفر ہو سکتا ہے اس کا انحصار نشان (ہیٹ) اور جگہ میں مداری لہر کے فنکشن کی وسعت اور اس کی تشریق کی سمت پر ہوتا ہے (شکل 4.9) سرحدی سطح ڈائیگرام میں دیے گئے مثبت اور منفی نشانات مداری لہر کا نشان (ہیٹ) ظاہر ہوتے ہیں۔ ان کا چارج سے تعلق نہیں ہوتا ہے۔ بند بنانے کے لیے ارٹل کے نشان (ہیٹ) اور سمت یکساں ہونے چاہئیں۔ اسے مثبت اور لیپ کہتے ہیں۔ s اور p ارٹل کے متعدد دو اور لیپوں کو شکل 4.9 میں ظاہر کیا گیا ہے۔

شریک گرفت بندش کی تشکیل کے خاص عوامل کے طور پر اور لیپ کے معیار کا اطلاق ہومونیوکلیر/ہیٹرونیوکلیر دو ایٹمی سالموں اور کثیر ایٹمی سالموں پر

تجرباتی طور پر یہ پایا گیا ہے کہ نئی قوت کشش کی قدر نئی دافع قوت سے زیادہ ہوتی ہے۔ نتیجہ کے طور پر دونوں ایٹم ایک دوسرے کے نزدیک آتے ہیں اور ان کی مضمر توانائی (Potential Energy) کم ہو جاتی ہے۔ یہاں تک کہ ایک مقام وہ آتا ہے جہاں کل قوت کشش اور دافع قوت میں توازن پیدا ہو جاتا ہے اور نظام کمترین توانائی حاصل کرتا ہے۔ اس مقام پر دونوں ہائڈروجن ایٹم بندھ جاتے ہیں اور ایک مستحکم سالمہ بناتے ہیں جس کی بندش لمبائی 74 pm ہوتی ہے۔

چونکہ توانائی کا اخراج ہوتا ہے جب ہائڈروجن کے دو ایٹموں کے درمیان بند بنتا ہے، لہذا ہائڈروجن کا سالمہ تنہا ہائڈروجن ایٹموں کے مقابلے میں زیادہ مستحکم ہوتا ہے۔ اس میں جو توانائی خارج ہوتی ہے وہ ہائڈروجن کی کھلائی ہوئی شکل 4.8 میں دکھائے گئے معنی کی سب سے نچلی سطح کے مطابق ہے۔ اس کے برعکس ایک مول ہائڈروجن کے سالموں کو جدا کرنے میں $435.8 \text{ kJ mol}^{-1}$ توانائی کی ضرورت ہوتی ہے۔



شکل 4.8 H_2 سالمہ کی تشکیل کا مضمر توانائی منحنی H_2 ایٹموں کے بین مرکزی فاصلوں کے فنکشن کی حیثیت سے۔ خم کا کمترین حصہ H_2 سالمہ کی سب سے زیادہ مستحکم حالت کو ظاہر کرتا ہے۔

4.5.1 ارٹل اور لیپ کا تصور

(Orbital Overlap Concept)

ہائڈروجن سالمے کی تشکیل میں کمترین توانائی کا ایک ایسا مقام ہوتا ہے جہاں ہائڈروجن کے دو ایٹم اتنے نزدیک ہوتے ہیں کہ ان کے ایٹمی ارٹل کے مابین تجوی دخل اندازی ہوتی ہے۔ ایٹمی ارٹل کی یہ تجوی دخل اندازی ایٹمی ارٹل کی اور لیپنگ کہلاتی ہے جس کے نتیجے میں

C-H بند بنتے ہیں۔ تاہم یہ دیکھا جائے گا کہ جبکہ کاربن کے تین p اورٹل ایک دوسرے سے 90° پر ہوتے ہیں ان کے لیے HCH زاویہ بھی 90° ہوگا۔ اس طرح تین C-H بند ایک دوسرے سے 90° پر ہوں گے۔ کاربن کا $2s$ اورٹل اور ہائڈروجن کا $1s$ اورٹل کڑوی متشاکل ہوتے ہیں اور کسی سمت بھی اوورلیپ کر سکتے ہیں۔ لہذا چوتھے C-H بند کی سمت واضح نہیں کی جاسکتی۔ یہ بیان HCH ٹیڑا ہیڈرل زاویہ 109.5° سے مطابقت نہیں رکھتا۔ صاف ظاہر ہے کہ صرف ایٹمی اورٹل کی اوورلیپ CH_4 سالے کے بند کی سمتی خصوصیات کے لیے ذمہ دار نہیں ہو سکتی۔ اسی طریقہ اور بحث کا استعمال کرتے ہوئے دیکھا جاسکتا ہے کہ NH_3 اور H_2O سالموں میں HNH اور HOH بندشی زاویہ 90° کا ہونا چاہیے۔ یہ بیان NH_3 اور H_2O سالموں میں حقیقی بندشی زاویوں 107° اور 104.5° سے مطابقت نہیں رکھتا۔

4.5.4 اوورلیپنگ کی قسمیں اور شریک گرفت بند کی فطرت

(Types of Overlapping and Nature of Covalent Bonds)

اوورلیپنگ کی بنیاد پر شریک گرفت بند دو زمروں میں تقسیم کیے جاسکتے ہیں۔

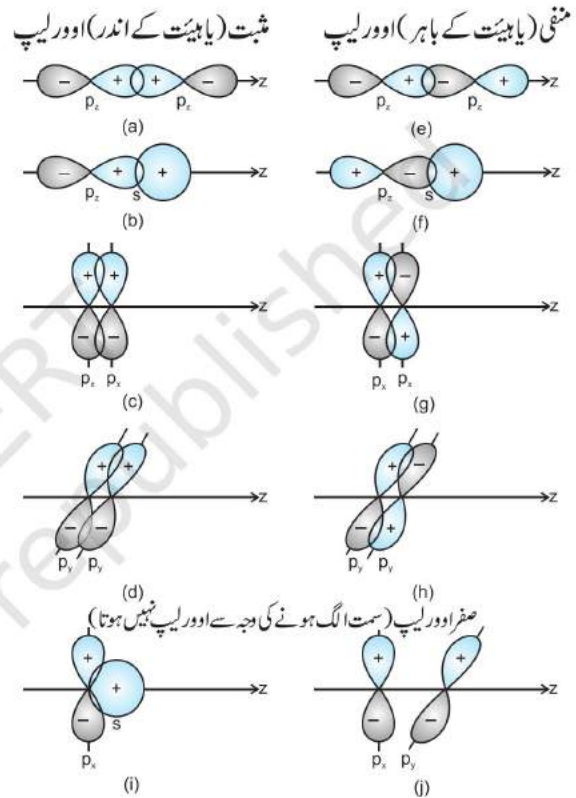
- (i) سگما (σ) بند اور (ii) پائی (π) بند
- (i) سگما (σ) بند: اس قسم کا شریک گرفت بند بندشی اورٹل کے سروں سے سروں کی اوورلیپنگ کے نتیجے میں بنتے ہیں جو بین مرکزی محور کے ساتھ ہوتے ہیں۔ اس کو ہیڈ آن (Head On) یا محوری اوورلیپ بھی کہتے ہیں۔ یہ ایٹمی اورٹل کے مندرجہ ذیل کسی بھی ایک اتحادی عمل سے بن سکتے ہیں۔

- $s-s$ اوورلیپنگ: اس حالت میں دو آدھے بھرے ہوئے s -اورٹل کی بین مرکزی محور کے ساتھ اوورلیپنگ ہوتی ہے جیسا کہ نیچے دکھایا گیا ہے۔



- $s-p$ اوورلیپنگ: اس طرح کی اوورلیپنگ ایک ایٹم کے نصف بھرے ہوئے s -اورٹل اور دوسرے ایٹم کے نصف بھرے ہوئے p -اورٹل کے درمیان ہوتی ہے۔

کیساں طور سے ہوتا ہے۔ ہم جانتے ہیں کہ CH_4 ، NH_3 اور H_2O سالموں کی اشکال بالترتیب ٹیڑا ہیڈرل، پیرامڈل اور خمیدہ ہوتی ہیں۔ یہ ایک دلچسپ بات ہوگی اگر ہم VB تھیوری کا استعمال کرتے ہوئے یہ معلوم کریں کہ کیا ان جیومیٹرکلیک اشکال کو اورٹل اوورلیپ کی اصطلاح میں واضح کیا جاسکتا ہے؟



شکل 4.9 s ، p اورٹل کی مثبت، منفی اور صفر اوورلیپ

آئیے ہم پہلے CH_4 (متھین) سالمہ کو لیتے ہیں گراؤنڈ اسٹیٹ پر کاربن کا الیکٹرانی تشکل $[He] 2s^2 2p^2$ ہے جو کہ مشتعل حالت (Excited State) میں $[He] 2s^1 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$ ہو جاتی ہے۔ مشتعل ہونے کے لیے دستیاب توانائی، کاربن اور ہائڈروجن کے اورٹل کے درمیان اوورلیپ کے دوران خارج ہونے والی توانائی سے فراہم ہوتی ہے۔ کاربن کے چار اورٹل جن میں سے ہر ایک میں ایک تنہا بغیر جوڑے کا الیکٹران ہوتا ہے چار ہائڈروجن کے $1s$ اورٹل جن میں خود بھی ایک ہی الیکٹران ہوتا ہے، سے اوورلیپ کر سکتے ہیں۔ نتیجہ کے طور پر چار

بند بنانے میں استعمال ہوتے ہیں اس عمل کو مخلوطیت (Hybridisation) کہتے ہیں جس کو اس طرح بیان کیا جاسکتا ہے کہ یہ توانائی میں ہلکے سے فرق والے آرٹل کی ملاوٹ کا عمل ہے تاکہ ان کی توانائی کو دوبارہ تقسیم کیا جاسکے اور وہ یکساں توانائی اور یکساں شکل والے آرٹل کے نئے گروپ کی شکل میں حاصل ہو سکیں۔ مثال کے طور پر جب کاربن کے ایک $2s^2$ اور تین $2p^2$ آرٹل کا اختلاط ہوتا ہے تو چار نئے مخلوط آرٹل sp^3 حاصل ہوتے ہیں۔

مخلوطیت کی نمایاں خصوصیات : مخلوطیت کی اہم خصوصیات مندرجہ ذیل ہیں:

- 1- مخلوط آرٹل کی تعداد ان آرٹل کے برابر ہوتی ہے جن میں مخلوطیت ہوتی ہے۔
- 2- مخلوط آرٹل توانائی اور شکل کے اعتبار سے ہمیشہ یکساں ہوتے ہیں۔
- 3- مستحکم بند بنانے میں خالص آرٹل کے مقابلے میں مخلوط آرٹل زیادہ اثر دار ہوتے ہیں۔
- 4- یہ مخلوط آرٹل ایسیس میں ایسی سمت کی طرف رخ کرتے ہیں جہاں الیکٹران جوڑوں کے درمیان قوت دافعہ کمترین ہو اور اس طرح ان کی ترتیب مستحکم ہوتی ہے۔ لہذا مخلوطیت کی قسم کے سالمے کی جیومیٹری کو ظاہر کرتی ہے۔

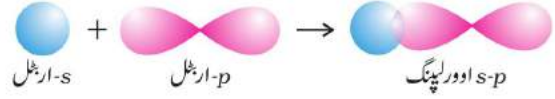
مخلوطیت کے لیے اہم شرائط

- (i) ایٹم کے گرفت خول میں موجود آرٹل ہی اختلاط کرتے ہیں۔
- (ii) جن آرٹل میں مخلوطیت ہو رہی ہے ان کی توانائی تقریباً برابر ہونی چاہیے۔
- (iii) یہ ضروری نہیں ہے کہ مخلوطیت میں صرف نصف بھرے ہوئے آرٹل ہی حصہ لیں گے۔ کچھ جگہوں پر رفتی خول کے بھرے ہوئے آرٹل بھی مخلوطیت میں حصہ لیتے ہیں۔

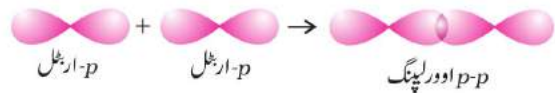
4.6.1 مخلوطیت کی قسمیں (Types of Hybridisation)

مخلوطیت کی بہت سی قسمیں ہوتی ہیں جن میں s, p اور d آرٹل شامل ہوتے ہیں۔ مخلوطیت کی مختلف اقسام مندرجہ ذیل ہیں۔

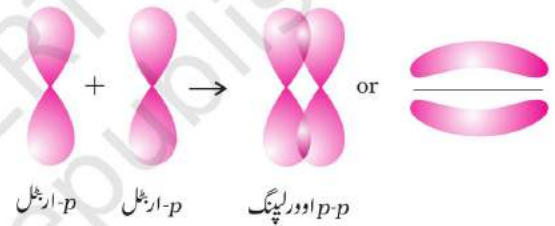
(I) sp - مخلوطیت: مخلوطیت کی اس قسم میں ایک s اور ایک p آرٹل کی آمیزش شامل ہوتی ہے جس کے نتیجے میں دو یکساں مخلوط sp آرٹل



● $p-p$ اورلپنگ: اس طرح کی اورلپنگ نزدیک آنے والے دو ایٹموں کے نصف بھرے ہوئے p -آرٹل کے درمیان ہوتی ہے۔



(ii) پائی (π) بند: بند بنانے میں آرٹل کی ایٹمی اورلپنگ اس طرح ہوتی ہے کہ ان کے محور ایک دوسرے کے متوازی اور بین مرکزی محور کے عمودی ہوتے ہیں اس طرح جانبی اورلپنگ سے بننے والے آرٹل حصہ لینے والے ایٹموں کی سطح کے اوپر اور نیچے تشری کی شکل کے دو الیکٹران بادلوں پر مشتمل ہوتے ہیں۔



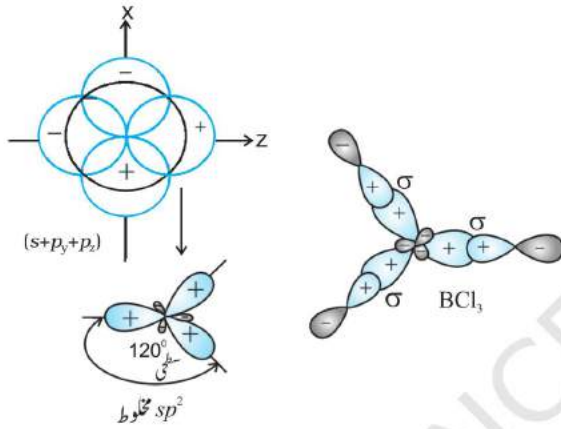
4.5.5 سگما اور پائی بند کی قوت (Strength of Sigma and pi Bonds)

بنیادی طور پر کسی بند کی طاقت اس کی اورلپنگ کی حد پر منحصر ہوتی ہے۔ سگما (σ) بند میں آرٹل کی اورلپنگ بہت زیادہ ہوتی ہے۔ لہذا یہ پائی (π) بانڈ سے زیادہ طاقتور ہوتے ہیں جہاں اورلپنگ کی حد کم ہوتی ہے۔ مزید یہ کہ π بند دو ایٹموں کے درمیان سگما بند کے علاوہ ہوتا ہے۔ یہ ان سالموں میں ہمیشہ موجود ہوتا ہے جہاں کثیر بند (دوہرے یا تہرے) پائے جاتے ہیں۔

4.6 مخلوطیت (Hybridisation)

CH_4 ، NH_3 اور H_2O جیسے کثیر ایٹمی سالموں کی جیومیٹری کی شکل کی خصوصیات کی وضاحت کرنے کے لیے پائنگ نے مخلوطیت کا تصور پیش کیا ہے۔ اس کے مطابق ایٹمی آرٹل آپس میں مل کر نئے قسم کے یکساں آرٹل بناتے ہیں جو مخلوط آرٹل کہلاتے ہیں۔ خالص آرٹل کے برعکس مخلوط آرٹل

ایکٹرائی تشکل $1s^2 2s^2 p^1$ ہوتا ہے۔ مشتعل حالت میں $2s$ کا ایک ایکٹران خالی $2p$ اوریل میں چلا جاتا ہے جس کے نتیجے میں بورون کے پاس تین غیر جفتی ایکٹران ہو جاتے ہیں۔ یہ تین اوریل (ایک $2s$ اور دو $2p$) مل کر تین sp^2 مخلوط اوریل بناتے ہیں۔ اس طرح بننے والے تین مخلوط اوریل ٹرائی گونل پلینر ترتیب میں آ جاتے ہیں اور کلورین کے $2p$ اوریل سے مل کر تین $B-Cl$ بند بناتے ہیں۔ لہذا BCl_3 کی جیومیٹری ٹرائی گونل پلینر ہوتی ہے اور $Cl-BCl$ بند زاویہ 120° ہوتا ہے (شکل 4.11)۔



شکل 4.11 sp^3 مخلوط اوریل اور BCl_3 سالمے کا بنا

(III) sp^3 مخلوطیت: اس طرح کی مخلوطیت کی وضاحت کے لیے CH_4 کی مثال لی جاسکتی ہے جس میں ایک s اور تین p -اوریل کی آمیزش سے چار sp^3 مخلوط اوریل بننے ہیں جن کی توانائی اور شکل یکساں ہوتی ہے۔ ہر ایک sp^3 اوریل میں s 25% اور p 75% کردار شامل ہوتا ہے۔ اس طرح بننے والے چار sp^3 اوریل چوٹھی شکل کے چاروں کونوں کی سمت ہوتے ہیں sp^3 مخلوط اوریل کے درمیان 109.5° ہوتا ہے جیسا کہ شکل 4.12 میں دکھایا گیا ہے۔

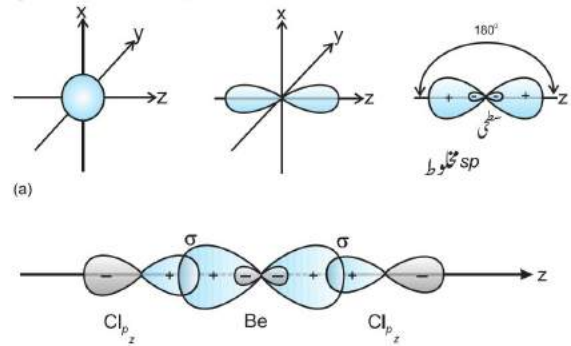
NH_3 اور H_2O سالموں کی اشکال بھی sp^3 مخلوطیت کی مدد سے واضح کی جاسکتی ہیں۔ NH_3 سالمے میں نائٹروجن کا گراؤنڈ اسٹیٹ پر ایکٹرائی تشکل $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$ ہوتا ہے۔ جس میں سے تین sp^3 مخلوط اوریل میں غیر جفتی ایکٹران ہوتے ہیں اور چوتھے میں ایک ایکٹرانوں کا تنہا جوڑا ہوتا ہے۔ یہ تین مخلوط اوریل ہائڈروجن کے $1s$ اوریل سے اوور لپ کر کے تین $N-H$ سگما بند بناتے ہیں۔ ہم جانتے ہیں کہ تنہا جوڑے اور بندشی جوڑے کے درمیان قوت دافعہ ایکٹران کے دو

حاصل ہوتے ہیں۔ sp مخلوطیت کے لیے مناسب اوریل s اور p_z ہوتے ہیں، اگر مخلوط اوریل کو z -محور پر ہونا ہے۔ ہر ایک sp مخلوط اوریل میں s 50% اور p 50% کردار ہوتا ہے۔ ایسے سالے جن کے مرکزی ایٹم میں s - p مخلوطیت ہے اور وہ براہ راست دوسرے مرکزی ایٹموں سے جوئے ہوئے ہوں تو ان کی جیومیٹری خطی ہوتی ہے۔ اس طرح کی مخلوطیت وتری مخلوطیت (Diagonal Hybridisation) بھی کہلاتی ہے۔

دو sp مخلوط z -محور پر مخالف سمت میں ہوتے ہیں جن کے مثبت لوب اُبھرے ہوئے ہوتے ہیں اور منفی لوب بہت چھوٹے اور دبے ہوئے ہوتے ہیں جس کی وجہ سے اوور لپنگ موثر ہوتی ہے جس کے نتیجے میں مضبوط بند بنتے ہیں۔

sp -مخلوطیت والے سالمات کی مثالیں

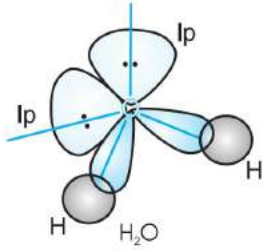
$Be:BeCl_2$ کا گراؤنڈ اسٹیٹ میں ایکٹرائی تشکل $1s^2 2s^2$ ہوتا ہے۔ مشتعل حالت میں ایک $2s$ ایکٹران خالی $2p$ اوریل میں چلا جاتا ہے جس کی وجہ سے بندش دو ہوتی ہے ایک $2s$ اور ایک $2p$ اوریل مخلوط ہو جاتے ہیں اور دو sp مخلوط اوریل بناتے ہیں یہ دو مخلوط اوریل مخالف سمت میں ہوتے ہیں اور 180° کا زاویہ بناتے ہیں۔ ہر ایک sp مخلوط اوریل کلورین کے $2p$ اوریل سے محوری اوور لپ کرتا ہے اور دو $BeCl$ سگما بانڈ بنتے ہیں۔ یہ شکل 4.10 میں دکھایا گیا ہے۔



شکل 4.10 (a) s اور p اوریل سے sp مخلوط کا بنا (b) خطی $BeCl_2$ سالمے کا بنا

(II) sp^2 مخلوطیت: اس قسم کی مخلوطیت میں ایک s اور دو $2p$ اوریل شامل ہوتے ہیں جو تین معادل مخلوط sp^2 اوریل بناتے ہیں۔ مثال کے طور پر $BeCl_2$ سالمے میں مرکزی بورون کا گراؤنڈ اسٹیٹ میں

109.5° سے گھٹ کر 104.5° ہو جاتا ہے (شکل 4.14) اور سالمہ V-شکل یا خمیدہ شکل اختیار کرتا ہے۔



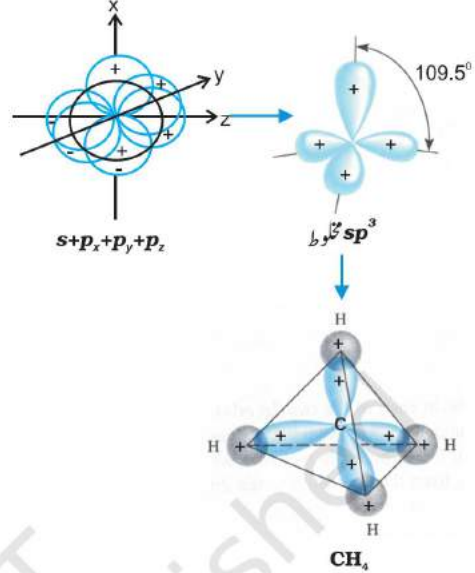
شکل 4.14 H₂O سالمہ کا بننا

4.6.2 sp^3 ، sp^2 اور sp مخلوطیت کی کچھ اور مثالیں

C₂H₆ سالمے میں sp^3 مخلوطیت: آنتھین کے سالمے میں دونوں کاربن ایٹموں میں sp^3 مخلوط حالت ہوتی ہے۔ کاربن ایٹم کے چار sp^3 مخلوط اوربٹل میں سے ایک محوری طور پر دوسرے کاربن کے ایسے ہی اوربٹل کے ساتھ اوورلیپ کرتا ہے اور ایک sp^3-sp^3 سگما بند بناتا ہے جبکہ ہر ایک کاربن کے تین مخلوط اوربٹل ہائیڈروجن ایٹم کے ساتھ sp^3-s سگما بند بناتے ہیں جیسا کہ 4.6.1 (iii) میں دکھایا گیا ہے۔ لہذا آنتھین میں C-C بندشی لمبائی 154 pm ہوتی ہے اور C-H بندشی لمبائی 109 pm ہوتی ہے۔

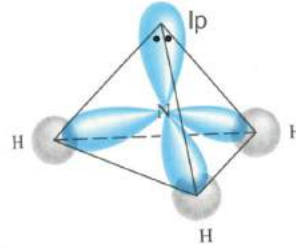
C₂H₄ سالمے میں sp^2 مخلوطیت: آنتھین سالمے کے بننے میں ایک کاربن ایٹم کا ایک sp^2 مخلوط اوربٹل دوسرے ایٹم کے sp^2 مخلوط اوربٹل کے ساتھ محوری طور پر اوورلیپ کر کے C-C سگما بند بناتا ہے۔ جبکہ ہر ایک کاربن کے باقی دو sp^2 مخلوط اوربٹل دو ہائیڈروجن ایٹموں کے ساتھ sp^2-s سگما بند بناتے ہیں جبکہ ہر ایک کاربن کے باقی دو sp^2 مخلوط اوربٹل دو ہائیڈروجن ایٹموں کے ساتھ sp^2-s سگما بند بنانے میں استعمال ہوتے ہیں۔ ایک کاربن ایٹم کا غیر مخلوط اوربٹل ($2p_x$ یا $2p_y$) دوسرے کاربن ایٹم کے مماثل اوربٹل کے ساتھ پہلوی اوورلیپ کر کے ایک کمزور π بند بناتا ہے جو کاربن اور ہائیڈروجن کی سطح کے اوپر اور نیچے دو مساوی الیکٹران بادلوں کی شکل میں رہتا ہے۔

اس طرح آنتھین سالمے میں کاربن-کاربن بانڈ میں ایک sp^2-sp^2 سگما بند ایک π بند ہوتا ہے جو p اوربٹل کے درمیان ہوتا ہے جو مخلوطیت میں حصہ نہیں لیتے اور سالمہ کی سطح کے عمودی ہوتے ہیں؛ بندشی لمبائی 134 pm ہوتی ہے۔ C-H بند sp^2-s ہوتا ہے جس کی بندشی



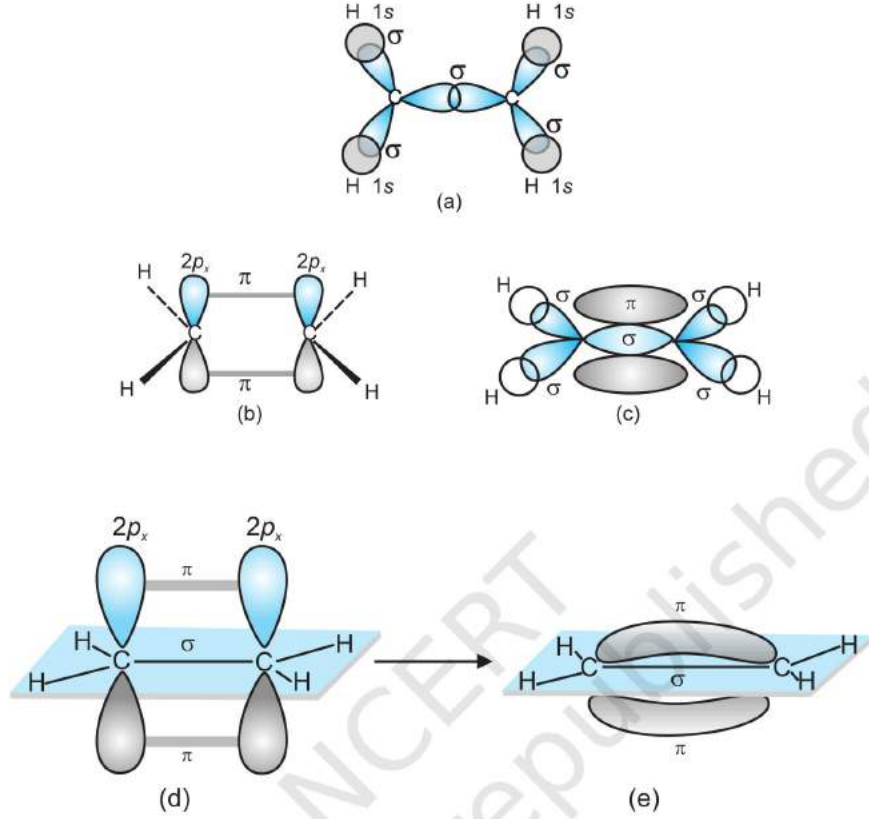
شکل 4.12 کاربن کے s ، p_x ، p_y اور p_z اوربٹل کے اتحاد سے بننے والے sp^3 مخلوط اوربٹل اور CH₄ کا بننا

بندشی جوڑوں کے درمیان قوت دافعہ سے زیادہ ہوتی ہے۔ اس طرح سالمہ کی شکل مستح ہو جاتی ہے اور بندزاویہ 109.5° سے گھٹ کر 107° ہو جاتا ہے۔ اس طرح کے سالموں کی جیومیٹری پیرامیڈل ہوتی ہے جیسا کہ شکل 4.13 میں دکھایا گیا ہے۔

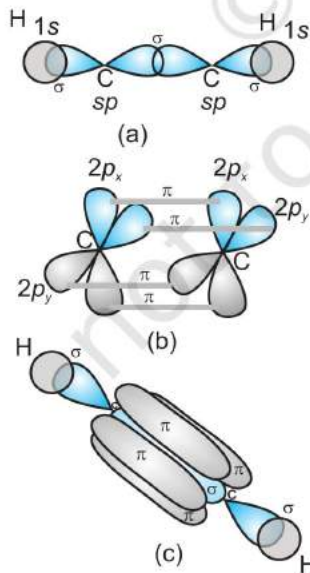


شکل 4.13 NH₃ سالمہ کا بننا

H₂O سالمے میں آکسیجن کے چار اوربٹل (ایک 2s اور تین 2p) میں sp^3 مخلوطیت ہوتی ہے اور چار sp^3 اوربٹل بننے میں جن میں سے دو اوربٹل میں سے ہر ایک میں ایک الیکٹران ہوتا ہے اور باقی دو میں ایک ایک جوڑا الیکٹرانوں کا ہوتا ہے۔ یہ چار sp^3 مخلوط اوربٹل چار سطحی جیومیٹری حاصل کرتے ہیں۔ جس کے دو کونوں میں دو ہائیڈروجن کے ایٹم ہوتے ہیں اور باقی دو کونوں میں غیر بندشی جوڑے ہوتے ہیں۔ اس میں بندشی زاویہ



شکل 4.15 ایٹھین میں سگما اور پائی بانڈ کا بننا

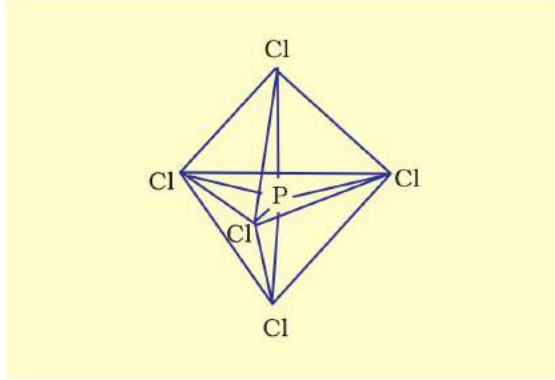


شکل 4.16 ایٹھائن میں سگما اور پائی بند کا بننا

لمبائی 108 pm ہوتی ہے H-C-H ہندشی زاویہ 117.6° جبکہ H-C-C ہندشی زاویہ 121° ہوتا ہے۔ ایٹھین میں سگما اور پائی بند کا بننا شکل 4.15 میں دکھایا گیا ہے۔

C_2H_2 میں sp مخلوطیت: ایٹھائن کے سالمے کی تشکیل میں دونوں کاربن ایٹموں میں sp مخلوطیت ہوتی ہے اور دو غیر مخلوط ارٹھل، یعنی $2p_y$ اور $2p_x$ ہوتے ہیں۔

ایک کاربن ایٹم کا sp مخلوط ارٹھل دوسرے کاربن ایٹم کے sp مخلوط ارٹھل کے ساتھ محوری اور لیپ کر کے C-C سگما بند بناتے ہیں جبکہ ہر ایک کاربن کا دوسرا مخلوط ارٹھل محوری سطح پر ہائڈروجن ایٹم کے نصف بھرے ہوئے s ارٹھل پر اور لیپ کر کے σ بند بناتا ہے۔ دونوں کاربن ایٹموں کے دو غیر مخلوط p ارٹھل جانبی اور لیپ کر کے کاربن ایٹموں کے درمیان دو π بند بناتے ہیں۔ اس طرح دو کاربن ایٹموں کے درمیان تہرے بند میں ایک سگما اور دو پائی بند ہوتے ہیں جیسا کہ شکل 4.16 میں دکھایا گیا ہے۔



شکل 4.17 PCl_5 سالمہ کی ٹرائی گونل بائی پیرامڈل جیومیٹری

اب پانچ ارہٹل (یعنی ایک s ، تین p اور ایک d ارہٹل) مخلوطیت کے لیے دستیاب ہیں جو sp^3d مخلوط ارہٹل کو بنائیں گے جو کہ ٹرائی گونل بائی پیرامڈل کے پانچ کونوں کی سمت میں ہوں گے جیسا کہ شکل 4.17 میں دکھایا گیا ہے۔

یہ دیکھنا چاہیے کہ ٹرائی گونل بائی پیرامڈل جیومیٹری میں تمام زاویے برابر نہیں ہوتے۔ PCl_5 میں فاسفورس کے پانچ sp^3d مخلوط ارہٹل کلورین ایٹم کے p ارہٹل، جس میں صرف ایک الیکٹران ہوتا ہے سے اوورلیپ کر کے پانچ $P-Cl$ سگما بند بناتے ہیں۔ تین $P-Cl$ بند ایک ہی سطح پر ہوتے ہیں اور ایک دوسرے سے 120° کا زاویہ بناتے ہیں۔ ان بند کو استوائی بند (Equatorial Bond) کہتے ہیں۔ باقی کے دو $P-Cl$ بند استوائی سطح کے اوپر اور نیچے سطح کے ساتھ 90° کا زاویہ بناتے ہوئے ہوتے ہیں۔ انھیں محوری بند کہتے ہیں۔ چونکہ محوری بند کے جوڑے استوائی بند کے جوڑوں کی طرف سے زیادہ دافع قوت برداشت کرتے ہیں۔ لہذا محوری بند، استوائی بند کے مقابلے میں تھوڑے سے لمبے اور کمزور پائے ہوتے ہیں جس کی وجہ سے PCl_5 زیادہ متعادل ہوتا ہے۔

(ii) SF_6 کا بننا (sp^3d^2 مخلوطیت): SF_6 میں مرکزی ایٹم سلفر کا گراؤنڈ اسٹیٹ میں الیکٹران کی شکل $3s^2 3p^4$ ہے۔ مشتعل حالت میں دستیاب چھ ارہٹل یعنی، ایک s ، تین p اور دو d ارہٹل میں ایک ایک

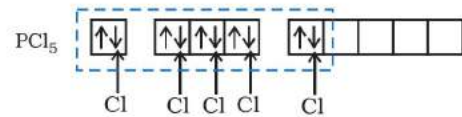
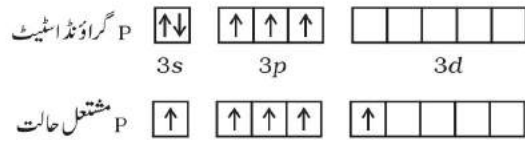
4.6.3 d -ارہٹل والے عناصر میں مخلوطیت (Hybridisation of Elements Involving d Orbitals)

تیسرے دور میں پائے جانے والے عناصر میں s اور p کے علاوہ d -ارہٹل ہوتے ہیں $3d$ ارہٹل کی توانائی کا موازنہ $3s$ اور $3p$ ارہٹل سے کیا جاسکتا ہے۔ $3d$ -ارہٹل کی توانائی کا موازنہ $4s$ اور $4p$ سے بھی کیا جاسکتا ہے۔ نتیجہ کے طور پر $3s, 3p, 3d$ یا $4s, 4p, 4d$ کے درمیان مخلوطیت ممکن ہو سکتی ہے۔ تاہم چونکہ $3p$ اور $4s$ ارہٹل کے درمیان توانائی کا فرق بامعنی ہوتا ہے، لہذا $3p, 3d$ اور $4s$ ارہٹل کے ساتھ مخلوطیت ممکن نہیں ہوتی۔

s, p اور d -ارہٹل کے ساتھ مخلوطیت کی اسکیم کا خلاصہ مندرجہ ذیل ہے:

مثالیں	ایٹمی ارہٹل	مخلوطیت کی قسم	سالموں/آئینوں کی شکل
$[Ni(CN)_4]^{2-}$, $[Pt(Cl)_4]^{2-}$	$d+s+p(2)$	dsp^2	مربع سطحی (Square Planar)
PF_5 , PCl_5	$s+p(3)+d$	sp^3d	ٹرائی گونل بائی پیرامڈل (Trigonal Bipyramidal)
BrF_5 , $XeOF_4$	$d+s+p(3)$	dsp^3	اسکوائر پیرامڈل (Square Pyramidal)
SF_6 , $[CrF_6]^{3-}$	$s+p(3)+d(2)$	sp^3d^2	آکٹا ہیڈرل
$[Co(NH_3)_6]^{3+}$	$d(2)+s+p(3)$	d^2sp^3	

(i) PCl_5 کا بننا (sp^3d مخلوطیت): فاسفورس کی گراؤنڈ اسٹیٹ اور مشتعل حالت کا بیرونی الیکٹران کی شکل ($Z = 15$) مندرجہ ذیل ہے۔



sp^3d مخلوط ارہٹل پانچ کلورین ایٹموں کے ذریعہ فراہم کرائے گئے الیکٹرانوں سے بھرے ہوئے

(ii) قابل موازنہ توانائی اور مناسب تشاکل کے ایٹمی اوربلز آپس میں مل کر مولیکولر اوربلز بناتے ہیں۔

(iii) ایک ایٹمی اوربلز میں الیکٹران ایک نیوکلئس کے زیر اثر ہے، جبکہ مالیکولر اوربلز میں وہ دو یا دو سے زیادہ نیوکلئس اثر میں رہتا ہے اس کا انحصار سالے میں موجود ایٹموں کی تعداد پر ہوتا ہے۔ لہذا ایٹمی اوربلز اکائی مرکزی ہوتا ہے جبکہ مالیکولر اوربلز کثیر مرکزی ہوتا ہے۔

(iv) بننے والے مولیکولر اوربلز کی تعداد متحد ہونے والے ایٹمی اوربلز کی تعداد کے برابر ہوتی ہے۔ جب دو ایٹمی اوربلز متحد ہوتے ہیں تو دو مولیکولر اوربلز بننے ہیں۔ ایک بونڈنگ مولیکولر اوربلز اور دوسرا اینٹی بونڈنگ اوربلز کہلاتا ہے۔

(v) بندشی مولیکولر اوربلز کی توانائی کم ہوتی ہے لہذا متعلقہ ایٹمی بونڈنگ مولیکولر اوربلز سے اس کا استحکام زیادہ ہوتا ہے۔

(vi) جس طرح ایک ایٹم میں مرکز کے گرد الیکٹرانوں کا احتمالی ہاؤ ایک ایٹمی اوربلز سے ظاہر کیا جاتا ہے اسی طرح ایک سالمہ میں مرکزوں کے گروہ کے گرد الیکٹرانوں کا احتمالی ہاؤ مولیکولر اوربلز کے ذریعہ دیا جاتا ہے۔

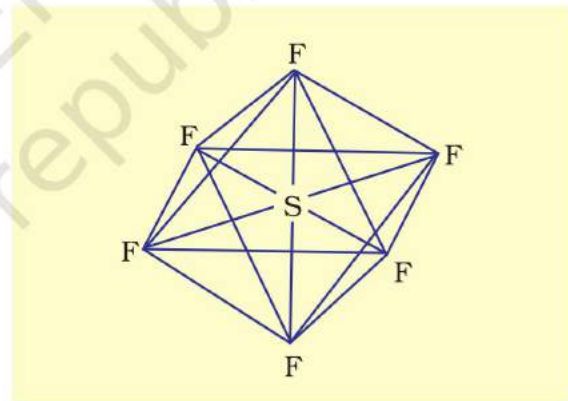
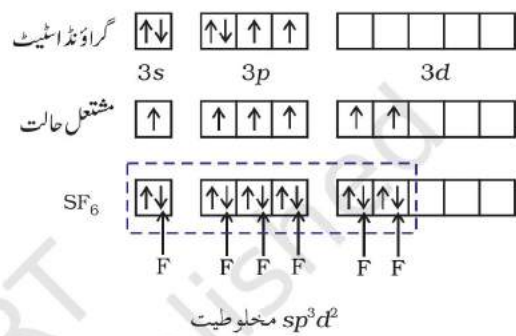
(viii) ایٹمی اوربلز کی طرح مولیکولر اوربلز بھی پالی کے اصول اخراج اور ہنڈ کے قانون کا اتباع کرتے ہوئے آف باؤ کے اصول کے مطابق ہی بھرے جاتے ہیں۔

4.7.1 مولیکولر آر بلز کا بننا ایٹمی اوربلز کا خطی اتحاد

(Formation of Molecular Orbitals Linear Combination of Atomic Orbitals (LCAO))

لہر میکانیات (Wave Mechanics) کے مطابق ایٹمی اوربلز کو لہر تعامل (ψ) سے ظاہر کرتے ہیں جو الیکٹران لہروں کی وسعت کو ظاہر کرتا ہے۔ انہیں شرودنجر کی لہر مساوات کے حل سے حاصل کیا جاتا ہے۔ تاہم، چونکہ یہ کسی ایسے نظام کے لیے حل نہیں کی جاسکتی جس میں ایک سے زیادہ الیکٹران ہوں، مولیکولر اوربلز جو سالموں کے لیے ایک الیکٹران لہر فنکشن ہوتے ہیں انہیں براہ راست شرودنجر کی لہر مساوات کے حل سے حاصل کرنا مشکل ہوتا ہے۔ اس مسئلہ پر قابو پانے کے لیے ایک تقریبی طریقہ استعمال کیا گیا جو ایٹمی اوربلز کا خطی اتحاد (Linear Combination of Atomic Orbital) کہلاتا ہے۔

الیکٹران ہوتا ہے۔ یہ اوربلز مخلوطیت کے بعد چھ نئے $sp^3 d^2$ مخلوط اوربلز بناتے ہیں جو SF_6 میں باقاعدہ آکٹا ہیڈرن کے چھ کونوں کی سمت ہوتے ہیں۔ یہ چھ $sp^3 d^2$ ہے۔ مخلوط اوربلز فلورین ایٹم کے ایک الیکٹران سے گھرے ہوئے ہوتے ہیں اوربلز پر اوور لپ کر کے چھ S-F سگما بند بناتے ہیں۔ اس طرح SF_6 سالے کی ایک باقاعدہ آکٹا ہیڈرن شکل ہوتی ہے جیسا کہ شکل 4.18 میں دکھائی گئی ہے۔



شکل 4.18 SF_6 سالمہ کی آکٹا ہیڈرنل جیومیٹری

4.7 مولیکولر اوربلز تھیوری

(Molecular Orbital Theory)

مولیکولر اوربلز نظریہ 1932 میں ایف۔ ہنڈ اور آر۔ ایس۔ ملیکن نے تیار کیا تھا۔ اس نظریہ کی خصوصیات مندرجہ ذیل ہیں:

(i) ایک سالمہ میں الیکٹران مختلف مالیکولر اوربلز میں پائے جاتے ہیں اسی طرح جیسے ایک ایٹم میں الیکٹران ایٹمی اوربلز میں پائے جاتے ہیں۔

(Interference) کی اصطلاحات میں سمجھا جاسکتا ہے۔ بانڈنگ مالیکولر اوربل کے بننے میں بندشی ایٹموں کی دو الیکٹران لہریں ایک دوسرے کو تعمیری تداخل کے سبب تقویت پہنچاتی ہیں جبکہ اینٹی بانڈنگ مالیکولر اوربل کے بننے میں الیکٹران لہریں تخریبی تداخل کی وجہ سے ایک دوسرے کو رد کر دیتی ہیں۔ نتیجہ کے طور پر بانڈنگ مالیکولر اوربل کی الیکٹران کثافت اتحادی ایٹموں کے مرکزوں کے درمیان قائم رہتی ہے جس کی وجہ سے نیوکلئس کے درمیان دفع بہت کم ہوتا ہے جبکہ اینٹی بانڈنگ مالیکولر اوربل میں زیادہ تر الیکٹران کثافت کے درمیان کی جگہ سے دور ہوتے ہیں۔ دراصل مرکزوں کے درمیان ایک نوڈل مستوی ہوتا ہے (جس پر الیکٹران کثافت صفر ہوتی ہے) جس کی وجہ سے نیوکلئس کے درمیان قوت دافعہ زیادہ ہوتی ہے۔ گرتی مالیکولر اوربل میں موجود الیکٹران مرکزوں کو ایک ساتھ تھامے رہتے ہیں جس کی وجہ سے سالمہ مستحکم ہو جاتا ہے۔ لہذا ایک گرتی مالیکولر اوربل میں ہمیشہ ان دونوں ایٹمی اوربل سے کم توانائی ہوتی ہے جن سے مل کر وہ بنتے ہیں۔ اس کے برعکس وہ الیکٹران جو انٹی بانڈنگ مالیکولر اوربل میں ہوتے ہیں وہ سالمہ کو غیر مستحکم کرتے ہیں۔ یہ اس وجہ سے ہوتا ہے کہ اس اوربل میں الیکٹرانوں کی آپسی قوت دافعہ الیکٹرانوں اور نیوکلئس کے درمیان کشش سے زیادہ ہوتی ہے جس کی وجہ سے کل توانائی میں اضافہ ہوتا ہے۔

یہ بات قابل غور ہے کہ اینٹی بانڈنگ اوربل کی توانائی ان ایٹمی اوربل سے اوپر اٹھ جاتی ہے جن اوربل سے مل کر وہ بنتے ہیں جبکہ بندشی اوربل کی توانائی ان سے نیچے گرتی ہے جو ان کے بنانے والے ہیں۔ تاہم، دونوں مالیکولر اوربل کی کل توانائی اتنی ہی رہتی ہے جتنی کہ ابتدائی دو ایٹمی اوربل کی ہوتی ہے۔

4.7.2 ایٹمی اوربل کے اتحاد کی شرائط

(Conditions for the Combination of Atomic Orbitals)

مالیکولر اوربل بنانے کے لیے ایٹمی اوربل کا کھٹی اتحاد اسی وقت ممکن ہے جبکہ مندرجہ ذیل شرائط پوری ہو سکیں۔

- 1۔ اتحادی ایٹمی اوربل کی توانائی تقریباً یکساں ہونی چاہیے۔ اس کا مطلب یہ ہے کہ 1s اوربل 1s اوربل کے ساتھ ہی اتحاد کر سکتا ہے لیکن 2s کے ساتھ نہیں کیونکہ 2s اوربل کی توانائی 1s اوربل سے

آئیے اس طریقہ کو ہومونیوکلیر دو ایٹمی بانڈروجن سالمے کے لیے استعمال کرتے ہیں۔ مان لیجیے بانڈروجن سالمہ دو ایٹم A اور B سے مل کر بنا ہے۔ ہر ایک بانڈروجن ایٹم اپنی گراؤنڈ اسٹیٹ میں 1s اوربل میں ایک الیکٹران ہوتا ہے۔ ان ایٹموں کے ایٹمی اوربل لہر فنکشن ψ_A اور ψ_B سے ظاہر کیے جاسکتے ہیں۔ ریاضیاتی طور پر مالیکولر اوربل مالیکولر اوربل کا بننا ایٹمی اوربل کے کھٹی اتحاد سے ظاہر کیا جاسکتا ہے جو منفرد ایٹمی اوربل کے لہر فنکشن کے جمع اور گھٹا کرنے سے حاصل ہو سکتا ہے جیسا کہ نیچے دکھایا گیا ہے۔

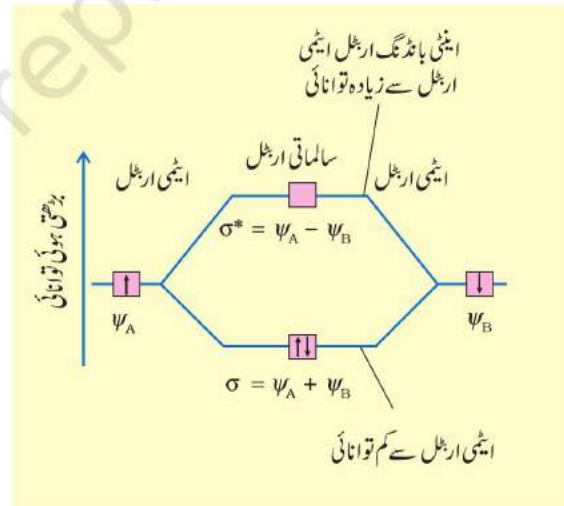
$$\psi_{MO} = \psi_A \pm \psi_B$$

لہذا σ اور σ^* دو مالیکولر اوربل اس طرح بنیں گے۔

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

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

سالماتی اوربل σ جو ایٹمی اوربل کے جمع کرنے سے بنا ہے وہ بندشی مالیکولر اوربل (Bonding Molecular Orbital) کہلاتا ہے جبکہ سالماتی اوربل σ^* جو ایٹمی اوربل کی تفریق سے بنا ہے وہ اینٹی بانڈنگ مالیکولر اوربل کہلاتا ہے۔ جیسا کہ شکل 4.19 میں دکھایا گیا ہے۔



شکل 4.19 دو ایٹم A اور B کے مرکز پر ایٹمی اوربل ψ_A اور ψ_B کے خصلتی اتحاد سے بننے والے بانڈنگ (σ) اور اینٹی بانڈنگ (σ^*) مالیکولر اوربل کا بننا

کیفیتی طور پر، سالماتی اوربل کا بننا اتحادی ایٹموں کی الیکٹران لہروں کی تعمیری اور تخریبی تداخل (Constructive and Destructive

4.7.4 مالیکولر ارٹھل کے انرجی لیول ڈائیگرام (Energy Level Diagram for Molecular Orbitals)

ہم نے دیکھا کہ دو ایٹموں کے 1s ایٹموں ارٹھل دو مالیکولر ارٹھل 1s اور 1s* بناتے ہیں۔ اسی طرح 2s اور 2p ایٹمی ارٹھل (دو ایٹموں پر آٹھ ایٹمی ارٹھل) مل کر مندرجہ ذیل آٹھ مالیکولر ارٹھل دیتے ہیں۔
 σ^*2s σ^*2p_z π^*2p_x π^*2p_y
 $\sigma 2s$ $\sigma 2p_z$ $\pi 2p_x$ $\pi 2p_y$

ان مالیکولر ارٹھل کے انرجی لیول دوری جدول کی دوسری قطار کے عناصر کے متجانس دو ایٹمی سالموں کے تجرباتی طور پر حاصل شدہ اسپیکٹرواسکوپک اعداد و شمار کی مدد سے معلوم کیے گئے ہیں۔ O_2 اور F_2 کے مختلف مالیکولر ارٹھل کی توانائی کی بڑھتی ہوئی ترتیب مندرجہ ذیل ہے:

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

تاہم مالیکولر ارٹھل کی توانائی کے درجات کی یہ ترتیب باقی سالموں، N_2 ، C_2 ، B_2 ، Be_2 ، Li_2 کے لیے صحیح نہیں ہے۔ مثال کے طور پر تجرباتی طور پر یہ دیکھا گیا ہے کہ N_2 ، C_2 ، B_2 وغیرہ جیسے سالمات کے لیے مختلف مالیکولر ارٹھل کے لیے توانائی کی بڑھتی ہوئی ترتیب مندرجہ ذیل ہے۔

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

اس ترتیب کی اہم خصوصیت یہ ہے کہ $\sigma 2p_z$ مالیکولر ارٹھل کی توانائی $\pi^* 2p_x$ اور $\pi^* 2p_y$ مالیکولر ارٹھل سے زیادہ ہے۔

4.7.5 الیکٹرانیک تشکل اور سالماتی طرز عمل (Electronic Configuration and Molecular Behaviour)

مختلف مالیکولر ارٹھل میں الیکٹرانوں کا بناؤ سالمے کا الیکٹرانیک تشکل کہلاتا ہے۔ سالمے کے الیکٹرانیک تشکل سے یہ ممکن ہے کہ سالمے سے متعلق اہم معلومات حاصل کی جاسکیں جیسا کہ نیچے بیان کیا گیا ہے۔

سالموں کا استحکام: اگر بانڈنگ ارٹھل میں الیکٹرانوں کی تعداد N_b ہے اور اینٹی بانڈنگ ارٹھل میں الیکٹرانوں کی تعداد N_a ہے تو:
 (i) اگر N_a ، N_b سے زیادہ ہے تو سالمہ مستحکم ہوگا اور

خاصی زیادہ ہوتی ہے۔ یہ اس وقت درست نہیں ہوگا جب ایٹم بہت مختلف ہوں گے۔

2- متحد ہونے والے ایٹمی ارٹھل کا تشکل سالمی محور کے برابر ہونا چاہیے۔ روایت کے مطابق z-محور کو سالماتی محور کے طور پر لیا جاتا ہے۔ یہ بات قابل غور ہے کہ برابر اور تقریباً برابر توانائی والے ایٹمی ارٹھل بھی اتحاد نہیں کرتے ہیں اگر ان کا تشکل برابر نہ ہو۔ مثال کے طور پر کسی ایٹم کے $2p_z$ ارٹھل دوسرے ایٹم کے $2p_z$ ارٹھل کے ساتھ ہی اتحاد کریں گے نہ کہ $2p_x$ یا $2p_y$ سے کیونکہ ان کا تشکل مختلف ہے۔

3- متحد ہونے والے ایٹمی ارٹھل کا اوورلیپ زیادہ سے زیادہ ہونا چاہیے۔ جتنا زیادہ اوورلیپ ہوگا مالیکولر ارٹھل کے مرکروں کے درمیان اتنی ہی زیادہ الیکٹران کثافت ہوگی۔

4.7.3 مالیکولر ارٹھل کی قسمیں (Types of Molecular Orbitals)

دو ایٹمی سالمات کے مالیکولر ارٹھل کو σ (سگما) π (پائی) اور δ (ڈیلٹا) سے ظاہر کرتے ہیں۔

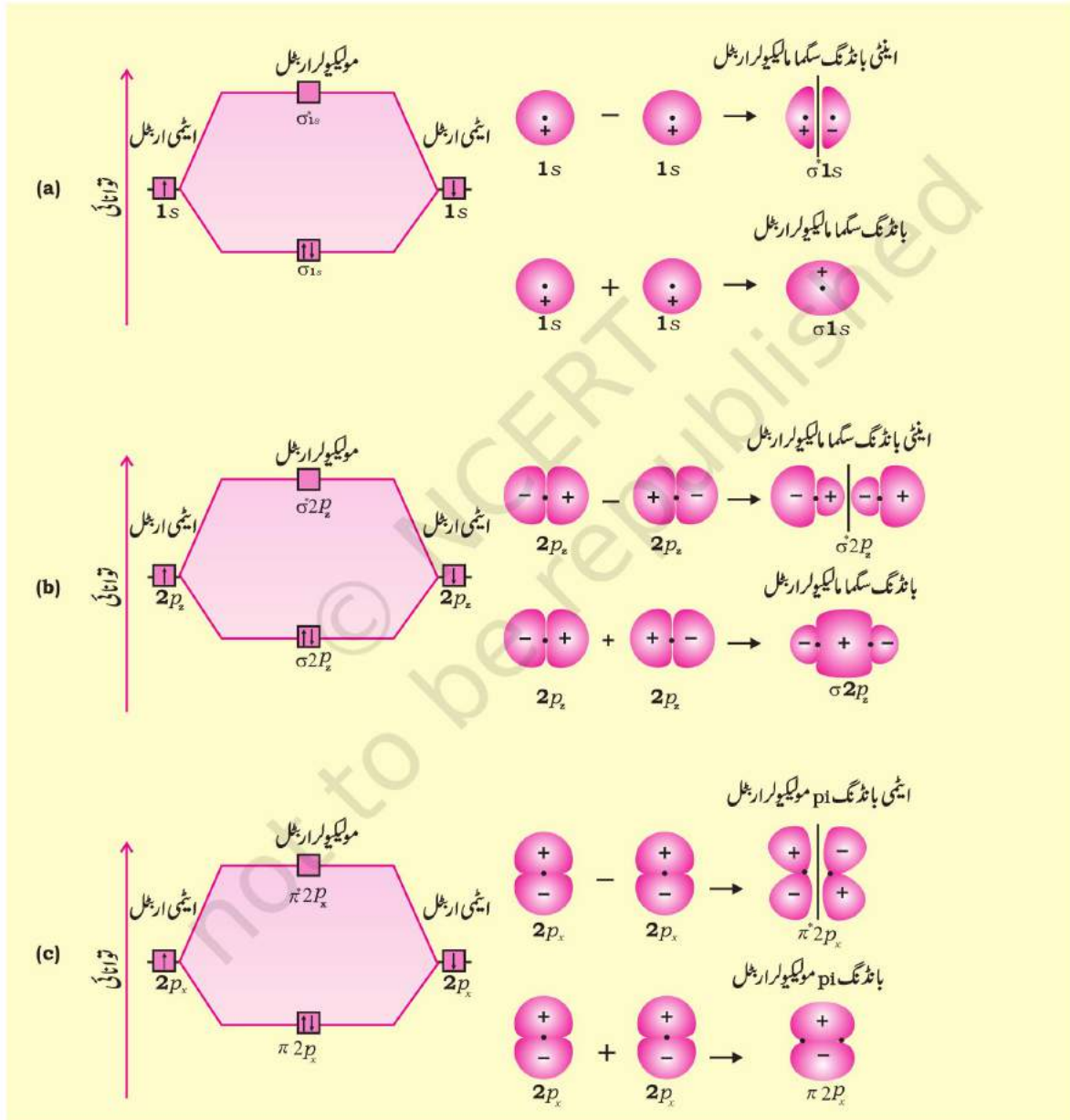
اس تسمیہ میں سگما (σ) مالیکولر ارٹھل بند-محور کے گرد تشکلی ہوتے ہیں جبکہ پائی (π) مالیکولر ارٹھل تشکلی نہیں ہوتے؛ مثال کے طور پر $1s$ -ارٹھل کا نھلی اتحاد جو دو مرکروں کے گرد ہوتا ہے اور دو مالیکولر ارٹھل بناتا ہے جو بند-محور کے گرد تشکلی ہوتے ہیں۔ ایسے مالیکولر ارٹھل σ قسم کے ہوتے ہیں اور ان کو $\sigma 1s$ اور $\sigma^* 1s$ سے ظاہر کرتے ہیں (شکل (4.20(a))۔ اگر بین مرکزی محور z-سمت میں لیا جائے تو یہ دیکھا جاسکتا ہے کہ دو ایٹموں کے $2p_z$ ارٹھل کا نھلی اتحاد بھی دو سگما مالیکولر ارٹھل بناتا ہے جن کو $\sigma 2p_z$ اور $\sigma^* 2p_z$ سے ظاہر کرتے ہیں (شکل (4.20(b))۔

$2p_x$ اور $2p_y$ سے حاصل ہونے والے مالیکولر ارٹھل بانڈ-محور کے گرد تشکلی نہیں ہوتے کیونکہ سالماتی سطح کے اوپر مثبت لوہ اور نیچے منفی لوہ ہوتا ہے۔ ایسے مالیکولر ارٹھل کو π اور π^* سے ظاہر کرتے ہیں (شکل (4.20(c))۔ π -بانڈنگ مالیکولر ارٹھل میں بین مرکزی محور کے اوپر اور نیچے الیکٹران-کثافت زیادہ ہوتی ہے۔ π^* اینٹی بانڈنگ مالیکولر ارٹھل میں مرکروں کے درمیان نوڈ ہوتی ہے۔

(ii) سالمہ غیر مستحکم ہوگا اگر N_a, N_b سے کم ہے۔

باند آرڈر (Bond Order)
بوند آرڈر (BO) کی تعریف اس طرح بیان کی جاسکتی ہے کہ یہ بانڈنگ اور اینٹی بانڈنگ آربل میں موجود الیکٹرانوں کی تعداد میں فرق کے آدھے کی برابر ہوتا ہے۔ یعنی

(i) میں زیادہ بانڈنگ آربل بھرے ہوئے ہیں لہذا بانڈنگ کا اثر زیادہ ہوگا اور سالمہ مستحکم ہوگا۔ (ii) اینٹی بانڈنگ آربل کا اثر زیادہ ہے لہذا سالمہ غیر مستحکم ہوگا۔

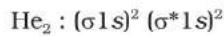


شکل 4.20 (a) $1s$ - ایٹمی آربل، (b) $2p_z$ ایٹمی آربل اور (c) $2p_x$ ایٹمی آربل کے اتحاد سے بننے والے بانڈنگ اور اینٹی بانڈنگ مالیکیولر آربلز کی توانائیاں اور خدو خال

$$\text{بائڈ آرڈر} = \frac{N_b - N_a}{2} = \frac{2 - 0}{2} = 1$$

اس کا مطلب ہے کہ ہائڈروجن کے دو ایٹم آپس میں اکہرے بند سے بندھے ہوئے ہوتے ہیں۔ ہائڈروجن سالمے کی بند افتراق توانائی 438 kJ mol^{-1} معلوم کی گئی ہے اور بندشی لمبائی 74 pm ہے۔ چونکہ ہائڈروجن کے سالمے میں کوئی بھی بغیر جوڑے والا الیکٹران نہیں ہے لہذا یہ ڈایا مقناطیسی ہوتا ہے۔

2. ہیلیم سالمہ (He): ہیلیم ایٹم کا الیکٹرانئی تشکل $1s^2$ ہے۔ ہیلیم کے ہر ایک ایٹم میں دو الیکٹران ہوتے ہیں لہذا ہیلیم کے سالمے میں چار (4) الیکٹران ہوں گے۔ یہ الیکٹران $1s$ اور $1s^*$ مالکیو لر آرٹیل میں ہوتے ہیں جس کی وجہ سے الیکٹرانئی تشکل مندرجہ ذیل ہوتا ہے۔



$$\text{ہیلیم کا بائڈ آرڈر ہوگا } \frac{1}{2}(2 - 2) = 0$$

He₂ سالمہ لہذا غیر مستحکم ہے اور پایا نہیں جاتا۔

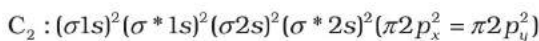
اسی طرح یہ بھی دکھایا جاسکتا ہے کہ Be₂ سالمہ $(\sigma 1s)^2 (\sigma^* 1s)^2 (\sigma 2s)^2 (\sigma^* 2s)^2$ بھی نہیں پایا جاتا۔

3. لیتھیم سالمہ (Li₂): لیتھیم کا الیکٹرانئی تشکل $1s^2 2s^1$ ہے Li₂ میں چھ الیکٹران ہیں۔ لہذا Li₂ سالمہ کا الیکٹرانئی تشکل، $\text{Li}_2 : (\sigma 1s)^2 (\sigma^* 1s)^2 (\sigma 2s)^2 (\sigma^* 2s)^2$ ہوگا۔

مندرجہ بالا تشکل کو اس طرح بھی لکھ سکتے ہیں $\text{KK}[\sigma 2s]^2$ ، جہاں KK بند KK شیل $(\sigma 1s)^2 (\sigma^* 1s)^2$ کو ظاہر کرتے ہیں۔

Li₂ کے الیکٹرانئی تشکل سے یہ بات ظاہر ہے کہ بائڈنگ مالکیولر آرٹیل میں چار الیکٹران موجود ہیں اور دو الیکٹران اینٹی بائڈنگ مالکیولر آرٹیل میں موجود ہیں۔ لہذا اس کا بائڈ آرڈر، $1 = \frac{1}{2}(4 - 2)$ ہے۔ اس کا مطلب ہے کہ Li₂ سالمہ مستحکم ہے اور چونکہ اس کے پاس غیر جوڑے کے الیکٹران نہیں ہیں لہذا یہ ڈایا مقناطیسی ہوگا۔ درحقیقت ڈایا مقناطیسی Li₂ سالمے بخارات کی شکل میں پائے جاتے ہیں۔

4. کاربن سالمہ (C₂): کاربن کا الیکٹرانئی تشکل $1s^2 2s^2 2p^2$ ہے۔ C₂ میں بارہ الیکٹران ہوتے ہیں۔ لہذا C₂ سالمہ کا الیکٹرانئی تشکل:



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

سالموں کی استحکام سے متعلق اوپر بیان کیے گئے اصولوں کو بائڈ آرڈر کی اصطلاحات میں مندرجہ ذیل طریقہ سے دوبارہ بیان کیا جاسکتا ہے۔ ایک مثبت بائڈ آرڈر (یعنی $N_b > N_a$) یا صفر (یعنی $N_b = N_a$) کا مطلب ہے غیر مستحکم سالمہ۔

بند کی فطرت (Nature of the Bond)

بائڈ آرڈر کی تکمیلی قیمتیں 1، 2 یا 3 اکہرے، دوہرے یا تہرے بند کو ظاہر کرتی ہیں جیسا کہ ہم نے کلاسیکی تصور میں پڑھا تھا۔

بندشی لمبائی (Bond-length)

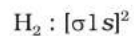
ایک سالمہ میں دو ایٹموں کے درمیان بائڈ آرڈر کو بندشی لمبائی کی قریبی پیمائش کے طور پر لیا جاسکتا ہے جب بائڈ آرڈر بڑھتا ہے تو بندشی لمبائی کم ہوتی ہے۔

مقناطیسی فطرت (Magnetic Nature)

اگر کسی سالمے میں تمام مالکیولر آرٹیل دوہرے (یا دو الیکٹرانوں سے) گھرے ہوئے ہیں تو وہ شے ڈایا مقناطیسی (Diamagnetic) ہوگی (مقناطیسی میدان سے مدافعت کرے گی)۔ بہر حال اگر ایک یا زیادہ مالکیولر آرٹیل میں اکہرے الیکٹران ہیں تو وہ پیرامیگنیٹک (Paramagnetic) ہوگی (مقناطیسی میدان کے تئیں کشش رکھے گی)۔ مثال کے طور پر O₂ کا سالمہ۔

4.8 ہم نیوکلیائی دوائیسی سالموں میں بندش (Bonding in Some Homonuclear Diatomic Molecules)

اس سیکشن میں ہم کچھ ہم نیوکلیائی دوائیسی سالموں میں بندش پر بحث کریں گے۔ 1. ہائڈروجن سالمہ (H₂): یہ دو ہائڈروجن ایٹموں کے ملنے سے بنتا ہے۔ ہر ایک ہائڈروجن ایٹم کے $1s$ آرٹیل میں ایک الیکٹران ہوتا ہے۔ لہذا، ہائڈروجن کے سالمہ میں کل دو الیکٹران ہوتے ہیں جو $1s$ مالکیولر آرٹیل میں موجود ہوتے ہیں۔ لہذا ہائڈروجن سالمے کا الیکٹرانئی تشکل ہوتا ہے:



ہائڈروجن سالمے H₂ کا بائڈ آرڈر مندرجہ ذیل طریقے سے معلوم کیا جاسکتا ہے۔

$$O_2 : \left[\begin{array}{c} KK (\sigma 2s)^2 (\sigma^* 2s)^2 (\sigma 2p_z)^2 \\ (\pi 2p_x^2 \equiv \pi 2p_y^2), (\pi^* 2p_x^1 \equiv \pi^* 2p_y^1) \end{array} \right] \text{ ہوگا۔}$$

O_2 سالے کے الیکٹرونی تشکل سے یہ واضح ہوتا ہے کہ بانڈنگ مالکیولر اریگل میں 10 (دس) الیکٹران موجود ہیں اور 6 الیکٹران اینٹی بانڈنگ مالکیولر اریگل میں موجود ہیں۔ لہذا اس کا

$$\text{بوند آرڈر} = \frac{1}{2} [N_b - N_a] = \frac{1}{2} [10 - 6] = 2$$

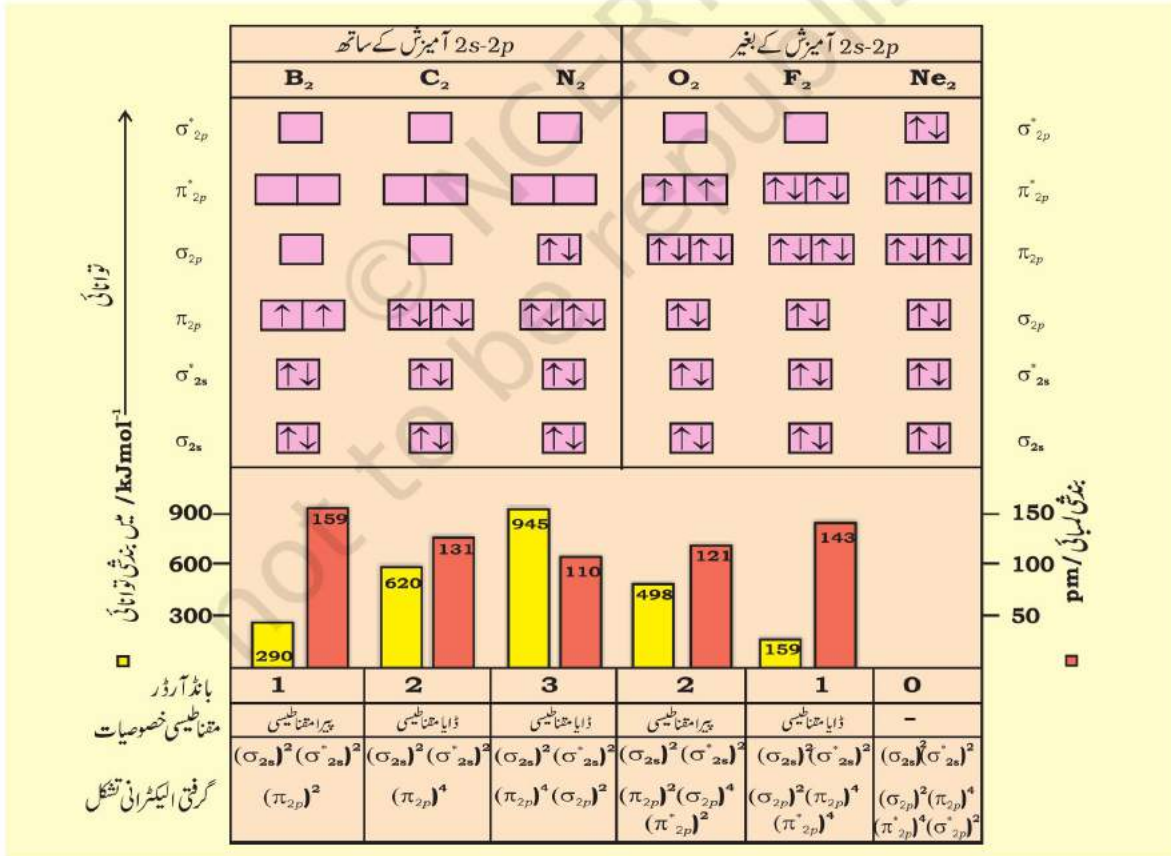
لہذا آکسیجن کے سالے میں ایٹم دوہرے بند سے بندھے ہوئے ہوتے ہیں۔ اس کے علاوہ یہ بھی دیکھا گیا ہے کہ اس کے پاس دو بغیر جوڑے کے الیکٹران $\pi^* 2p_x$ اور $\pi^* 2p_y$ مالکیولر اریگل میں موجود ہیں۔ لہذا O_2 سالمہ، ایک پیرا مقناطیسی سالمہ ہونا چاہیے۔ ایک اندازہ جس کی تصدیق تجرباتی مشاہدہ سے ہوتی ہے۔ اس طرح یہ نظریہ آکسیجن کی پیرا مقناطیسی فطرت کی کامیابی کے ساتھ وضاحت کرتا ہے۔

$$یا \quad KK(\sigma 2s)^2 (\sigma^* 2s)^2 (\pi 2p_x^2 \equiv \pi 2p_y^2)$$

کاربن کا بانڈ آرڈر $2 = \frac{1}{2}(8 - 4)$ ہے اور C_2 ڈایا مقناطیسی ہونا چاہیے۔ حقیقت میں بخارات کی تشکل میں C_2 سالے پائے گئے ہیں۔ یہ بات نوٹ کرنے لائق ہے کہ C_2 میں دو ہر بند دونوں پائی بند پر مشتمل ہوتا ہے کیونکہ دو پائی مالکیولر اریگل میں چار الیکٹران موجود ہوتے ہیں۔ دوسرے زیادہ تر سالموں کے دوہرے بند میں ایک سگما اور دوسرا پائی بند ہوتا ہے۔ اسی طریقے سے N_2 سالے میں بندش پر بحث کی جاسکتی ہے۔

5. آکسیجن سالمہ (O_2): آکسیجن ایٹم کا الیکٹرونی تشکل $1s^2 2s^2 2p^4$ ہے۔ ہر ایک آکسیجن ایٹم کے پاس 8 الیکٹران ہیں لہذا O_2 سالمہ میں 16 الیکٹران ہوں گے۔ O_2 سالمہ کا الیکٹرونی تشکل اس طرح

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



شکل 4.21 B₂ سے Ne₂ تک عناصر کے لیے MO کے بھرائو اور سالمی خصوصیات

ہو جاتا ہے جس کے نتیجہ میں ہائڈروجن دوسرے عنصر X کے مقابلے میں بہت زیادہ برقی مثبت ہو جاتا ہے۔ چونکہ الیکٹران X کی سمت کھسک جاتے ہیں لہذا ہائڈروجن پر ایک جزوی مثبت چارج آ جاتا ہے (δ^+) جبکہ X پر جزوی منفی چارج (δ^-) آ جاتا ہے۔ اس کے نتیجے میں قطبی سالمہ بنتا ہے جس میں برقی سکونی قوت کشش ہوتی ہے اور جسے مندرجہ ذیل طریقہ سے ظاہر کرتے ہیں۔



ہائڈروجن بندی قدر مرکب کی طبعی حالت پر منحصر ہوتی ہے۔ یہ ٹھوس حالت میں سب سے زیادہ ہوتی ہے اور گیس کی حالت میں سب سے کم۔ اس طرح ہائڈروجن بند مرکب کی ساخت اور اس کی خصوصیات پر بہت زیادہ اثر ڈالتا ہے۔

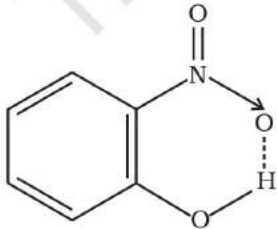
4.9.2 H-بندی کی قسمیں (Types of H-Bonds)

H-بند دو قسم کے ہوتے ہیں

- بین سالمی ہائڈروجن بند (Intermolecular Hydrogen Bond)
- درون سالمی ہائڈروجن بند (Intramolecular Hydrogen Bond)

(I) بین سالمی ہائڈروجن بند: یہ کسی ایک یا مختلف مرکب کے دو مختلف سالموں کے درمیان بنتے ہیں: مثال کے طور پر HF سالمے، الکول یا H_2O وغیرہ کے سالموں میں H-بند۔

(II) درون سالمی ہائڈروجن بند: یہ اس وقت بنتے ہیں جب ہائڈروجن دو بہت زیادہ برقی منفی (F, O, N) ایٹموں کے درمیان ہو جو ایک ہی سالمے کے اندر ہوں۔ مثال کے طور پر O-نائٹرو فینول میں ہائڈروجن، دو آکسیجن کے ایٹموں کے درمیان ہوتی ہے (شکل 4.20)۔



شکل 4.20 O-نائٹرو فینول سالمے میں درون سالمی ہائڈروجن بندش

اسی طرح دوری جدول کے دوسرے دور کے عناصر کے دوسرے ہم نیوکلیائی دو ایٹمی سالموں کے الیکٹران کی تشکل بھی لکھے جاسکتے ہیں۔ شکل 4.21 میں B_2 سے Ne_2 تک عناصر کی سالمی خصوصیات اور مالیکولر آرٹل کا بھراؤ دیا گیا ہے۔ مالیکولر آرٹل کی ترتیب اور ان کے الیکٹرانوں کی تعداد دکھائی گئی ہے۔ بندشی توانائی، بندشی لمبائی، ہائڈ آرڈر، مقناطیسی خصوصیات اور بندش الیکٹران تشکل آرٹل ڈائیگرام کے نیچے دکھائے گئے ہیں۔

4.9 ہائڈروجن بندش (Hydrogen Bonding)

نائٹروجن، آکسیجن اور فلورین انتہائی الیکٹران منفی عناصر ہیں۔ جب یہ شریک گرفت بند بنانے کے لیے ہائڈروجن کے ساتھ جڑتے ہیں تو شریک بندش بند کے الیکٹران زیادہ الیکٹران منفی عنصر کی سمت کھسک جاتے ہیں۔ یہ تجویز مثبت چارج والے ہائڈروجن دوسرے زیادہ الیکٹرونکیو ایٹم کے ساتھ ایک بند بناتے ہیں۔ اس بند کو ہائڈروجن بند کہتے ہیں اور یہ شریک گرفت بند سے کمزور ہوتا ہے۔ مثال کے طور پر HF سالمے میں ایک سالمے کے ہائڈروجن ایٹم اور دوسرے سالمے کے فلورین ایٹم کے درمیان ہائڈروجن بند ہوتا ہے جیسا کہ ذیل میں دکھایا گیا ہے۔



یہاں ہائڈروجن بند ایک پل کی طرح کام کرتا ہے جو ایک ایٹم کو شریک گرفت بونڈ کے ذریعہ اور دوسرے ایٹم کو ہائڈروجن بند کے ذریعہ باندھے رکھتا ہے۔

ہائڈروجن بند کو ٹوٹی ہوئی لائن (---) سے ظاہر کرتے ہیں جبکہ ایک ٹھوس لائن شریک بندش بند کو ظاہر کرتی ہے۔ لہذا ہائڈروجن بندی تعریف ہم اس طرح کر سکتے ہیں کہ یہ وہ قوت کشش ہے جو ایک سالمے کے ہائڈروجن ایٹم کو دوسرے سالمے کے برقی منفی ایٹم (F, O یا N) سے باندھتی ہے۔

4.9.1 ہائڈروجن بند بننے کی وجوہات (Cause of Formation of Hydrogen Bond)

Formation of Hydrogen Bond

جب ہائڈروجن ایک بہت زیادہ برقی منفی عنصر X کے ساتھ جڑتا ہے تو دونوں ایٹموں کے درمیان مشترک الیکٹرانوں کا جوڑا ہائڈروجن سے دور

خلاصہ

برقی مثبت اور برقی منفی آئینوں کے بننے کے عمل میں کوئیل کی پہلی بصیرت کا تعلق آئینوں کے ذریعہ نوبل گیس تشکل حاصل کرنے کے عمل سے تعلق رکھتا ہے۔ آئینوں کے درمیان برقی سکونی کشش ان کے استحکام کا سبب ہوتی ہے۔ اس نے برقی گرفت کے تصور کو پیدا کیا۔

شریک گرفت بندش کا پہلا بیان لیوکس نے دو ایٹموں کے درمیان الیکٹران جوڑے کی شرکت کی اصطلاح میں دیا تھا اور اس نے الیکٹرانوں کے اشتراک کے نتیجے میں متعامل ایٹموں کے نوبل گیس تشکل حاصل کرنے کے عمل کے درمیان تعلق بتایا ہے۔ لیوکس کی نقطہ علامات (Lewis Dot Symbol) ایک دیے ہوئے عنصر کے گرفتی الیکٹرانوں کی تعداد کو ظاہر کرتے ہیں اور لیوکس نقطہ ساختیں سالموں میں بندش کا تصویری اظہار ہیں۔

ایک آئینی مرکب کی شکل مثبت اور آئینوں کے ایک با ترتیب سہ ابعادی مجموعہ کی شکل میں ہوتی ہے جسے کرٹل لیس (Crystal Lattice) کہتے ہیں۔ قلمی ٹھوس میں مثبت اور منفی آئینوں کے درمیان ایک چارج کا توازن ہوتا ہے۔ قلمی جالی لیس تشکیل کی اینتھالپی کے ذریعہ مستحکم ہوتی ہے۔

ایک اکہرا شریک گرفت بند دو ایٹموں کے درمیان ایک الیکٹران جوڑے کے اشتراک سے بنتا ہے، کثیر بند الیکٹرانوں کے دو یا تین جوڑوں کے اشتراک سے بنتے ہیں کچھ عناصر میں الیکٹرانوں کے اضافی جوڑے ہوتے ہیں جو بندش میں حصہ نہیں لیتے۔ ان کو الیکٹرانوں کے تنہا جوڑے کہتے ہیں۔ لیوکس ڈاٹ ساخت سالموں کے ہر ایک ایٹم کے گرد بندشی جوڑے اور تنہا جوڑے کی ترتیب کو دکھاتی ہے۔ کیمیائی بندش سے تعلق رکھنے والے اہم پیرامیٹر جیسے: بندشی لمبائی، بندشی زاویہ، بند اینتھالپی، بانڈ آرڈر اور بند قطبیت مرکبات کی خصوصیات پر با معنی اثرات رکھتے ہیں۔

سالمات اور کثیر ایٹمی آئینوں کی ایک بڑی تعداد ایک لیوکس ساخت سے ظاہر نہیں کی جاسکتی اور یکساں ساختی ڈھانچہ کی بنیاد پر کئی تفصیلات لکھی جاتی ہیں اور یہ سب مل کر سالمہ یا آئین کو ظاہر کرتے ہیں۔ یہ ایک بہت اہم اور انتہائی مفید تصور ہے جو گمگ (Resonance) کہلاتا ہے۔ یہ اشتراکی ساختیں یا مستند شکلیں ایک ساتھ مل کر گمگ مخلوط بناتی ہیں جو سالمہ یا آئین کو ظاہر کرتی ہے۔

وی ایس ای پی آر (VSEPR) ماڈل کا استعمال سالموں کی جیومیٹریائی اشکال کی پیشین گوئی کے لیے کیا جاتا ہے جس کی بنیاد وہ مفروضہ ہے کہ الیکٹران کے جوڑے ایک دوسرے کو دھکیلتے ہیں اور ایک دوسرے سے زیادہ سے زیادہ ممکنہ فاصلے پر رہنے کی کوشش کرتے ہیں۔ اس ماڈل کے مطابق "سالمی جیومیٹری لون پیئر-لون پیئر، لون پیئر-بونڈنگ پیئر اور بونڈنگ پیئر-بونڈنگ پیئر کے درمیان دفع کی بنیاد پر طے کی جاتی ہے" ان دفع قوتوں کی ترتیب کا تسلسل اس طرح ہوتا ہے: $lp-lp > lp-bp > bp-bp$

شریک گرفت بندش کے لیے گرفت بند طرز رسائی (Valence Bond Approach) کا بنیادی تعلق دراصل شریک گرفت بند بننے کے لیے درکار توانیوں سے ہے جس کے متعلق لیوکس اور ویسپار ماڈل خاموش ہیں۔ بنیادی طور پر وی بی نظریہ بند بننے کے عمل پر ارٹل کے انطباق (Overlap) کی اصطلاح میں بحث کرتا ہے۔ مثال کے طور پر دو H ایٹم سے H₂ سالمے کی تشکیل میں دونوں H ایٹم کے 1s ارٹل کے انطباق شامل ہیں جن میں ایک ایک الیکٹران موجود ہے۔ یہ دیکھا گیا ہے کہ جیسے جیسے دونوں ہائڈروجن ایٹم ایک دوسرے کے نزدیک آتے ہیں تو اس نظام کی مضمروتوانائی کم ہو جاتی ہے۔ بین مرکزی متوازن فاصلے بندشی فاصلے پر یہ توانائی کم سے کم ہو جاتی ہے۔ ان نیوکلئیس کو مزید قریب لانے کی کوشش توانائی میں فوری اضافہ کر دے گی اور سالمہ کو غیر مستحکم بنا دے گی۔ انطباق کی وجہ سے نیوکلئیس کے درمیان الیکٹران کی کثافت بڑھ جاتی ہے جو دونوں مرکزدوں کو نزدیک لانے میں مدد کرتی ہے۔ تاہم یہ دیکھا گیا ہے کہ اصل بانڈ اینتھالپی اور بندشی لمبائی کی قدریں محض انطباق سے حاصل نہیں ہوتیں بلکہ دوسرے متغیروں کو بھی اس میں شامل کرنا لازمی ہے۔

کثیر ایٹمی سالموں کی مخصوص شکل کی وضاحت کے لیے پالنگ نے ایٹمی ارٹل کی مخلوطیت کا تصور پیش کیا تھا NH₃، CH₄، BCl₃، BeCl₂ اور H₂O جیسے سالموں کی جیومیٹریائی اشکال کی وضاحت کے لیے N، C، B، Be اور O کے ایٹمی ارٹل sp³، sp² اور sp³ مخلوطیت کا استعمال کیا گیا تھا۔ یہ C₂H₂ اور C₂H₄ جیسے سالموں میں کثیر بند کے بننے کی بھی وضاحت کرتے ہیں۔

مالیکیولر ارٹل کا نظریہ (Molecular Orbital Theory, MO) ایٹمی ارٹل کی ترتیب اور اتحاد کی اصطلاح میں مالیکیولر ارٹل کے بننے کی وضاحت کرتا ہے جو کسی سالے سے مکمل طور پر وابستہ ہوتے ہیں۔ مالیکیولر ارٹل کی تعداد ہمیشہ ان ایٹمی ارٹل کے برابر ہوتی ہے جن سے مل کر وہ بنتے ہیں۔ بانڈنگ مالیکیولر ارٹل نیوکلئس کے درمیان الیکٹران کثافت کو بڑھاتے ہیں اور ان کی توانائی انفرادی ایٹمی ارٹل سے کم ہوتی ہے۔ اینٹی بانڈنگ مالیکیولر ارٹل میں نیوکلئس کے درمیان صفر الیکٹران کثافت کا علاقہ ہوتا ہے اور ان کی توانائی انفرادی ایٹمی ارٹل سے زیادہ ہوتی ہے۔

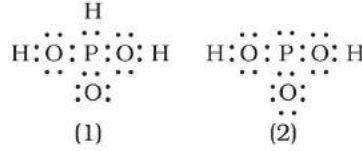
سالموں کا الیکٹرانیک تشکل مالیکیولر ارٹل میں ان کی بڑھتی ہوئی توانائی کی ترتیب میں الیکٹرانوں کو بھرتے ہوئے دکھا جاتا ہے۔ جیسا کہ ایٹموں میں ہوتا ہے، مالیکیولر ارٹل میں بھی الیکٹرانوں کو بھرنے کے لیے پالی کا اصول اخراج (Pauli's Exclusion Principle) اور ہینڈ کا قانون استعمال ہوتا ہے۔ سالے اس وقت مستحکم کہے جاسکتے ہیں جب گرتی مالیکیولر ارٹل میں الیکٹرانوں کی تعداد اینٹی بانڈنگ مالیکیولر ارٹل میں الیکٹرانوں کی تعداد سے زیادہ ہوتی ہے۔

ہائڈروجن بند اس وقت بنتا ہے جب ہائڈروجن اپنے آپ کو دو بہت زیادہ برقی منفی ایٹم، جیسے O، F اور N کے درمیان پاتی ہے۔ یہ تین سالمی (ایک ہی یا مختلف اشیاء کے دو یا دو سے زیادہ سالموں کے درمیان موجود رہتی ہے) یا درون سالمی (ایک ہی سالے میں موجود ہوتی ہے) ہو سکتی ہے۔ ہائڈروجن بونڈ بہت سے مرکبات کی اشکال اور خصوصیات پر گہرا اثر رکھتے ہیں۔

مشقیں

- 4.1 کیمیائی بندش کی تشکیل کی وضاحت کیجیے۔
- 4.2 مندرجہ ذیل عناصر کے ایٹموں کے لیے لیوس ڈاٹ علامات لکھیے:
Mg, Na, B, O, N, Br
- 4.3 مندرجہ ذیل ایٹموں اور آئینوں کے لیے لیوس علامات لکھیے:
H⁻ اور H: A1³⁺ اور A1: S²⁻ اور S
- 4.4 مندرجہ ذیل سالموں اور آئینوں کے لیے لیوس اشکال بنائیے:
HCOOH، CO₃²⁻، BeF₂، SiCl₄، H₂S
- 4.5 آکٹیٹ قاعدے کی تعریف بیان کیجیے۔ اس کی اہمیت اور حدود لکھیے۔
- 4.6 آئیونی بندش بننے کے لیے موافق عوامل لکھیے۔
- 4.7 VSEPR ماڈل کا استعمال کرتے ہوئے مندرجہ ذیل سالموں کی اشکال پر بحث کیجیے:
PH₃، H₂S، AsF₃، SiCl₄، BCl₃، BeCl₂
- 4.8 اگرچہ NH₃ اور H₂O سالموں کی جیومیٹری مستح شدہ ٹیڑا ہیڈرل ہے پانی میں بندشی زاویہ NH₃ سے کم ہے۔ بحث کیجیے۔
- 4.9 بانڈ آرڈر کی اصطلاح میں آپ بندشی لمبائی کو کیسے ظاہر کریں گے۔
- 4.10 بندشی لمبائی کی تعریف بیان کیجیے۔
- 4.11 CO₃²⁻ آئن کے حوالے سے مگم کے اہم پہلوؤں کی وضاحت کیجیے۔

4.12 H_3PO_3 کی مندرجہ ذیل اشکال 1 اور 2 سے ظاہر کیا جاسکتا ہے۔ کیا ان دونوں شکلوں کو H_3PO_3 ظاہر کرنے والی گمک مخلوط کی معیاری اشکال مان سکتے ہیں؟ اگر نہیں تو اس کے لیے وجہ بتائیں۔



4.13 NO_3^- اور NO_2 ، SO_3 کے لیے گمک ساختیں بنائیے۔

4.14 مندرجہ ذیل ایٹموں میں کیپٹائن اور اینائن بنانے کے لیے الیکٹرانوں کی منتقلی کو دکھانے کے لیے لیوکس علامات کا استعمال کیجیے:

(a) K اور S (b) Ca اور O (c) Al اور N

4.15 اگرچہ CO_2 اور H_2O سالے کی شکل خمیدہ اور CO_2 کی خطی ہے۔ ڈائپول مومنٹ کی بنیاد پر وضاحت کیجیے۔

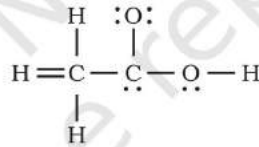
4.16 ڈائپول مومنٹ کی اہمیت/استعمال لکھیے۔

4.17 برقی منفیت کی تعریف بیان کیجیے۔ یہ الیکٹران گین اینتھالپی (Electron Gain Enthalpy) سے کس طرح مختلف ہوتی ہے۔

4.18 قطبی شریک گرفت بندش کی وضاحت مناسب مثالوں کے ذریعہ کیجیے۔

4.19 مندرجہ ذیل سالمات میں ہندکوان کے بڑھتے ہوئے آہنی کردار کی ترتیب میں لکھیے LiF ، K_2O ، N_2 ، SO_2 اور ClF_3

4.20 CH_3COOH کی نیچے دی گئی ڈھانچہ ساخت صحیح ہے، لیکن کچھ بند غلط جگہوں پر دکھائے گئے ہیں ایسیٹک ایسڈ کے لیے صحیح لیوکس ساخت لکھیے۔



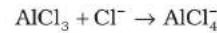
4.21 ٹیٹراہیڈرل جیومیٹری کے علاوہ CH_4 کی دوسری ممکنہ جیومیٹری مربع سطحی (Square Planer) شکل بھی ہے جس میں مربع کے چار کونوں میں چار ہائیڈروجن اور کاربن مرکز میں ہو سکتا ہے۔ CH_4 مربع سطحی کیوں نہیں ہے؟ وضاحت کیجیے۔

4.22 BeH_2 کا ڈائپول مومنٹ صفر کیوں ہے جبکہ $Be-H$ بند قطبی ہوتے ہیں؟ وضاحت کیجیے۔

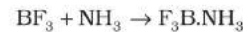
4.23 NH_3 اور NF_3 میں سے کس کا ڈائپول مومنٹ زیادہ ہوگا اور کیوں؟

4.24 ایٹمی رابطہ کی مخلوطیت سے آپ کیا سمجھتے ہیں؟ sp ، sp^2 اور sp^3 مخلوط رابطہ کی شکل بیان کیجیے۔

4.25 مندرجہ ذیل تعامل میں Al ایٹم کی مخلوطیت میں تبدیلی (اگر کوئی ہے تو) بتائیے۔



4.26 مندرجہ ذیل تعامل کے نتیجے میں کیا B اور N ایٹموں کی مخلوطیت میں کوئی تبدیلی ہے؟



4.27 تصویر کی مدد سے C_2H_4 اور C_2H_2 سالموں میں دوہرے اور تہرے بند بننے ہوئے دکھائیے۔

- 4.28 مندرجہ ذیل سالموں میں کل سگما اور پائی بند کی تعداد بتائیے۔
- (a) C_2H_2 (b) C_2H_4
- 4.29 X- محور کو بین مرکزی محور سمجھتے ہوئے بتائیے کہ مندرجہ ذیل میں سے کون سگما بند نہیں بنائے گا اور کیوں؟
- (a) $1s$ اور $1s$ (b) $2p$ اور $1s$ (c) $2p_y$ اور $2p_y$ (d) $2s$ اور $1s$
- 4.30 مندرجہ ذیل سالموں میں کاربن ایٹم کے ذریعہ کون سے مخلوط اورغل استعمال کیے گئے ہیں؟
- (a) $CH_3 - CH_3$ (b) $CH_3 - CH = CH_2$ (c) $CH_3 - CH_2 - OH$ (d) $CH_3 - CHO$
- (e) $CH_3 COOH$
- 4.31 بوٹڈ پیئر الیکٹران اور لون پیئر الیکٹران سے آپ کیا سمجھتے ہیں؟ ہر ایک کی ایک مثال دے کر سمجھائیے۔
- 4.32 سگما اور پائی بانڈ میں فرق بتائیے۔
- 4.33 ویلنس بانڈ تھیوری کی بنیاد پر H_3 سالمے کی بننے کی وضاحت کیجیے۔
- 4.34 مالکیولر آرٹل بنانے کے لیے ایٹمی آرٹل کے خطی اتحاد کے لیے لازمی حالات لکھیے۔
- 4.35 مالکیولر آرٹل تھیوری کی بنیاد پر واضح کیجیے کہ Be_2 سالمہ کیوں نہیں پایا جاتا؟
- 4.36 مندرجہ ذیل نسبتی استحکام کا مقابلہ کیجیے اور ان کی مقناطیسی خصوصیات ظاہر کیجیے۔
- O_2^+ ، O_2^- ، O_2 ، O_2^- (سپر آکسائیڈ)، O_2^{2-} (پیر آکسائیڈ)
- 4.37 آرٹل کے اظہار میں منفی اور مثبت اشاروں کی اہمیت بتائیے۔
- 4.38 PCl_5 میں مخلوطیت کو بیان کیجیے۔ استوائی بانڈ کے مقابلے میں محوری بانڈ کیوں لمبے ہوتے ہیں۔
- 4.39 ہائیڈروجن بانڈ کی تعریف بیان کیجیے۔ یہ ون ڈر والز قوتوں کے مقابلے زیادہ قوی ہوتا ہے یا کمزور؟
- 4.40 اصطلاح بانڈ آرڈر سے کیا مراد ہے؟ N_2 ، O_2 ، O_2^+ اور O_2^- کا بانڈ آرڈر معلوم کیجیے۔