



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 نوئل 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 سالے میں ایٹموں کو باندھنے کے لیے کوئی قوت درکار ہوگی وہ قوت کش 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 نتیجے 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 کوئل۔ لیوس اپروچ، ویلنس شیل الیکٹران پیئر رپلشن تھیوری (VSEPR)، ویلنس بونڈ (VB) تھیوری اور مولیکولر آرٹیل (MO) تھیوری ہیں۔ بندش کے مختلف نظریات کا ارتقاء اور کیمیائی بندش کی نوعیت کی وضاحت کا قریبی تعلق ایٹم کی ساخت، عناصر کا الیکٹرانی 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 کوئل۔ 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 بناسکیں؛
- 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 جیومیٹری کی پیشین گوئی کر سکیں؛
- شریک گرفت بندش کے لیے ویلنس بانڈ طریقہ کار کی وضاحت کر سکیں؛
- شریک گرفت بندش کی سستی خصوصیات کی پیشین گوئی کر سکیں؛
- s، p اور d-ارٹیل کی شمولیت سے باہر ایڈمزیشن (Hybridisation) کی مختلف اقسام کی وضاحت کر سکیں اور سادہ شریک گرفت سالموں کی شکل بناسکیں؛
- آئونیکی دو ایٹمی سالموں کے سالماتی آرٹیل نظریہ (Molecular Orbital Theory) کو بیان کر سکیں؛
- ہائڈروجن بند کے تصور کی وضاحت کر سکیں۔

4.1 کیمیائی بندش کے لیے کو سیل-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 کو سیل 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۔

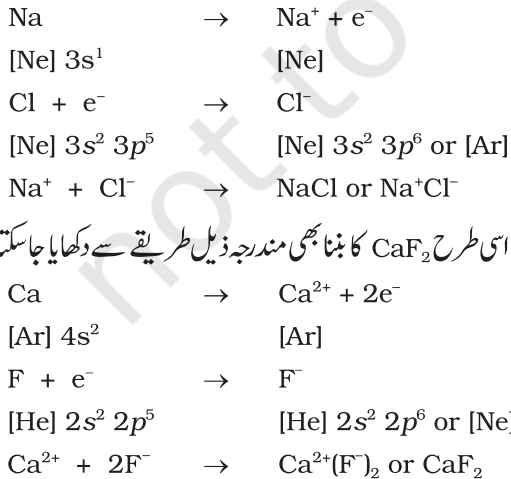
لیوس نے ایٹم کی تصویر پیش کی جس کے مطابق مثبت چارج شدہ 'Kernel' (نیوکلیس اور اندرونی الیکٹران) ہوتا ہے اور بیرونی شیل میں زیادہ سے زیادہ آٹھ الیکٹران سما سکتے ہیں۔ اس نے مزید یہ تصور کیا کہ یہ آٹھ الیکٹران مکعب کے آٹھ کونوں کو گھیرتے ہیں جو 'Kernel' کو گھیرے ہوئے ہے۔ اس طرح سوڈیم کا باہری خول کا واحد 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 جوئے 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 ، Cl_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۔

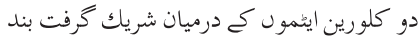
لیوس علامتیں: سالمہ کے بننے کے دوران کیمیائی اتحاد میں صرف باہری الیکٹران ہی حصہ لیتے ہیں اور وہ گرتی الیکٹران (Valence Eletron) کہلاتے ہیں۔ اندرونی الیکٹران کافی محفوظ ہوتے ہیں اور عام طور پر اتحادی عمل میں حصہ نہیں لیتے۔ جی۔ این۔ لیوس، امریکی کیمیادان نے ایٹم میں گرتی الیکٹرانوں کو ظاہر کرنے کا آسان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

Li Be ·B· ·C· ·N· ·O· ·F· ·Ne·
لیوس 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 لیوس 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 کو سیل نے مندرجہ ذیل حقائق کی سمت توجہ دلائی:

- دوری جدول میں بہت زیادہ برقی منفی ہیلوجن اور بہت زیادہ برقی مثبت قلعوی دھاتیں نوبل گیسوں کے ذریعہ جدا کی گئی ہیں۔
 - ہیلوجن ایٹم سے منفی آئن کے بننے اور قلعوی 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 الیکٹران 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۔ $ns2np6$ ۔
 - 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 بنا اس طرح واضح کیا جاسکتا ہے:





- اس طرح پانی اور کاربن ڈی آکسائیڈ میں شریک گرفت بندی تشکیل کو مندرجہ ذیل طریقے سے دکھایا جاسکتا ہے۔



لینگو میٹر (1919) نے لیوس کے اصول مسلمہ کو بہتر بنانے کے لیے آکٹیٹ کے ساکن ملکعی ترتیب کے تصور کو رد کر کے شریک گرفت بند (Covalent Bond) کی اصطلاح پیش کی۔ لیوس-لینگو میٹر نظریے کو کلورین کے سالمہ Cl_2 کے بننے کے عمل کے ذریعہ سمجھا جاسکتا ہے۔ $\text{Cl}-\text{Cl}$ ایٹم جس کا الیکٹرانی تشکل $[\text{Ne}]3s^23p^5$ ہے آرگن (Ar) کے الیکٹرانی 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 سا جھا کر لیتے ہیں، ہر کلورین ایٹم اس جوڑے کو اپنا ایک الیکٹران دے رہا ہے۔ نتیجہ کے طور پر دونوں کلورین ایٹم اپنے نزدیک ترین نوئل گیس (یعنی آرگن) بیرونی شیل آکٹیٹ حاصل کر لیتے ہیں۔

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

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

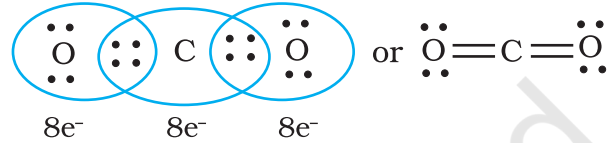
متحد ہونے والے ایٹموں کی کیمیائی علامتیں جانتے ہوئے اور مرکب کے ساختی ڈھانچے کا علم رکھتے ہوئے (جانتے ہوئے یا اندازہ کرتے ہوئے) الیکٹران کی کل تعداد کو ایٹموں کے درمیان کل بند کے تناسب میں مشترک گرفتی جوڑوں کو تقسیم کرنا آسان ہو جاتا ہے۔

عام طور پر کسی سالے/آئن میں برقی منفی ایٹم مرکزی مقام پر رہتا ہے۔ مثال کے طور پر NF_3 اور CO_3^{2-} میں نائٹروجن اور کاربن مرکزی ایٹم ہیں جبکہ کلورین اور آکسیجن کا مقام سروں پر ہے۔

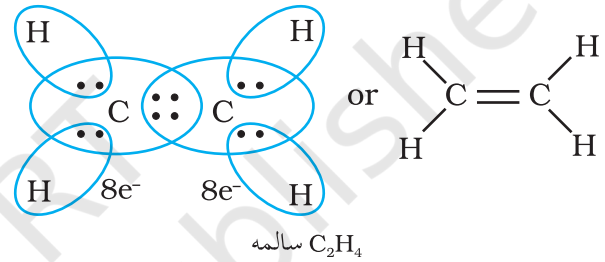
اکہرے بند میں مشترک الیکٹران جوڑوں کی تقسیم کے بعد باقی ماندہ الیکٹرانوں کے جوڑے کثیر بندش میں استعمال ہو جاتے ہیں یا تنہا جوڑے (Lone Pair) کی حیثیت سے باقی رہتے ہیں بنیادی ضرورت تو یہ ہے کہ ہر بندشی ایٹم کے پاس آٹھ الیکٹران ہوں۔

جدول 4.1 میں کچھ سالموں/آینوں کے لیوس 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 سالے میں ہمارے پاس کاربن اور آکسیجن کے درمیان دوہرے بند ہوتے ہیں۔ اسی طرح آنتھین کے سالے میں دو کاربن ایٹم دوہرے بند کے ذریعے بندھے ہوئے ہوتے ہیں۔

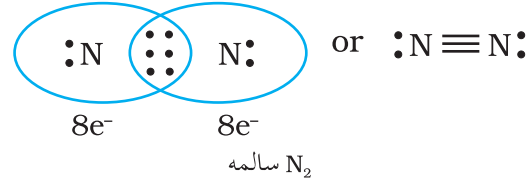


CO_2 سالمے میں دوہرا بند

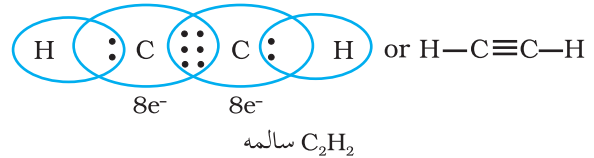


C_2H_4 سالمہ

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



N_2 سالمہ



C_2H_2 سالمہ

4.1.3 سادہ سالموں کا لیوس اظہار (لیوس ساخت)

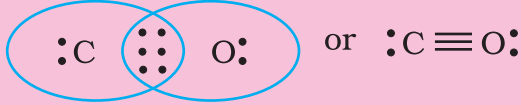
[Lewis Representation of Simple Molecules (the Lewis Structures)]

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

جدول 4.1 کچھ سالموں کے لیوس نمونے

لیوس اظہار	سالمے/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:
	H - H :Ö=Ö: :Ö::Ö ⁺ :Ö: :F-N-F: :F: [:Ö::C::Ö:] ²⁻ :Ö: :Ö::N ⁺ ::Ö::H :Ö:

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

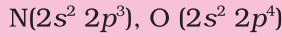


مسئلہ 4.2

نائٹرائٹ آئن کے لیے لیوس ساخت بنائیے۔

حل

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



18 الیکٹران = 5 + (2 × 6) + 1

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



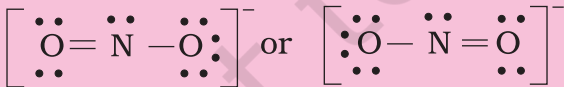
قدم 3: نائٹروجن اور ہر ایک آکسیجن کے درمیان اکہرا بند (ایک مشترک الیکٹران جوڑا) بنائیے کہ آکسیجن ایٹم کا آکٹیٹ مکمل ہو جائے۔ یہ پھر بھی نائٹروجن کے آکٹیٹ کو مکمل نہیں کرے گا اگر باقی دو الیکٹران اس پر تنہا جوڑے کی شکل میں ہوں گے۔



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



or



4.1.4 فارمل چارج (Formal Charge)

لیوس ڈاٹ ساخت عام طور پر سالموں کی اصل شکل کو ظاہر نہیں کرتے۔ کثیر ایٹمی آئنوں میں چارج کل 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

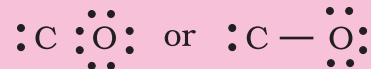
CO کے لیے لیوس ڈاٹ ساخت لکھیے

حل

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

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

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



یہ کاربن کے آکٹیٹ 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 آکٹیٹ قاعدے کے اصول کو پورا کرتا ہے۔

ہمیں یہ سمجھنا چاہیے کہ فارل چارج سالے کے اندر چارج کی علیحدگی کو ظاہر نہیں کرتے۔ لیوس ساخت میں چارج ظاہر کرنے سے صرف سالے کے اندر ویلنس الیکٹرانوں کا مقام معلوم کرنے میں مدد ملتی ہے۔ فارل چارج کسی نوع کی ممکنہ مختلف لیوس 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) فارل چارج ہوں۔ فارل 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۔

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

$$= \left[\begin{array}{c} \text{لیوس ساخت میں کسی ایٹم پر} \\ \text{فارل چارج} \end{array} \right]$$

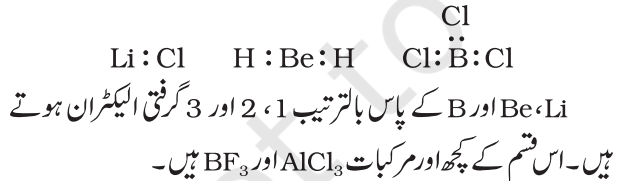
$$\left[\begin{array}{c} \text{آزاد ایٹم پر گرنفی الیکٹرانوں کی} \\ \text{کل تعداد} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{غیر بندشی (تہا جوڑے)} \\ \text{کے الیکٹرانوں کی کل تعداد} \end{array} \right] \\ \left[\begin{array}{c} \text{بندشی الیکٹرانوں} \\ \text{(مشترک) کی کل تعداد} \end{array}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

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 کے 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۔



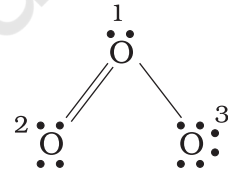
طاق الیکٹران سالمے (Odd-electron Molecules)

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



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

آئیے اوزون سالے کو دیکھتے ہیں۔ O_3 کی لیوس 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

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

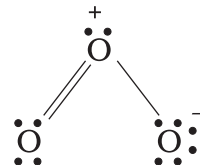
• سرے پر O جسے 2 نشان دیا گیا ہے

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

• سرے پر O جسے 3 نشان دیا گیا ہے

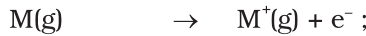
$$= 6 - 6 - \frac{1}{2}(2) = -1$$

لہذا ہم O_3 کو اس کے فارل 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 لیٹس (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 اینتھالپی



الیکٹران گین اینتھالپی



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

”ظاہر ہے کہ آئیونائزیشن ان عناصر میں زیادہ آسانی سے ہوگی جن کی آئیونائزیشن اینتھالپی نسبتاً کم ہوگی اور وہ عناصر جن کی الیکٹران گین اینتھالپی 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 کے کیٹ آئن بناتا ہے۔

قلمی حالت میں آئیونائزیشن میں کیٹ آئن اور این آئن آپس میں کولمبی باہمی عمل توانائیوں (Coulombic Interaction

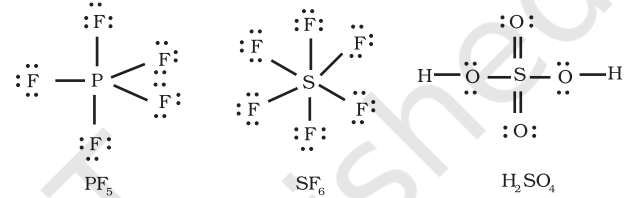
Energies) کے ذریعہ جڑ کر سہ ابعادی ترتیب میں پائے جاتے ہیں۔ یہ مرکبات مختلف قلمی ساختوں میں کرسٹلائز ہوتے ہیں جس کا انحصار آئن کے سائز، پیکنگ کی ترتیب اور دوسرے عوامل پر ہوتا ہے۔ مثال کے طور پر NaCl، سوڈیم کلورائیڈ کا قلمی ڈھانچہ نیچے دکھایا گیا ہے۔

توسیعی آکٹیٹ (The Expanded Octet)

دوری جدول میں تیسرے دور اور اس کے بعد کے عناصر میں 3s- اور 3p- اورٹل کے علاوہ بندش کے لیے 3d اورٹل 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۔

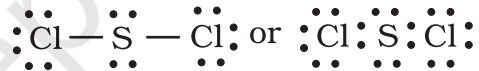
ایسے مرکبات کی چند مثالیں H_2SO_4 ، SF_6 ، PF_5 اور بہت سے

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 گیسیں (مثلاً زینان اور کرپٹان) بھی آکسیجن اور فلورین کے ساتھ مل کر بہت سے مرکبات جیسے KrF_2 ، XeF_2 ، $XeOF_2$ وغیرہ بناتی ہیں۔
- یہ نظریہ سالمے 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 آئیونائزیشن گرتی بند

(Ionic or Electrovalent Bond)

آئیونائزیشن کے سلسلے میں کوہل اور لیوٹس ٹریٹمنٹ سے یہ معلوم ہوتا ہے کہ بنیادی طور پر آئیونائزیشن بننے کا انحصار مندرجہ ذیل پر ہوگا۔

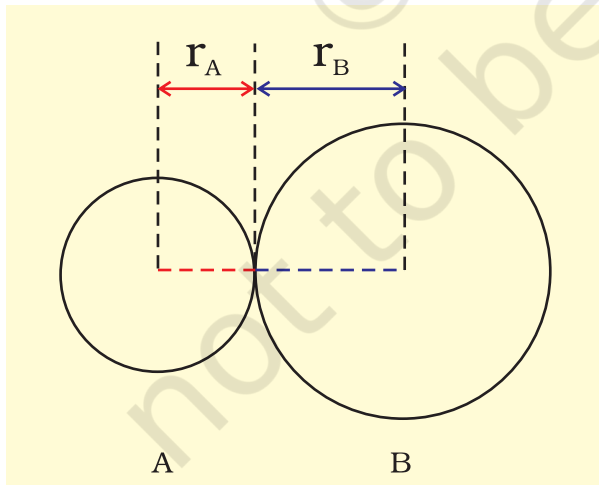
اس عمل میں مخالف چارج والے آئن کے درمیان قوت کشش اور یکساں چارج والے آئنوں کے درمیان دافع قوت شامل ہوتی ہے۔ چونکہ ٹھوس قلم سہ ابعادی ہوتے ہیں اس لیے یہ ممکن نہیں ہوتا کہ لیٹس کی انتھالپی براہ راست قوت کشش اور دافع قوت کے باہمی عمل سے معلوم کی جاسکے۔ کرسٹل جیومیٹری سے تعلق رکھنے والے عوامل کو بھی اس میں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

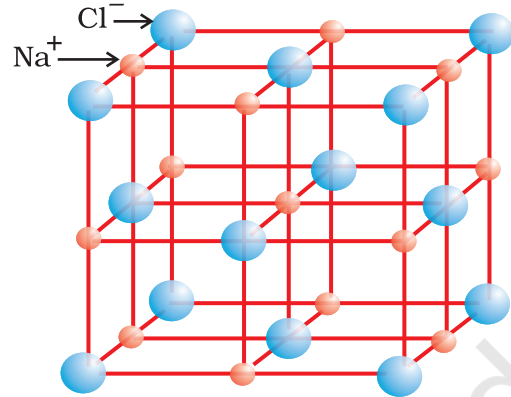
شریک گرفت نصف قطر کی پیمائش اندازاً ایک ایٹم کے مرکز کا نصف قطر ہوتی ہے جو بندشی حالت میں برابر والے ایٹم کے مرکز کے تعلق میں ہوتا ہے۔ شریک گرفت نصف قطر ایک ہی سالے میں شریک گرفت بند سے بندھے ہوئے دو یکساں ایٹموں کے درمیانی فاصلے کا نصف حصہ ہوتا ہے۔



شکل 4.1 شریک گرفت سالمے AB میں بندشی لمبائی

$R = r_A + r_B$ (بندشی لمبائی ہے اور r_A اور r_B ایٹم A

اور B کے شریک بندش نصف قطر ہیں)



چٹانی نمک کی ساخت

آپنی ٹھوس میں الیکٹران گین انتھالپی اور آئیونائزیشن انتھالپی کی کل مقدار مثبت ہو سکتی ہے لیکن قلمی ساخت کرسٹل لیٹس بننے کے دوران خارج ہونے والی توانائی کی وجہ سے ہی مستحکم ہوتا ہے۔ مثال کے طور پر $\text{Na}^+(\text{g})$ سے $\text{Na}(\text{g})$ بننے کے دوران آئیونائزیشن انتھالپی $495.8 \text{ kJ mol}^{-1}$ ہوتی ہے؛ جبکہ $\text{Cl}(\text{g}) + \text{e}^- \rightarrow \text{Cl}^-(\text{g})$ تبدیلی کے لیے الیکٹران گین انتھالپی صرف $-348.7 \text{ kJ mol}^{-1}$ ہی ہے۔ دونوں کی کل توانائی $\text{NaCl}(\text{s})$ ، $147.1 \text{ kJ mol}^{-1}$ کی لیٹس تشکیل کی انتھالپی (-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 آئیون مرکب لیٹس استحکام کے لیے کیفیت پیمائش اس کی لیٹس تشکیل کی انتھالپی کے ذریعہ فراہم کیے جاتے ہیں نہ کہ صرف کسی حالت میں آئیون انواع کے گرد الیکٹرانوں کے آکٹیٹ حاصل کر کے۔

چونکہ لیٹس انتھالپی آئیون 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 انتھالپی (Lattice Enthalpy)

کسی آئیون ٹھوس کی لیٹس انتھالپی کی تعریف اس توانائی کی شکل میں کی جاتی ہے جو ایک مول ٹھوس آئیون مرکب کو اس کے گیس آئنوں میں مکمل طور پر علیحدہ کرنے کے لیے درکار ہوتی ہے۔ مثال کے طور پر NaCl کی لیٹس انتھالپی 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 لائٹنا ہی فاصلے تک علیحدہ کرنے کے لیے 788 kJ توانائی کی ضرورت ہوتی ہے۔

جدول 4.2 کچھ اکہرے، دوہرے اور تہرے بند کی اوسط بندش لمبائیاں

بند کی قسم	شریک بندش 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 بندش لمبائیاں

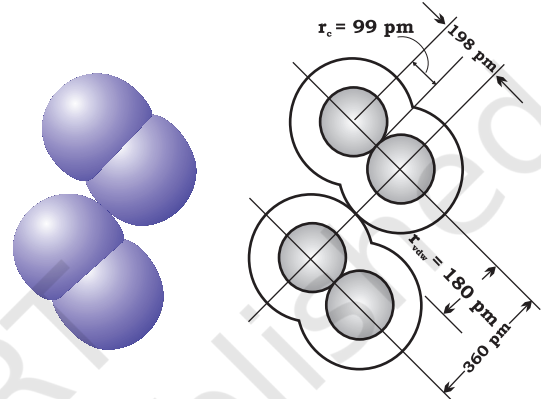
بندش لمبائی (pm)	سالمہ
74	H ₂ (H - H)
144	F ₂ (F - F)
199	Cl ₂ (Cl - Cl)
228	Br ₂ (Br - Br)
267	I ₂ (I - I)
109	N ₂ (N ≡ N)
121	O ₂ (O ≡ O)
92	HF (H - F)
127	HCl (H - Cl)
141	HBr (H - Br)
160	HI (H - I)

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

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

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

ون ڈر والز نصف قطر ایٹم کے پورے سائز کو ظاہر کرتا ہے جس میں غیر بندش 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۔

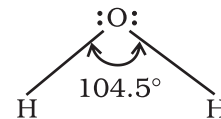


شکل 4.2 کلورین سالمے میں شریک گرفت اور ون ڈر والز نصف قطر اندرونی دائرے کلورین ایٹم کے سائز کے مطابق ہیں (r_{vdw}) اور بالترتیب ونڈر والز اور شریک گرفت نصف قطر ہیں)

جدول 4.2 میں کچھ عام اکہرے، دوہرے اور تہرے بند کی اوسط بندش لمبائیاں دکھائی گئی ہیں۔ کچھ عام سالموں کی بندش 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 بندش زاویہ (Bond Angle)

اس کی تعریف اس زاویہ کی طرح کی جاتی ہے جو کسی سالمے/پیچیدہ آئن کے مرکزی ایٹم اور بندش الیکٹران کا جوڑا رکھنے والے اربٹل کے درمیان ہوتا ہے۔ بندش زاویے کو ڈگری میں ظاہر کرتے ہیں جو اسپیکٹر واسکوپک طریقوں سے تجرباتی طور پر معلوم کیے جاسکتے ہیں۔ یہ ہمیں کسی سالمے/پیچیدہ 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 بندش 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 بندی 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 $\Delta_a H^\circ = 946 \text{ kJ mol}^{-1}$ ہے جو ایک دواہنی سالمہ کے لیے سب سے زیادہ ہوتی ہے۔ آکسو الیکٹران 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 CO ، NO^+ 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 لگ سائٹیں (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۔

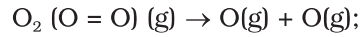
دونوں ساختوں میں ایک O - O اکہرا بند اور ایک O = O بند ہر اکہرا بند پر O-O اور O=O بندش لمبائیاں بالترتیب 148 pm اور 121 pm ہوتی ہیں۔ تجرباتی طور پر معلوم کی گئی O - O بندش لمبائیاں O_3 میں برابر ہوتی ہیں (128 pm)۔ لہذا O_3 سالمے میں O-O بند اکہرے اور دوسرے بند کے درمیان ہوتے ہیں۔ ظاہر ہے کہ انہیں مندرجہ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

4.3.3 بانڈ اینتھالپی (Bond Enthalpy)

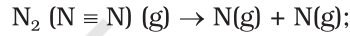
اس کی تعریف اس توانائی کی مقدار کی شکل میں کی جاتی ہے جو کسی حالت میں دو ایٹموں کے درمیان ایک مخصوص قسم کے 1 مول کو توڑنے میں خرچ ہوتی ہے۔ بانڈ اینتھالپی کی اکائی kJ mol^{-1} ہوتی ہے۔ مثال کے طور پر ہائیڈروجن سالمے میں H-H بانڈ اینتھالپی $435.8 \text{ kJ mol}^{-1}$ ہوتی ہے۔



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

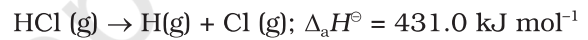


$$\Delta_a H^\circ = 498 \text{ kJ mol}^{-1}$$

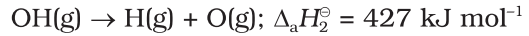
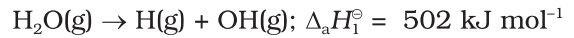


$$\Delta_a H^\circ = 946.0 \text{ kJ mol}^{-1}$$

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



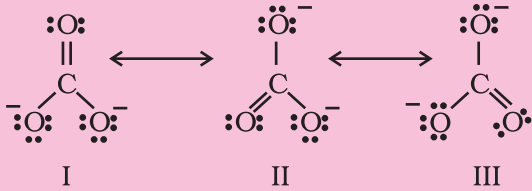
کثیر ایٹمی سالموں میں بندش توانائی کی پیمائش زیادہ پیچیدہ ہوتی ہے۔ مثال کے طور پر H_2O سالمے میں دو O - H بند کو توڑنے میں یکساں توانائی کی ضرورت نہیں ہوتی۔



$\Delta_a H^\circ_2$ کی قیمتوں کا فرق بتاتا ہے کہ دوسرے O - H بند میں کیمیائی ماحول تبدیل ہونے کی وجہ سے کچھ تبدیلی آجاتی 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 بندش افتراق اینتھالپی کی اصطلاح استعمال کی جاتی ہے۔ اسے حاصل کرنے کے لیے کل بندش 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

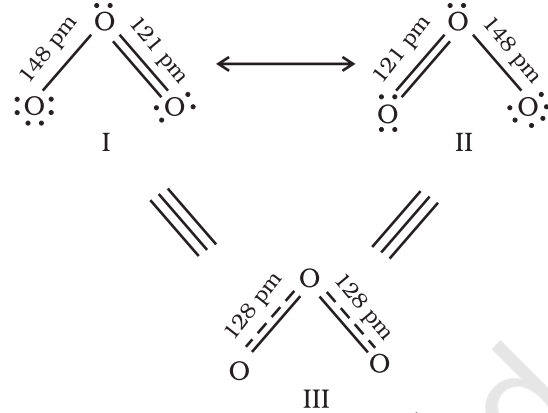
CO_2 میں کاربن اور آکسیجن کے درمیان بندشی لمبائی تجرباتی طور پر 115 pm معلوم کی گئی ہے۔ کاربن اور آکسیجن کے درمیان دوہرے بند (C = O) اور کاربن اور آکسیجن کے درمیان تہرے بند (C ≡ O) کی لمبائی عام طور پر بالترتیب 121 pm اور 110 pm ہوتی ہے۔ CO_2 میں کاربن اور آکسیجن کے درمیان بندشی لمبائی 115 pm، C = O 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 دکھاتی 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 بچنے 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 تیرے 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۔

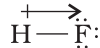
حل

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) = (μ) ڈائپول مومنٹ
ڈائپول مومنٹ کو عام طور پر ڈبائی اکائی (D) سے ظاہر کرتے ہیں۔
کنورژن فیکٹر مندرجہ ذیل ہے:

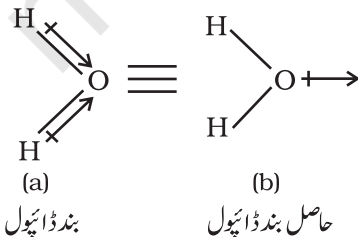
$$1 D = 3.33564 \times 10^{-30} \text{ C m}$$

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 دُم منفی مرکز کی طرف اور سر مثبت مرکز کی طرف ہوتا ہے۔ لیکن کیمیائی ڈائپول مومنٹ کی موجودگی کو صلیبی تیر (→+) کے ذریعے ظاہر کیا جاتا ہے جو سالمے 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 سالمے 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 سالمے میں مختلف بندشوں کے مکانی تنظیم پر بھی منحصر ہوتا ہے۔ ایسی حالت میں سالمے کے ڈائپول مومنٹ مختلف بند کے ڈائپول مومنٹ کا ویکٹر حاصل جمع ہوتا ہے۔ مثال کے طور پر H₂O کا سالمہ جس کی ساخت خمیدہ ہوتی ہے O-H کے دو بندوں کے درمیان 104.5° کا زاویہ ہوتا ہے۔ 6.17 × 10⁻³⁰ C m کا کل ڈائپول (ID = 3.33564 × 10⁻³⁰ C m) دو OH بند کے ڈائپول مومنٹ کا حاصل ہوتا ہے۔

پیٹر ڈبائی، ڈچ کیمیادان جسے 1936 میں ایکسریڈیفریکشن 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 O₃ 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:

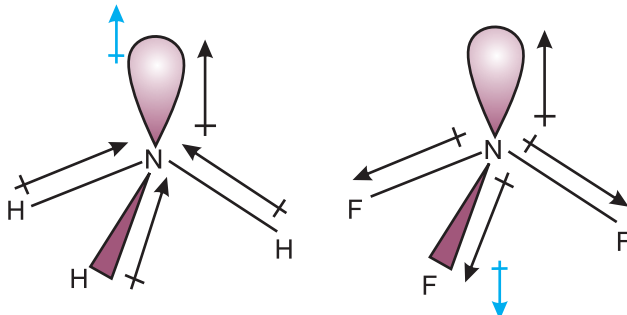
- مستند اشکال کی کوئی حقیقت نہیں ہوتی۔
- کوئی سالمہ ایک لمحہ کے لیے ایک مستند شکل اور دوسرے لمحے میں دوسری مستند شکل میں نہیں پایا جاتا۔
- مستند اشکال کے درمیان ایسا کوئی توازن نہیں ہوتا جیسے کہ ٹوٹو میرزم میں ٹوٹو میرک (کینو اور اینول) شکلوں میں دیکھتے ہیں۔
- سالمے کی ایک ہی ساخت ہوتی ہے جو مستند اشکال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

4.3.6 بند کی قطبیت (Polarity of Bonds)

سوفیصد 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 F₂ یا N₂، Cl₂، O₂، H₂ 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۔



NH₃ میں حاصل ڈائپول مومنٹ
 $4.90 \times 10^{-30} \text{ C m} =$

NF₃ میں حاصل ڈائپول مومنٹ
 $0.80 \times 10^{-30} \text{ C m} =$

- 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 الیکٹرانی تشکل عام عبوری دھات کی طرح $d^n ns^0$ (n - 1) ہوگا اس سے وہ زیادہ قطبی ہوگا جس کا الیکٹرانی تشکل نوبل گیس $ns^2 np^6$ ، خاص قلوبی اور قلوبی ارضی دھاتوں کے دھاتی کیٹ آئن کی طرح ہوگا۔

- کیٹ آئن الیکٹرانی چارج کو اپنی سمت کھینچ کر این آئن کی تقطیب کرتا ہے اور اس طرح دونوں کے درمیان الیکٹرانی چارج بڑھ جاتا ہے۔ بالکل یہی شریک گرفت بند میں ہوتا ہے۔ یعنی نیوکلیس کے درمیان الیکٹرانی چارج کثافت بڑھ جاتی ہے۔ کیٹ آئن کی تقطیب کی صلاحیت، این آئن کی تقطیب کی صلاحیت اور این آئن کے مسخ آئن سازی ہونے کی حد وہ عوامل ہیں جو آئنی بند کی فی صد شریک گرفت خصوصیت کا تعین کرتے ہیں۔

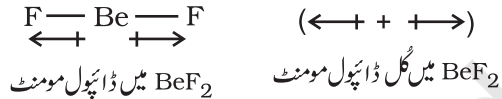
4.4 ویلنس شیل الیکٹران پیئر ریپلوٹن تھیوری (VSEPR)

جیسا کہ پہلے وضاحت کی جا چکی ہے، لیئس 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

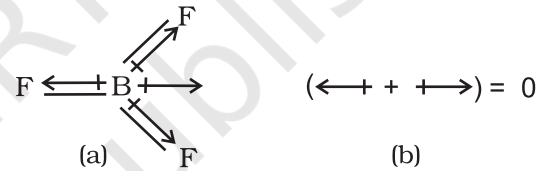
کل ڈائپول مومنٹ $1.85 \text{ D} = \mu$

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

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 ($4.90 \times 10^{-30} \text{ C m}$) سے NF₃ ($0.8 \times 10^{-30} \text{ C m}$)۔ 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 چندہ سالمات کے ڈائپول مومنٹ

سالمے کی قسم	مثال	ڈائپول مومنٹ $\mu(D)$	جیومیٹری
سالمہ (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)
سالمہ (AB ₂)	H ₂ O	1.85	خمیدہ (Bent)
	H ₂ S	0.95	خمیدہ (Bent)
	CO ₂	0	خطی (linear)
سالمہ (AB ₃)	NH ₃	1.47	ثرائی گونل بائپیرامڈل (Trigonal-pyramidal)
	NF ₃	0.23	ثرائی گونل بائپیرامڈل (Trigonal-pyramidal)
	BF ₃	0	ثرائی گونل پلینر (Trigonal-planar)
سالمہ (AB ₄)	CH ₄	0	ٹیٹراہیڈرل (Tetrahedral)
	CHCl ₃	1.04	ٹیٹراہیڈرل (Tetrahedral)
	CCl ₄	0	ٹیٹراہیڈرل (Tetrahedral)

- 1940 میں ایٹم کے گرفت خول میں الیکٹران جوڑوں کے درمیان دافع باہمی عمل کی بنیاد پر سادہ نظریہ پیش کیا۔ اس کو ٹیہوم 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 گرفت خول کے الیکٹران جوڑوں (بندش یا غیر بندش) کی تعداد پر ہوتا ہے۔
- گرفت خول میں الیکٹران کے جوڑے ایک دوسرے کو دھکیلتے ہیں کیونکہ ان الیکٹران بادلوں پر متنی چارج ہوتا ہے۔
- الیکٹرانوں کے یہ جوڑے اسپیس میں ایسا مقام حاصل کرنے کی کوشش کرتے ہیں جہاں قوت دافع کم سے کم ہو لہذا ان کے درمیان فاصلہ زیادہ سے زیادہ ہوگا۔
- گرفت خول کو ایک کرہ (Sphere) کی طرح مانا جاتا ہے جہاں الیکٹران اس کی کروی سطح پر ہوتا ہے اور ایک دوسرے سے زیادہ سے زیادہ فاصلے پر ہوتا ہے۔
- کثیر بند کو ایک واحد الیکٹران جوڑے کی طرح سمجھا جاتا ہے اور کثیر بند کے دو یا تین الیکٹران جوڑوں کو واحد عظیم جوڑا سمجھتے ہیں۔
- VSEPR ماڈل ان ساختوں میں استعمال ہو سکتا ہے جہاں دو یا دو سے زیادہ ہمک ساختیں ایک سالمے کو ظاہر کرتی ہیں۔
- الیکٹران جوڑوں کا دافع باہمی عمل مندرجہ ذیل ترتیب میں گھٹتا ہے: $(bp) > (lp) > (lp) > (lp)$ تنہا جوڑا $(lp) > (lp)$ - بندش جوڑا - بندش جوڑا $(bp) > (lp) > (lp) > (lp)$

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 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 اینتھالپی اور بندش 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 اینٹوں کے درمیان ایک الیکٹران جوڑے کے اشتراک سے تنہا شریک بندش بند بنتا ہے۔ یہ کثیر اینٹی 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 کوانٹم میکینیکل اصولوں کی بنیاد پر دو اہم نظریات پیش کیے گئے ہیں۔ یہ ویلنس بانڈ نظریہ اور مولیکیولر آرٹل نظریات ہیں۔

ویلنس بانڈ تھیوری ہیلر اور لنڈن نے 1927 میں پیش کی اور پاننگ اور دیگر سائنسدانوں نے اسے مزید آگے بڑھایا۔ ویلنس بانڈ تھیوری پر بحث عناصر کے الیکٹران کی شکل (اکائی 2)، اینٹی آرٹل کا اوور لپنگ کرائیئر یا اینٹی 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 کی اور غیر ریاضیاتی طرز عمل کی اصطلاح میں ہی کی گئی ہے۔ ابتدا میں آئیے ہائبرڈوجن سالے کے بننے کے عمل کو دیکھتے ہیں جو تمام سالموں میں سب سے سادہ ہے۔

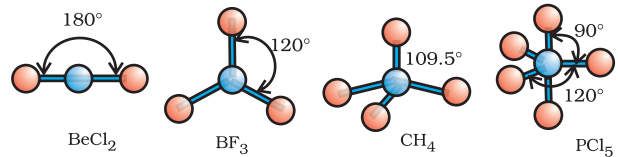
نیوہوم اور گلسپی (1957) نے VSEPR ماڈل کو الیکٹرانوں کے تنہا جوڑے اور بندش جوڑے کے درمیان اہم فرق کو سمجھا کر بہتر بنانے کی کوشش کی۔ الیکٹرانوں کا تنہا جوڑا مرکزی ایٹم پر ہی قائم رہتا ہے جبکہ ہر گرتی جوڑا دو اینٹوں کے درمیان مشترک ہوتا ہے۔ نتیجہ کے طور پر سالے میں تنہا الیکٹرانوں کا جوڑا الیکٹرانوں کے 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 بندش زاویوں میں تبدیلی اور ان کی مثالی شکلوں میں فرق پائے جاتے ہیں۔

”VSEPR نظریے کے مطابق سالموں کی جیومیٹری کی 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۔

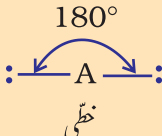
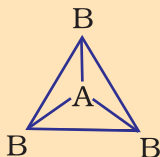
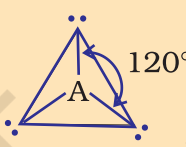
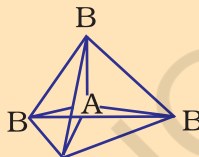
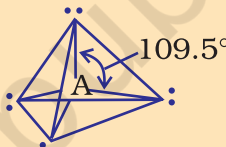
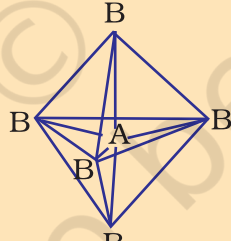
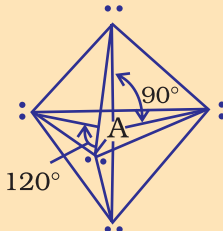
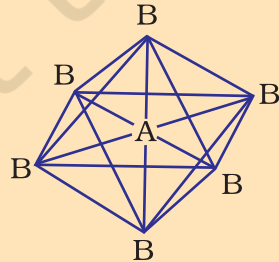
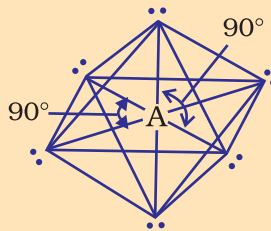
جدول 4.8 ان وجوہات کی وضاحت کرتی ہے جو سالموں کی جیومیٹری مسخ ہونے کے لیے ذمہ دار ہیں۔

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 اینٹوں کی ترتیب خطی (Linear)، ٹرائی گونل پلینر ٹریہیڈرل، ٹرائی گونل بائی پرائمڈل اور آکٹاہیڈرل ہے۔ اس طرح کی ترتیب $(AB_3) BF_3$ اور $(AB_4) PCl_4$ اور $(AB_5) PCl_5$ جیسے سالموں میں دیکھنے کو ملتی ہے اور انہیں نیچے گیند اور چھڑ ماڈل کے ذریعہ دکھایا گیا ہے۔

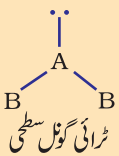
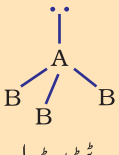
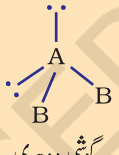
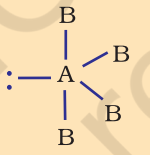
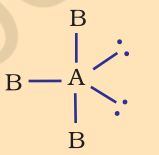
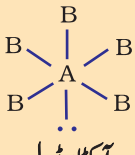


شکل 4.6 ان سالمات کی شکل جن کے مرکزی ایٹم پر تنہا جوڑا نہیں ہے

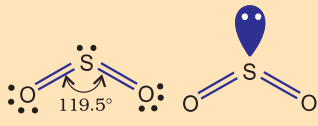
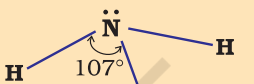
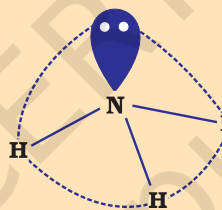
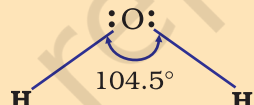
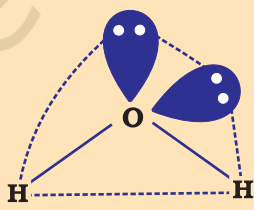
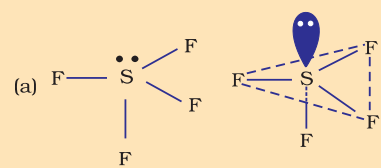
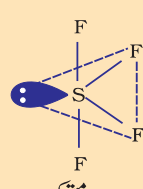
جدول 4.6 ان سالموں کی جیومیٹری جن کے مرکزی ایٹم پر لون پیئر الیکٹران نہیں ہوتے

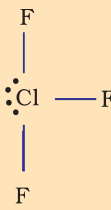
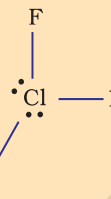
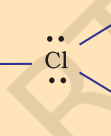
مثالیں	سالمے کی جیومیٹری	الیکٹران جوڑوں کی ترتیب	الیکٹران جوڑوں کی تعداد
$\text{BeCl}_2, \text{HgCl}_2$	$\text{B}-\text{A}-\text{B}$ خطی	180°  خطی	2
BF_3	 ثرائی گونل پلیز	 ثرائی گونل پلیز	3
$\text{CH}_4, \text{NH}_4^+$	 ٹیٹراہیڈرل	 ٹیٹراہیڈرل	4
PCl_5	 ثرائی گونل بائی پیرامڈل	 ثرائی گونل بائی پیرامڈل	5
SF_6	 آکٹاہیڈرل	 آکٹاہیڈرل	6

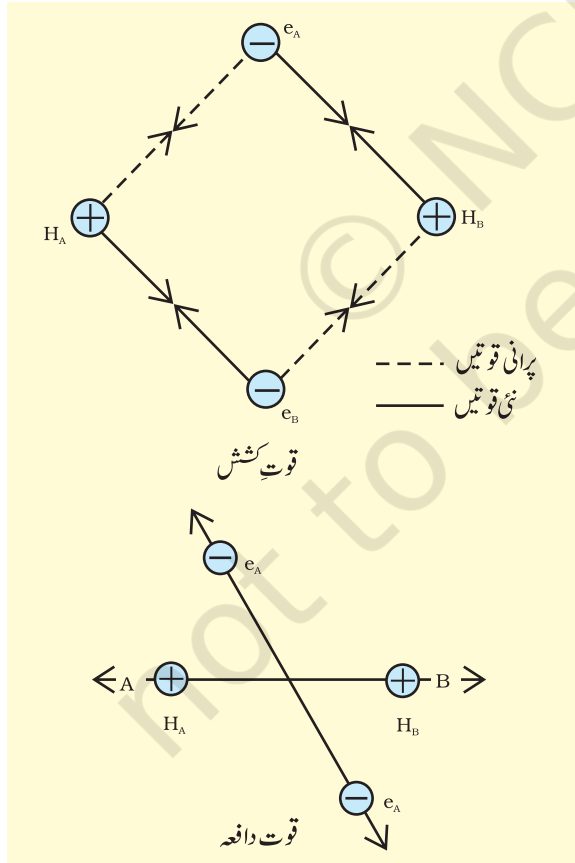
جدول 4.7 کچھ سادہ سالموں/آینوں کی شکل (جیومیٹری) جن کے مرکزی ایٹم پر ایک یا ایک سے زیادہ تنہا الیکٹرانوں کا جوڑا ہے۔

مثال	جیومیٹری	الیکٹران جوڑوں کی ترتیب	تنہا جوڑوں کی تعداد	بندشی جوڑوں کی تعداد	سالموں کی قسم
SO_2, O_3	خمیدہ	 ثرائی گول سطحی	1	2	AB_2E
NH_3	ثرائی گول پیرامڈل	 ٹریگراہیڈرل	1	3	AB_3E
H_2O	خمیدہ	 سہ گوشہ دوہری	2	2	AB_2E_2
SF_4	سی سا	 سہ گوشہ ہری	1	4	AB_4E
ClF_3	شکل-T	 ثرائی گول بائی پیرامڈل	2	3	AB_3E_2
BrF_5	مربع پیرامڈ	 آکٹاہیڈرل	1	5	AB_5E
XeF_4	مربع سطحی	 آکٹاہیڈرل	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	تنہا جوڑوں کی تعداد	الیکٹرانوں کی ترتیب	اشکال	حاصل شدہ شکل کی وجوہات
AB ₂ E	4	1		خمیدہ	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 یہ نسبت بوئنڈ پیئر - بوئنڈ پیئر قوت دافعہ کے۔ لہذا زاویہ 120° سے گھٹ کر 119.5° رہ گیا۔
AB ₃ E	3	1	 	ٹرائی کونل بائی پیرامیڈل	اگر یہاں lp کی جگہ bp ہوتا تو اس کی شکل ٹیٹراہیڈرل ہوتی لیکن ایک تنہا جوڑا موجود ہے لہذا lp - bp قوت دافعہ (جو bp - bp قوت دافعہ سے زیادہ ہے) کی وجہ سے گرنی جوڑوں کے درمیان زاویہ 109.5° سے گھٹ کر 107° ہو گیا ہے۔
AB ₂ E ₂	2	2	 	خمیدہ	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 جو bp - bp سے زیادہ ہے لہذا زاویہ 109.5° سے گھٹ کر 104.5° رہ گیا۔
AB ₄ E	4	1	 	سی-سی	(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۔

سالمے کی قسم	بندشی جوڑوں کی تعداد	تہا جوڑوں کی تعداد	الیکٹرانوں کی ترتیب	شکل	حاصل شدہ شکل کی وجوہات
AB_3E_2	3	2	(a) 	شکل -T	(a) میں 1p استوائی مقام پر ہیں لہذا lp-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)
			(b) 		
			(c) 		



شکل 4.7 H_2 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 $N_A - e_A$

$$-N_B - e_B \text{ اور } e_A$$

(ii) ایک ایٹم کے نیوکلیس اور دوسرے ایٹم کے الیکٹران کے درمیان

$$\text{یعنی } N_A - e_B, N_A - e_B$$

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)۔

لیکٹرانوں کے جوڑے بنتے ہیں۔ اور لیپ کی مقدار شریک گرفت بندی توانائی کو طے کرتی ہے۔ عام طور پر جتنی اور لیپنگ ہوگی دو ایٹموں کے درمیان بننے والا بند اتنا ہی مضبوط ہوگا۔ لہذا ارٹھل اور لیپ کے تصور کے مطابق دو ایٹموں کے درمیان شریک گرفت بندی تشکیل بندش خول میں موجود متضاد اسپن والے لیکٹرانوں 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 بندی تشکیل ایٹموں کے ارٹھل کی اور لیپنگ کے نتیجے میں ہوتی ہے۔ ہائڈروجن کا سالمہ دو H ایٹموں کے 1s ارٹھل کی اور لیپنگ کی وجہ سے ہوتا ہے۔

کثیر ایٹمی سالموں جیسے CH_4 ، NH_3 اور H_2O میں بندی 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 پیرامیڈل کیوں ہوتی ہے؟

ویلنس بانڈ تھیوری CH_4 ، NH_3 اور H_2O جیسے کثیر ایٹمی سالموں میں بندی شکل، ان کے بننے کے عمل اور سمتی خصوصیات کی وضاحت ایٹمی ارٹھل کی اور لیپنگ اور ہائبرڈائزیشن کی اصطلاح میں کرتی ہے۔

4.5.3 ایٹمی ارٹھل کی اور لیپنگ

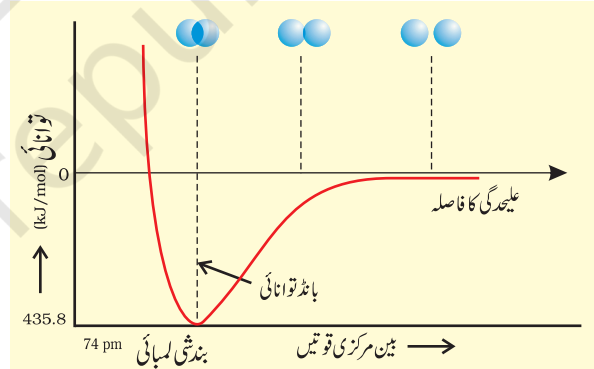
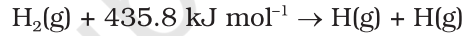
(Overlapping of Atomic Orbitals)

جب ارٹھل 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 ارٹھل کے نشان (ہیٹ) اور سمت یکساں ہونے چاہئیں۔ اسے مثبت اور لیپ کہتے ہیں۔ s اور p ارٹھل کے متعدد 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۔ نتیجے کے طور پر دونوں ایٹم ایک دوسرے کے نزدیک آتے ہیں اور ان کی مضر 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 بندہ 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 بانڈ اینتھالپی کہلاتی ہے جو شکل 4.8 میں دکھائے گئے منحنی کی سب سے نچی 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 مضر 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 ارٹھل 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 ارٹھل کے مابین جڑی دخل اندازی ہوتی ہے۔ ایٹمی ارٹھل کی یہ جڑی دخل اندازی ایٹمی ارٹھل 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 متشکل ہوتے ہیں اور کسی سمت بھی اورلیپ کر سکتے ہیں۔ لہذا چوتھے C-H بند کی سمت واضح نہیں کی جاسکتی۔ یہ بیان HCH ٹیٹراہیڈرل زاویہ 109.5° سے مطابقت نہیں رکھتا۔ صاف ظاہر ہے کہ صرف ایٹمی اورٹل کی اورلیپ 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 اورلیپنگ کی قسمیں اور شریک گرفت بند کی فطرت

(Types of Overlapping and Nature of Covalent Bonds)

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

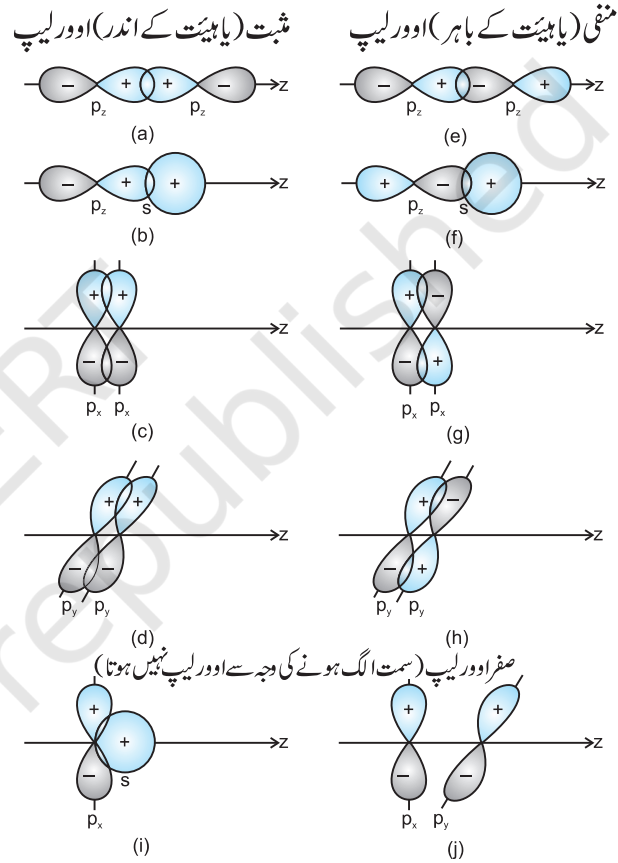
- سگما (σ) بند اور (ii) پائی (π) بند
- سگما (σ) بند: اس قسم کا شریک گرفت بند بندشی اورٹل کے سروں سے سروں کی اورلیپنگ کے نتیجہ میں بنتے ہیں جو بین مرکزی محور کے ساتھ ہوتے ہیں۔ اس کو ہیڈ آن (Head On) یا محوری اورلیپ بھی کہتے ہیں۔ یہ ایٹمی اورٹل کے مندرجہ ذیل کسی بھی ایک اتحادی عمل سے بن سکتے ہیں۔

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



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

یکساں طور سے ہوتا ہے۔ ہم جانتے ہیں کہ CH_4 ، NH_3 اور H_2O سالموں کی اشکال بالترتیب ٹیٹراہیڈرل، پیرامیڈل اور خمیدہ ہوتی ہیں۔ یہ ایک دلچسپ بات ہوگی اگر ہم VB تصوری کا استعمال کرتے ہوئے یہ معلوم کریں کہ کیا ان جیومیٹرک اشکال کو اورٹل اورلیپ کی اصطلاح میں واضح کیا جاسکتا ہے؟



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

آئیے ہم پہلے CH_4 (میتھین) 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 اورلیپ 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 اورلیپ 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 ہوسکیں۔ 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 ایٹمی 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 ایٹمی آرٹل کے مقابلے میں مخلوط آرٹل زیادہ اثر دار ہوتے ہیں۔
- 4- یہ مخلوط آرٹل اسپیس 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 سائلے کی جیومیٹری کو ظاہر کرتی ہے۔

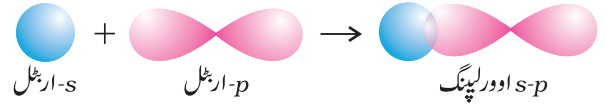
مخلوطیت کے لیے اہم شرائط

- (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 گرفت خول کے بھرے ہوئے آرٹل بھی مخلوطیت میں حصہ لیتے ہیں۔

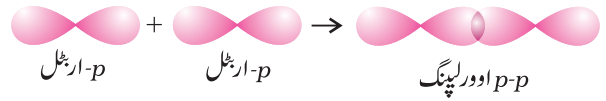
4.6.1 مخلوطیت کی قسمیں (Types of Hybridisation)

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

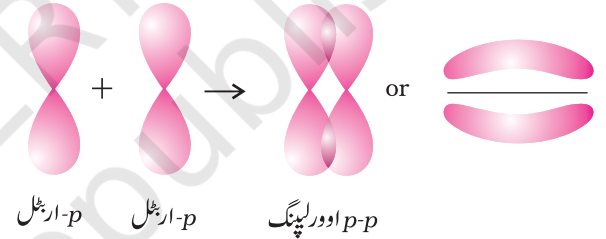
(I) sp -مخلوطیت: مخلوطیت کی اس قسم میں ایک s اور ایک p آرٹل کی آمیزش شامل ہوتی ہے جس کے نتیجے میں دو یکساں مخلوط sp آرٹل



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



(ii) **پائی (π) بند:** π بند بنانے میں ایٹمی آرٹل کی اور p -پنگ اس طرح ہوتی ہے کہ ان کے محور ایک دوسرے کے متوازی اور بین مرکزی محور کے عمودی ہوتے ہیں اس طرح جانبی اور p -پنگ 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

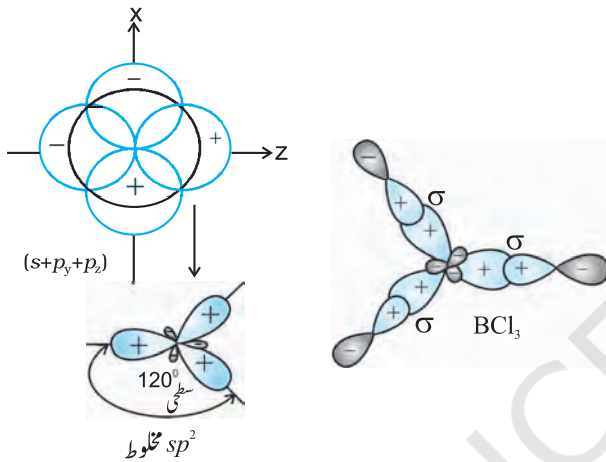
(Strength of Sigma and pi Bonds)

بنیادی طور پر کسی بند کی طاقت اس کی اور p -پنگ کی حد پر منحصر ہوتی ہے۔ سگما (σ) بند میں آرٹل کی اور p -پنگ بہت زیادہ ہوتی ہے۔ لہذا یہ پائی (π) بانڈ سے زیادہ طاقتور ہوتے ہیں جہاں اور p -پنگ 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 پالنگ 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

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



شکل 4.11 sp^3 مخلوط اوربٹل اور BCl_3 سالمے کا بننا

(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 -اوربٹل کی آمیزش سے چار sp^3 مخلوط اوربٹل بننے میں جن کی توانائی اور شکل یکساں ہوتی ہے۔ ہر ایک sp^3 اوربٹل میں s 25% اور p 75% کردار شامل ہوتا ہے۔ اس طرح بننے والے چار sp^3 اوربٹل چوتھی شکل کے چاروں کونوں کی سمت ہوتے ہیں sp^3 مخلوط اوربٹل کے درمیان 109.5° ہوتا ہے جیسا کہ شکل 4.12 میں دکھایا گیا ہے۔

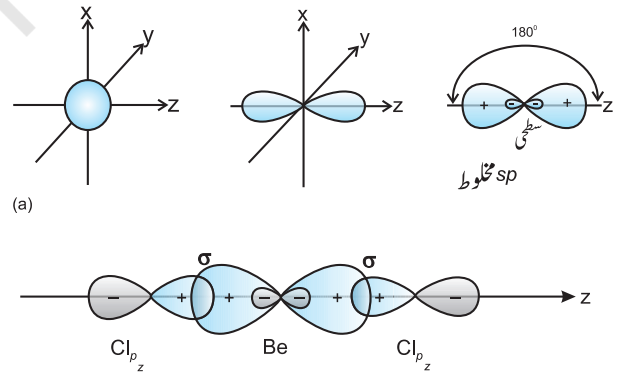
NH_3 اور H_2O سالموں کی اشکال بھی sp^3 مخلوطیت کی مدد سے واضح کی جاسکتی ہیں۔ NH_3 سالمے میں نائٹروجن کا گراؤنڈ اسٹیٹ پر الیکٹرانوں کی شکل $2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$ ہوتا ہے۔ جس میں سے تین sp^3 مخلوط اوربٹل میں غیر جفتی الیکٹران ہوتے ہیں اور چوتھے میں ایک الیکٹرانوں کا تنہا جوڑا ہوتا ہے۔ یہ تین مخلوط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

حاصل ہوتے ہیں۔ sp -مخلوطیت کے لیے مناسب اوربٹل s اور p_z ہوتے ہیں، اگر مخلوط اوربٹل کو z -محور پر ہونا ہے۔ ہر ایک sp مخلوط اوربٹل میں s 50% اور p 50% کردار ہوتا ہے۔ ایسے سالمے جن کے مرکزی ایٹم میں s - p مخلوطیت ہے اور وہ براہ راست دوسرے مرکزی ایٹموں سے جوڑے 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 ابھرے ہوئے ہوتے ہیں اور منفی لوب بہت چھوٹے اور دبے ہوئے ہوتے ہیں جس کی وجہ سے اوورلیپنگ مؤثر ہوتی ہے جس کے نتیجے میں مضبوط بند بنتے ہیں۔

sp -مخلوطیت والے سالمات کی مثالیں

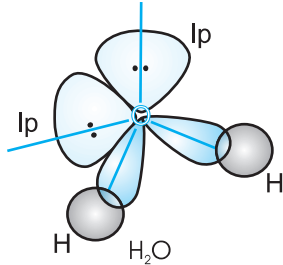
$Be:BeCl_2$ کا گراؤنڈ اسٹیٹ میں الیکٹرانوں کی شکل $1s^2 2s^2$ ہوتا ہے۔ مشتعل حالت میں ایک $2s$ الیکٹران خالی $2p$ اوربٹل میں چلا جاتا ہے جس کی وجہ سے بندش دو ہوتی ہے ایک $2s$ اور ایک $2p$ اوربٹل مخلوط ہو جاتے ہیں اور دو sp مخلوط اوربٹل بناتے ہیں یہ دو مخلوط اوربٹل مخالف سمت میں ہوتے ہیں اور 180° کا زاویہ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



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

(II) sp^2 مخلوطیت: اس قسم کی مخلوطیت میں ایک s اور دو $2p$ اوربٹل شامل ہوتے ہیں جو تین معادل مخلوط sp^2 اوربٹل بناتے ہیں۔ مثال کے طور پر $BeCl_3$ سالمے میں مرکزی ایٹم 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۔



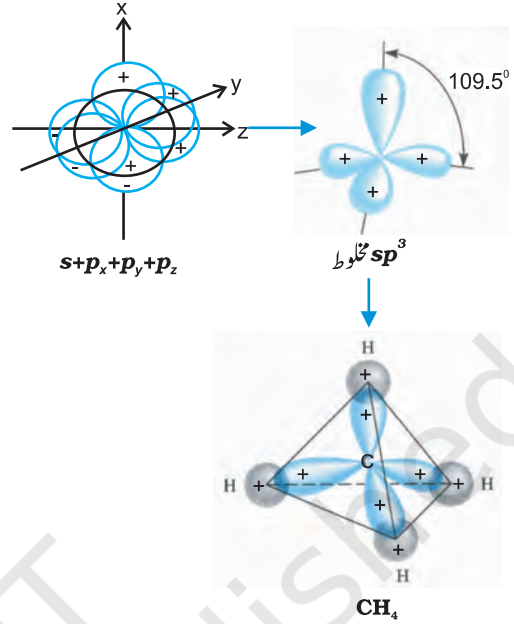
شکل 4.14 H₂O سالمہ کا بننا

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

C₂H₆ سالمے میں sp^3 مخلوطیت: آتھین 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 آتھین میں C-C بندش لمبائی 154 pm ہوتی ہے اور C-H بندش لمبائی 109 pm ہوتی ہے۔

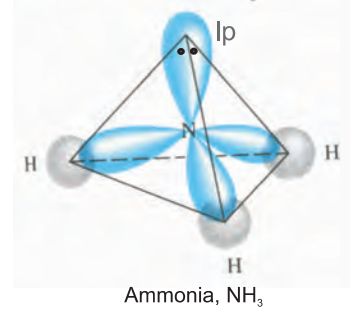
C₂H₄ میں sp^2 مخلوطیت: آتھین سالمہ کے بننے میں ایک کاربن ایٹم کا ایک sp^2 مخلوط اوربٹل دوسرے ایٹم کے sp^2 مخلوط اوربٹل کے ساتھ محوری طور پر اوورلیپ کر کے C-C سگما بند بناتا ہے۔ جبکہ ہر ایک کاربن کے باقی دو sp^2 مخلوط اوربٹل دو ہائیڈروجن ایٹموں کے ساتھ sp^2-s سگما بند بناتے ہیں جبکہ ہر ایک کاربن کے باقی 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 پہلی 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 آتھین 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؛ بندش لمبائی 134 pm ہوتی ہے۔ C-H بند sp^2-s ہوتا ہے جس کی بندش



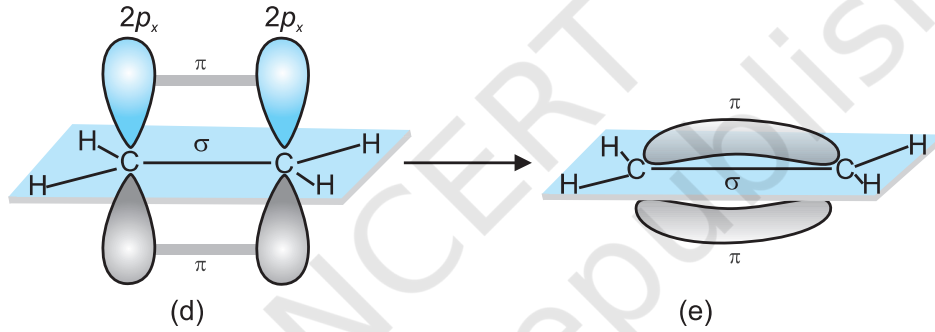
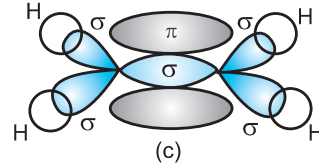
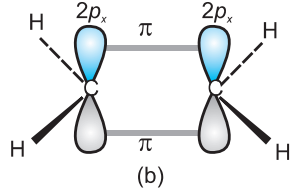
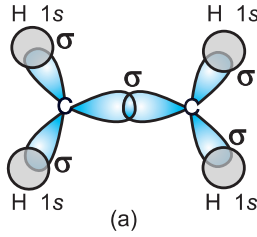
شکل 4.12 کاربن کے s ، p_x ، p_y اور p_z اوربٹل کے اتحاد سے بننے والے sp^3 مخلوط اوربٹل اور CH₄ کا بننا

بندش جوڑوں کے درمیان قوت دافعہ سے زیادہ ہوتی ہے۔ اس طرح سالمہ کی شکل مسخ ہو جاتی ہے اور بند زاویہ 109.5° سے گھٹ کر 107° ہو جاتا ہے۔ اس طرح کے سالموں کی جیومیٹری پیرائڈل ہوتی ہے جیسا کہ شکل 4.13 میں دکھایا گیا ہے۔

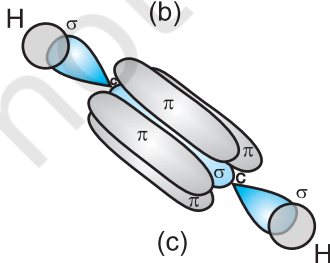
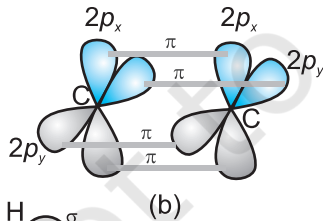
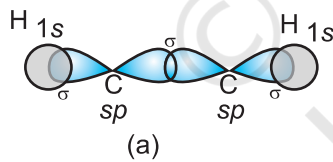


شکل 4.13 NH₃ سالمہ کا بننا

H₂O سالمہ میں آکسیجن کے چار اوربٹل (ایک 2s اور تین 2p) میں sp^3 مخلوطیت ہوتی ہے اور چار sp^3 اوربٹل بنتے ہیں 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 بندش جوڑے ہوتے ہیں۔ اس میں بندش زاویہ



شکل 4.15 ایتھین میں سگما اور پائی بانڈ کا بننا

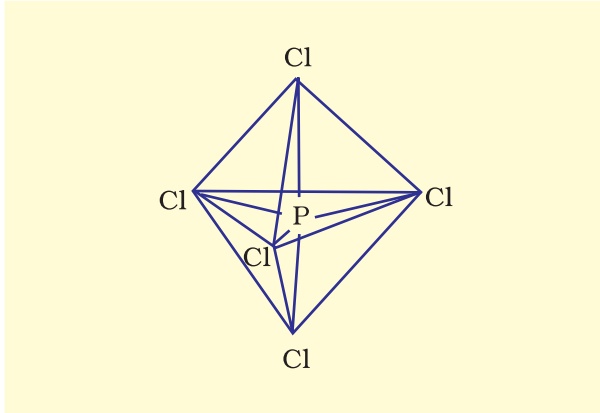


شکل 4.16 ایتھائن میں سگما اور پائی بند کا بننا

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

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

ایک کاربن ایٹم کا sp مخلوط آرٹھل دوسرے کاربن ایٹم کے sp مخلوط آرٹھل کے ساتھ محوری اور لیپ کر کے C-C سگما بند بناتے ہیں جبکہ ہر ایک کاربن کا دوسرا مخلوط آرٹھل محوری سطح پر ہائڈروجن ایٹم کے نصف بھرے ہوئے s آرٹھل پر اور لیپ کر کے σ بند بناتا ہے۔ دونوں کاربن ایٹموں کے دو غیر مخلوط p آرٹھل 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 PCl₅ سالمہ کی ٹرائی گونل پیرامڈل جیومیٹری

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

یہ دیکھنا چاہیے کہ ٹرائی گونل پیرامڈل جیومیٹری میں تمام زاویے برابر نہیں ہوتے۔ PCl₅ میں فاسفورس کے پانچ sp^3d مخلوط ارٹل کلورین ایٹم کے p ارٹل، جس میں صرف ایک الیکٹران ہوتا ہے سے اور لیپ 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 PCl₅ زیادہ متعادل ہوتا ہے۔

(ii) SF₆ کا بننا sp^3d^2 (مخلوطیت): SF₆ میں مرکزی ایٹم سلفر کا گراؤنڈ اسٹیٹ میں الیکٹرانوں کی شکل $3s^2 3p^4$ ہے۔ مشتعل حالت میں دستیاب چھ ارٹل یعنی، ایک s، تین p اور دو d ارٹل میں ایک

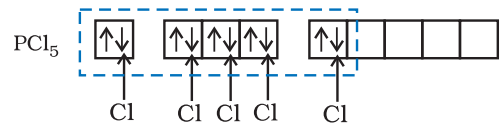
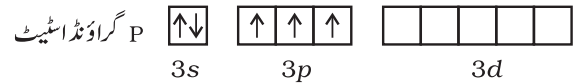
4.6.3 d-ارٹل والے عناصر میں مخلوطیت (Hybridisation of Elements Involving d Orbitals)

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

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

مثالیں	ایٹمی ارٹل	مخلوطیت کی قسم	سالموں/آینوں 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 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) PCl₅ کا بننا sp^3d (مخلوطیت): فاسفورس کی گراؤنڈ اسٹیٹ اور مشتعل حالت کا بیرونی الیکٹرانوں کی شکل (Z = 15) مندرجہ ذیل ہے۔



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

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

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

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

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

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

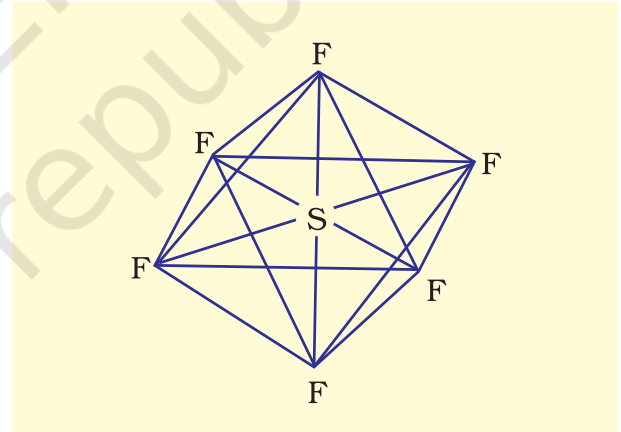
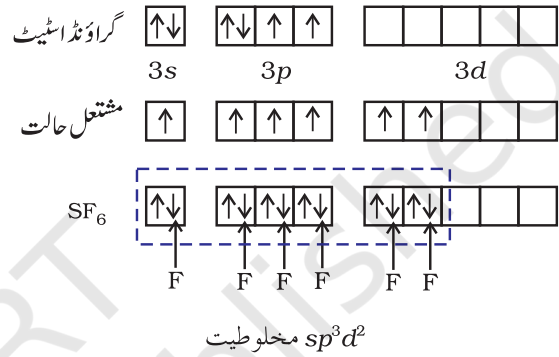
(viii) ایٹمی آرٹل کی طرح مولیکولر آرٹل بھی پالی کے اصول اخراج اور ہنڈ کے قانون کا اتباع کرتے ہوئے آف باؤ کے اصول کے مطابق ہی بھرے جاتے ہیں۔

4.7.1 مولیکولر آرٹل کا بننا ایٹمی آرٹل کا خطی اتحاد

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

لہر میکانیات (Wave Mechanics) کے مطابق ایٹمی آرٹل 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 آرٹل 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 آرٹل کا خطی اتحاد (Linear Combination of Atomic Orbital) کہلاتا ہے۔

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



شکل 4.18 SF_6 سالمہ کی آکٹاہیڈرن جیومیٹری

4.7 مولیکولر آرٹل تھیوری

(Molecular Orbital Theory)

مولیکولر آرٹل 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 آرٹل میں پائے جاتے ہیں اسی طرح جیسے ایک ایٹم میں الیکٹران ایٹمی آرٹل 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 مرکوزوں کے درمیان قائم رہتی ہے جس کی وجہ سے نیوکلئیس 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 مرکوزوں کے درمیان ایک نوڈل مستوی ہوتا ہے (جس پر الیکٹران کثافت صفر ہوتی ہے) جس کی وجہ سے نیوکلئیس کے درمیان قوت دفعہ زیادہ ہوتی ہے۔ گرتی مالیکولر اوربل میں موجود الیکٹران مرکوزوں 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 دفعہ الیکٹرانوں اور نیوکلئیس 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 گر جاتی 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 اتحادی شرائط

(Conditions for the Combination of Atomic Orbitals)

مالیکولر اوربل بنانے کے لیے ایٹمی اوربل کا خطی 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 ہائیڈروجن سالمے کے لیے استعمال کرتے ہیں۔ مان لیجیے ہائیڈروجن سالمہ دو ایٹم A اور B سے مل کر بنا ہے۔ ہر ایک ہائیڈروجن 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 خطی 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۔

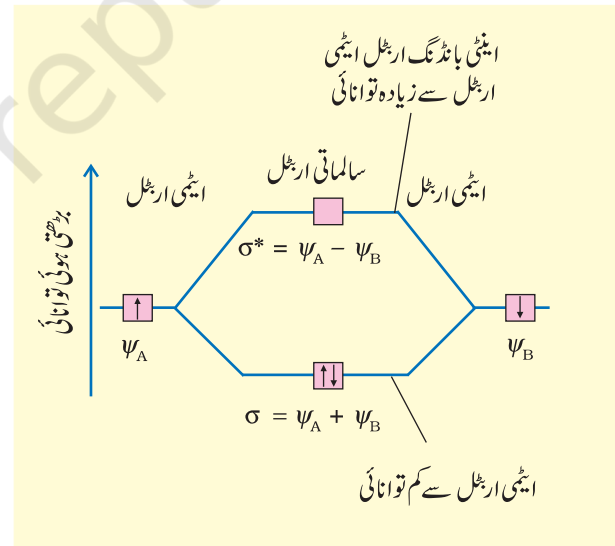
$$\psi_{MO} = \psi_A \pm \psi_B$$

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 بنتا 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 خطی اتحاد سے بننے والے بانڈنگ (σ) اور اینٹی بانڈنگ (σ^*) مولیکولر 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 مالکیولر اریٹل کے انرجی لیول ڈائیگرام

(Energy Level Diagram for Molecular Orbitals)

ہم نے دیکھا کہ دو ایٹموں کے 1s ایٹموں اریٹل دو مالکیولر اریٹل $\sigma 1s$ اور $\sigma^* 1s$ بناتے ہیں۔ اسی طرح 2s اور 2p ایٹمی اریٹل (دو ایٹموں پر آٹھ ایٹمی اریٹل) مل کر مندرجہ ذیل آٹھ مالکیولر اریٹل دیتے ہیں۔

$\sigma^* 2s$ $\sigma^* 2p_z$ $\pi^* 2p_x$ $\pi^* 2p_y$ اینٹی بانڈنگ مالکیولر اریٹل

$\sigma 2s$ $\sigma 2p_z$ $\pi 2p_x$ $\pi 2p_y$ بانڈنگ مالکیولر اریٹل

ان مالکیولر اریٹل 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 مالکیولر اریٹل 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 مالکیولر اریٹل 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 مالکیولر اریٹل 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 $\sigma 2p_z < \pi^* 2p_x$ اور $\pi^* 2p_y$ مالکیولر اریٹل کی توانائی زیادہ ہے۔

4.7.5 الیکٹرانیک تشکل اور سالماتی طرز عمل

(Electronic Configuration and Molecular Behaviour)

مختلف مالکیولر اریٹل میں الیکٹرانوں کا بٹاؤ 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 اریٹل میں الیکٹرانوں کی تعداد N_b ہے اور اینٹی بانڈنگ اریٹل میں الیکٹرانوں کی تعداد N_a ہے تو:

$$(i) \text{ اگر } N_a, N_b \text{ سے زیادہ ہے تو سالمہ مستحکم ہوگا اور}$$

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

2- متحد ہونے والے ایٹمی اریٹل کا تشکل سالماتی 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 اریٹل بھی اتحاد نہیں کرتے ہیں اگر ان کا تشکل برابر نہ ہو۔ مثال کے طور پر کسی ایٹم کے $2p_z$ اریٹل دوسرے ایٹم کے $2p_z$ اریٹل 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 اریٹل کا اوور لپ زیادہ سے زیادہ ہونا چاہیے۔ جتنا زیادہ اوور لپ ہوگا مالکیولر اریٹل کے مرکروں کے درمیان اتنی ہی زیادہ الیکٹران کثافت ہوگی۔

4.7.3 مالکیولر اریٹل کی قسمیں (Types of Molecular Orbitals)

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

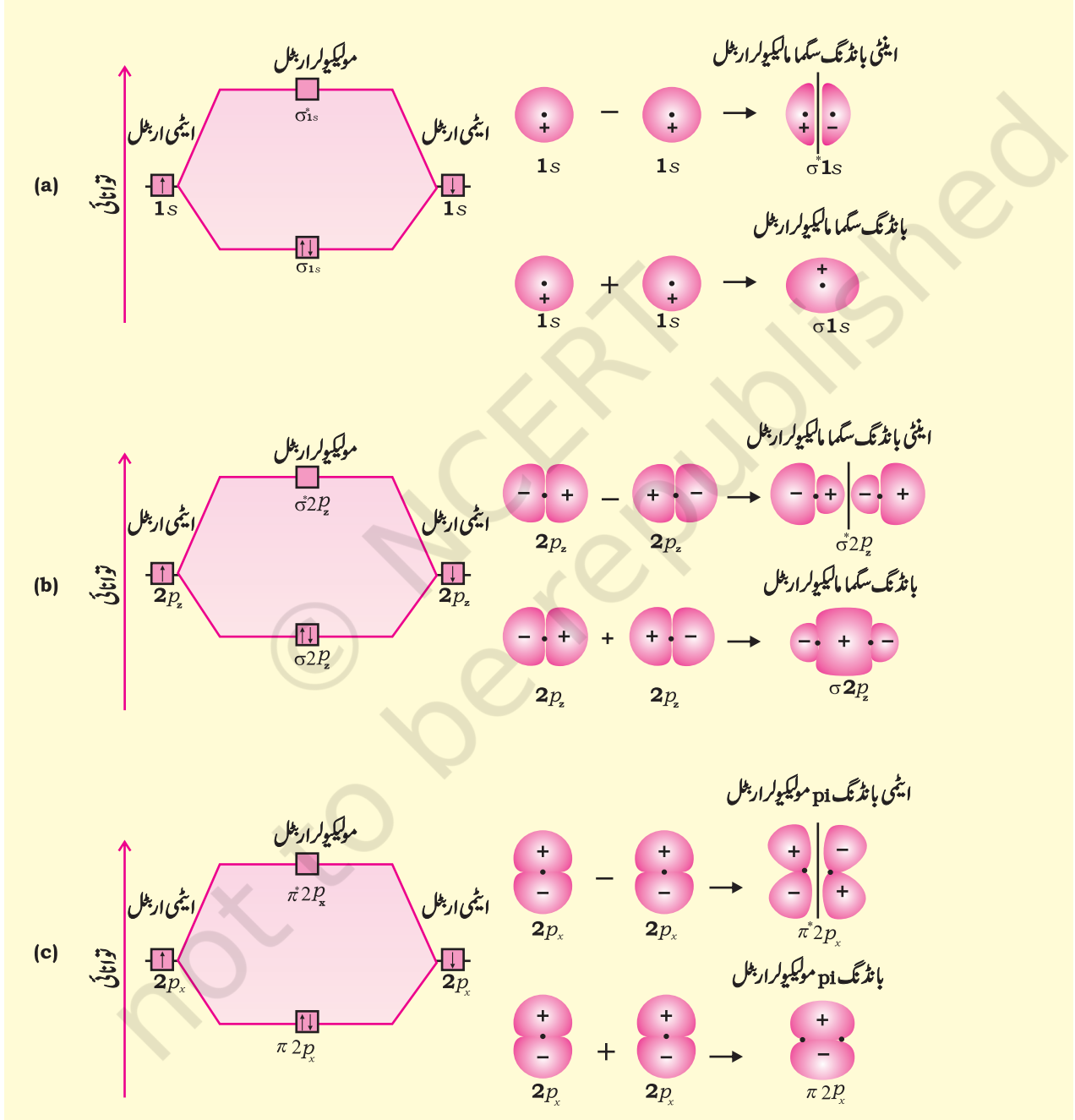
اس تسمیہ میں سگما (σ) مالکیولر اریٹل بند-محور کے گرد تشکلی ہوتے ہیں جبکہ پائی (π) مالکیولر اریٹل تشکلی نہیں ہوتے۔ مثال کے طور پر $1s$ -اریٹل کا تشکلی اتحاد جو دو مرکروں کے گرد ہوتا ہے اور دو مالکیولر اریٹل بناتا ہے جو بند-محور کے گرد تشکلی ہوتے ہیں۔ ایسے مالکیولر اریٹل σ قسم کے ہوتے ہیں اور ان کو $\sigma 1s$ 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 $2p_z$ اریٹل کا تشکلی اتحاد بھی دو سگما مالکیولر اریٹل 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 مالکیولر اریٹل بانڈ-محور کے گرد تشکلی نہیں ہوتے کیونکہ سالماتی سطح کے اوپر مثبت لوب اور نیچے منفی لوب ہوتا ہے۔ ایسے مالکیولر اریٹل کو π اور π^* سے ظاہر کرتے ہیں (شکل (4.20(c))۔ π -بانڈنگ مالکیولر اریٹل میں بین مرکزی محور کے اوپر اور نیچے الیکٹران-کثافت زیادہ ہوتی ہے۔ π^* اینٹی بانڈنگ مالکیولر اریٹل میں مرکروں کے درمیان نوڈ ہوتی ہے۔

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

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

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

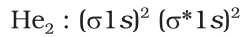


شکل 4.20 (a) $1s$ ایٹمی اوربٹل، (b) $2p_z$ ایٹمی اوربٹل اور (c) $2p_x$ ایٹمی اوربٹل کے اتحاد سے بننے والے بانڈنگ اور اینٹی بانڈنگ مالیکیولر اوربٹل کی توانائیاں اور خدو خال

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

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

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



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

He_2 سالمہ لہذا غیر مستحکم ہے اور پایا نہیں جاتا۔

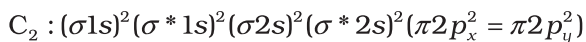
اسی طرح یہ بھی دکھایا جاسکتا ہے کہ Be_2 سالمہ $(\sigma 1s)^2 (\sigma^* 1s)^2$ میں چھ الیکٹران ہیں۔ لہذا Be_2 سالمہ کا الیکٹرانیک تشکل، $(\sigma 1s)^2 (\sigma^* 1s)^2 (\sigma 2s)^2 (\sigma^* 2s)^2$ بھی نہیں پایا جاتا۔

3. **لیتھیم سالمہ (Li_2):** لیتھیم کا الیکٹرانیک تشکل $2s^1, 1s^2$ ہے۔ Li_2 میں چھ الیکٹران ہیں۔ لہذا Li_2 سالمہ کا الیکٹرانیک تشکل، $(\sigma 1s)^2 (\sigma^* 1s)^2 (\sigma 2s)^2 (\sigma^* 2s)^2$ ہوگا۔

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

Li_2 کے الیکٹرانیک تشکل سے یہ بات ظاہر ہے کہ بانڈنگ مالیکولر آرٹیل میں چار الیکٹران موجود ہیں اور دو الیکٹران اینٹی بانڈنگ مالیکولر آرٹیل میں موجود ہیں۔ لہذا اس کا بائڈ آرڈر، $\frac{1}{2}(4 - 2) = 1$ ہے۔ اس کا مطلب ہے کہ Li_2 سالمہ مستحکم ہے اور چونکہ اس کے پاس غیر جوڑے کے الیکٹران نہیں ہیں لہذا یہ ڈایا مقناطیسی ہوگا۔ درحقیقت ڈایا مقناطیسی Li_2 سالے بخارات کی شکل میں پائے جاتے ہیں۔

4. **کاربن سالمہ (C_2):** کاربن کا الیکٹرانیک تشکل $1s^2 2s^2 2p^2$ ہے۔ C_2 میں بارہ الیکٹران ہوتے ہیں۔ لہذا، C_2 سالمہ کا الیکٹرانیک 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 $N_a = N_b$) کا مطلب ہے غیر مستحکم سالمہ۔

بند کی فطرت (Nature of the Bond)
بائڈ آرڈر کی تمکلی قیمتیں 1، 2 یا 3 اکہرے، دوہرے یا تہرے بند کو ظاہر کرتی ہیں جیسا کہ ہم نے کلاسیکی تصور میں پڑھا تھا۔

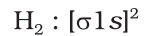
بندشی لمبائی (Bond-length)
ایک سالمہ میں دو ایٹموں کے درمیان بائڈ آرڈر کو بندشی لمبائی کی قریبی پیمائش کے طور پر لیا جاسکتا ہے جب بائڈ آرڈر بڑھتا ہے تو بندشی لمبائی کم ہوتی ہے۔

مقناطیسی فطرت (Magnetic Nature)
اگر کسی سالے میں تمام مالیکولر 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 مالیکولر آرٹیل میں اکہرے الیکٹران ہیں تو وہ پیرامیگنیٹک (Paramagnetic) ہوگی (مقناطیسی میدان کے تئیں کشش رکھے گی)۔ مثال کے طور پر O_2 کا سالمہ۔

4.8 ہم نیوکلیائی دوائیٹی سالموں میں بندش

(Bonding in Some Homonuclear Diatomic Molecules)

اس سیکشن میں ہم کچھ ہم نیوکلیائی دوائیٹی سالموں میں بندش پر بحث کریں گے۔
1. **ہائڈروجن سالمہ (H_2):** 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 $1s$ مالیکولر آرٹیل میں موجود ہوتے ہیں۔ لہذا ہائڈروجن سالے کا الیکٹرانیک تشکل ہوتا ہے:



ہائڈروجن سالے H_2 کا بائڈ آرڈر مندرجہ ذیل طریقے سے معلوم کیا جاسکتا ہے۔

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

O_2 سالمے کے الیکٹران کی شکل سے یہ واضح ہوتا ہے کہ بانڈنگ مالیکولر آرٹھل میں 10 (دس) الیکٹران موجود ہیں اور 6 الیکٹران اینٹی بانڈنگ مالیکولر آرٹھل میں موجود ہیں۔ لہذا اس کا

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

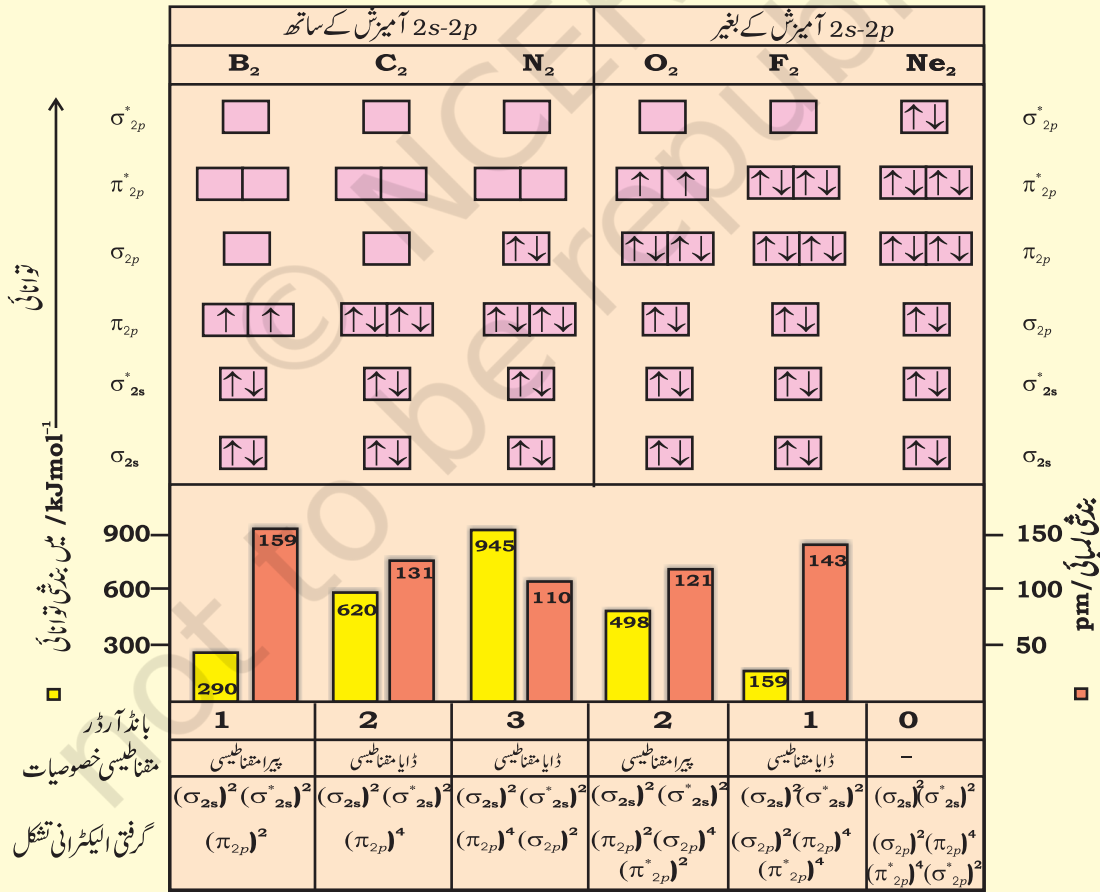
لہذا آکسیجن کے سالمے میں ایٹم دوہرے بند سے بندھے ہوئے ہوتے ہیں۔ اس کے علاوہ یہ بھی دیکھا گیا ہے کہ اس کے پاس دو بغیر جوڑے کے الیکٹران $\pi^* 2p_x$ اور $\pi^* 2p_y$ مالیکولر آرٹھل میں موجود ہیں۔ لہذا O_2 سالمہ، ایک پیرامقناطیسی سالمہ ہونا چاہیے۔ ایک اندازہ جس کی تصدیق تجرباتی مشاہدہ سے ہوتی ہے۔ اس طرح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

$$\text{یا } KK(\sigma 2s)^2(\sigma^* 2s)^2(\pi 2p_x^2 \equiv \pi 2p_y^2)$$

کاربن کا بانڈ آرڈر $2 = \frac{1}{2}(8 - 4)$ ہے اور C_2 ڈایا مقناطیسی ہونا چاہیے۔ حقیقت میں بخارات کی شکل میں C_2 سالمے پائے گئے ہیں۔ یہ بات نوٹ کرنے لائق ہے کہ C_2 میں دو ہر ابند دونوں پائی بند پر مشتمل ہوتا ہے کیونکہ دو پائی مالیکولر آرٹھل 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 سالمے میں بندش پر بحث کی جاسکتی ہے۔

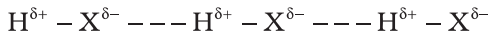
5. آکسیجن سالمہ (O_2): آکسیجن ایٹم کا الیکٹران کی شکل $1s^2 2s^2 2p^4$ ہے۔ ہر ایک آکسیجن ایٹم کے پاس 8 الیکٹران ہیں لہذا O_2 سالمہ میں 16 الیکٹران ہوں گے۔ O_2 سالمہ کا الیکٹران کی شکل اس طرح

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



شکل 4.21 B_2 سے Ne_2 تک عناصر کے لیے MO کے بھرائو اور سالمی خصوصیات

ہو جاتا ہے جس کے نتیجے 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 بند کی 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۔

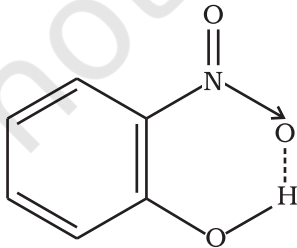
4.9.2 H-بند کی قسمیں (Types of H-Bonds)

H-بند دو قسم کے ہوتے ہیں

- (i) بین سالمی ہائڈروجن بند (Intermolecular Hydrogen Bond)
- (ii) 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، الکوحل 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 بند

اسی طرح دوری جدول کے دوسرے دور کے عناصر کے دوسرے ہم نیوکلیائی دو ایٹمی سالموں کے الیکٹران کی تشکیل 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، بانڈ آرڈر، مقناطیسی خصوصیات اور بندش الیکٹران تشکیل 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 جزوی مثبت چارج والے ہائڈروجن دوسرے زیادہ الیکٹرون گنیو 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 ٹیٹھائی لائن (- -) سے ظاہر کرتے ہیں جبکہ ایک ٹھوس لائن شریک بندش بند کو ظاہر کرتی ہے۔ لہذا ہائڈروجن بند کی 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, N) سے باندھتی ہے۔

4.9.1 ہائڈروجن بند بننے کی وجوہات

(Cause of 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 لیوئس 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۔ لیوئس کی نقطہ علامات (Lewis Dot Symbol) ایک دیے ہوئے عنصر کے گرتی الیکٹرانوں کی تعداد کو ظاہر کرتے ہیں اور لیوئس نقطہ ساختیں سالموں میں بندش کا تصویری اظہار ہیں۔

ایک آبی مرکب کی شکل مثبت اور آئینوں کے ایک با ترتیب سہ ابعادی مجموعہ کی شکل میں ہوتی ہے جسے کرسٹل لیٹس (Crystal Lattice) کہتے ہیں۔ قلمی ٹھوس میں مثبت اور منفی آئینوں کے درمیان ایک چارج کا توازن ہوتا ہے۔ قلمی جالی لیٹس تشکیل کی پہنچا لپی کے ذریعہ مستحکم ہوتی ہے۔ ایک اکہر 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 بننے ہیں کچھ عناصر میں الیکٹرانوں کے اضافی جوڑے ہوتے ہیں جو بندش میں حصہ نہیں لیتے۔ ان کو الیکٹرانوں کے تنہا جوڑے کہتے ہیں۔ لیوئس ڈاٹ ساخت سالموں کے ہر ایک ایٹم کے گرد بندش جوڑے اور تنہا جوڑے کی ترتیب کو دکھاتی ہے۔ کیمیائی بندش سے تعلق رکھنے والے اہم پیرامیٹر جیسے: بندش لمبائی، بندش زاویہ، بندھن لپی، بانڈ آرڈر اور بند قطبیت مرکبات کی خصوصیات پر با معنی اثرات رکھتے ہیں۔

سالمات اور کثیر ایٹمی آئینوں کی ایک بڑی تعداد ایک لیوئس 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 آئن کو ظاہر کرتے ہیں۔ یہ ایک بہت اہم اور انتہائی مفید تصور ہے جو گمک (Resonance) کہلاتا ہے۔ یہ اشتراکی ساختیں یا مستند شکلیں ایک ساتھ مل کر گمک مخلوط بناتی ہیں جو سالمہ یا آئن 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 توانائیوں سے ہے جس کے متعلق لیوئس 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 H_2 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 مضمر توانائی کم ہو جاتی ہے۔ بین مرکزی متوازن فاصلے بندش فاصلے پر یہ توانائی کم سے کم ہو جاتی ہے۔ ان نیوکلئس 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 نیوکلئس کے درمیان الیکٹران کی کثافت بڑھ جاتی ہے جو دونوں مرکزوں کو نزدیک لانے میں مدد کرتی ہے۔ تاہم یہ دیکھا گیا ہے کہ اصل بانڈ اینتھالپی اور بندش 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 NH_3 ، CH_4 ، BCl_3 ، $BeCl_2$ اور H_2O جیسے سالموں کی جیومیٹریائی اشکال کی وضاحت کے لیے O اور N ، C ، B ، Be کے ایٹمی ارٹل کی sp ، sp^2 اور sp^3 مخلوطیت کا استعمال کیا گیا تھا۔ یہ C_2H_2 اور C_2H_4 جیسے سالموں میں کثیر بند کے بننے کی بھی وضاحت کرتے ہیں۔

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

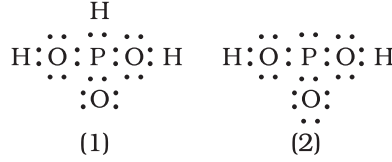
سالموں کا الیکٹرانیک تشکل مالکیولر ارٹھل میں ان کی بڑھتی ہوئی توانائی کی ترتیب میں الیکٹرانوں کو بھرتے ہوئے لکھا جاتا ہے۔ جیسا کہ ایٹموں میں ہوتا ہے، مالکیولر ارٹھل میں بھی الیکٹرانوں کو بھرنے کے لیے پالی کا اصول اخراج (Pauli Exclusion Principle) اور ہنڈ کا قانون استعمال ہوتا ہے۔ سالے اس وقت مستحکم کہے جاسکتے ہیں جب گرتی مالکیولر ارٹھل میں الیکٹرانوں کی تعداد ایٹمی بانڈنگ مالکیولر ارٹھل 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 بین 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 بوڈ بہت سے مرکبات کی اشکال اور خصوصیات پر گہرا اثر رکھتے ہیں۔

مشقیں

- 4.1 کیمائی 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:
S اور S^{2-} ; Al اور Al^{3+} ; H اور H^{-}
- 4.4 مندرجہ ذیل سالموں اور آئینوں کے لیے لیوس اشکال بنائیے:
 $HCOOH$, CO_3^{2-} , BeF_2 , $SiCl_4$, H_2S
- 4.5 آکٹیٹ قاعدے کی تعریف بیان کیجیے۔ اس کی اہمیت اور حدود لکھیے۔
- 4.6 آئینی بندش بننے کے لیے موافق عوامل لکھیے۔
- 4.7 VSEPR ماڈل کا استعمال کرتے ہوئے مندرجہ ذیل سالموں کی اشکال پر بحث کیجیے:
 PH_3 , H_2S , AsF_5 , $SiCl_4$, BCl_3 , $BeCl_2$
- 4.8 اگرچہ NH_3 اور H_2O سالموں کی جیومیٹری مسخ شدہ ٹیٹراہیڈرل ہے پانی میں بندشی زاویہ NH_3 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 CO_3^{2-} 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_2 ، SO_3 اور NO_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 لیوٹس علامات کا استعمال کیجیے:

(a) K اور S (b) Ca اور O (c) Al اور N

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

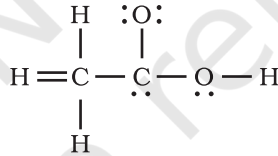
4.16 ڈائپول مومنٹ کی اہمیت/استعمال لکھیے۔

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 بندکوان کے بڑھتے ہوئے آہنی کردار کی ترتیب میں لکھیے SO_2 ، N_2 ، K_2O ، LiF اور ClF_3

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

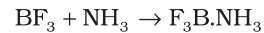
4.23 NH_3 اور NF_3 میں سے کس کا ڈائپول مومنٹ زیادہ ہوگا اور کیوں؟

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

4.25 مندرجہ ذیل تعامل میں A1 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) $2p_x$ 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 اورٹل 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 بوئنڈ 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 سالے کی بننے کی وضاحت کیجیے۔
- 4.34 مالیکولر آرٹل بنانے کے لیے ایٹمی آرٹل کے خطی اتحاد کے لیے لازمی حالات لکھیے۔
- 4.35 مالیکولر 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 (سپر آکسائیڈ)، O_2^{2-} (پراکسائیڈ)
- 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؟ O_2^+ ، O_2 ، N_2 اور O_2^- کا بانڈ آرڈر معلوم کیجیے۔