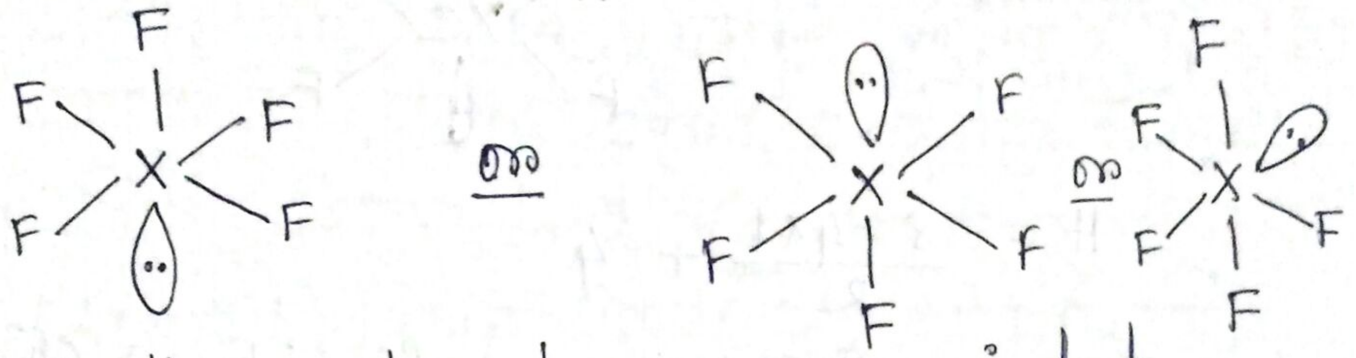
BrF_5 , IF_5

X = Br, I



All three structures are equivalent.
(একই রকম structure)

$$H = \frac{7 - 5\times1}{2} + 5$$
$$= 1 + 5$$
$$= lp + bp \Rightarrow sp^3d^2$$

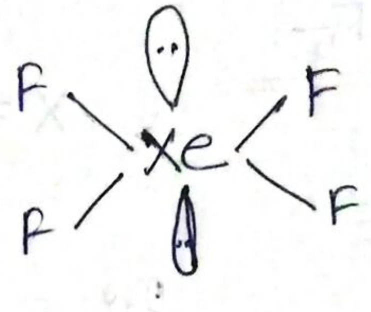
∴ ⇒ arrangement of electron pairs is sp^3d^2 i.e octahedral.

⇒ But, দি: সব ইলেকট্রন জোড় identical position গুলিতে আছে যে কোন একটি position নিলেই হবে।

⇒ সুতরাং molecule এর shape হল "square pyramid" আকৃতি যুক্ত

(62)

XeF_4



$$H = \frac{8 - 4\times1}{2} + 4$$

$$= 2 + 4 = lp + bp \Rightarrow sp^3d^2$$

∴ ⇒ Arrangement of e-pairs is octahedral

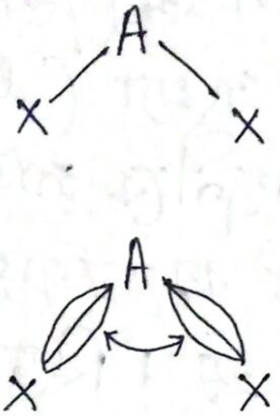
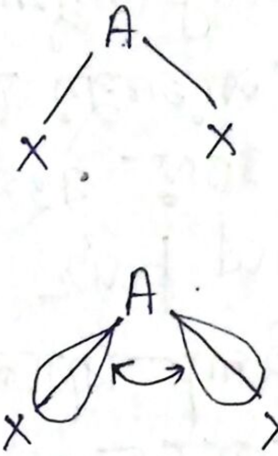
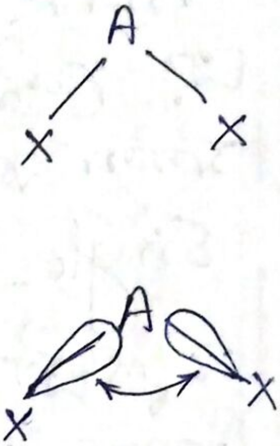
⇒ কিন্তু এক্ষেত্রে দুটি ইলেকট্রন জোড় নিঃসঙ্গ অবস্থায় আছে। তাই এরা octahedral arrangement এর যে কোনো position দখল করতে পারবে। lp - lp বিকর্ষণ বল minimum করার জন্য তারা সাধারণ octahedral arrangement এর দুটি axial position occupy করবে।

⇒ Shape of the molecule is "Sq. planar"

iii) VSEPR Theory অনুযায়ী কোনো অণু / আয়ন-এর কেন্দ্রীয় পরমাণুর স্টেরিক সংখ্যা (lp+bp) গণনা করার সময় বহুমাত্রিক বন্ধনীকে সাধারণত Single bond pair (একটি বন্ধন জোড়) ইলেকট্রন হিসাবে বিবেচনা করা হয়। কিন্তু যেহেতু π- বন্ধনে ~~অংশগ্রহণী~~ অংশগ্রহণকারী ইলেকট্রন-মেঘ σ- বন্ধনে অংশগ্রহণকারী ইলেকট্রন-মেঘের মতো নিউক্লিয়াস দ্বারা দৃঢ়ভাবে আবদ্ধ থাকে না, তাই ত্রিবন্ধন দ্বিবন্ধন অপেক্ষা এবং দ্বিবন্ধন একবন্ধন অপেক্ষা অধিক স্থান অধিকার করে থাকে। তাই বহুবন্ধন একবন্ধনের তুলনায় অধিক বিকর্ষণ ঘটায়। এই বিকর্ষণ বলের ক্রম হল —

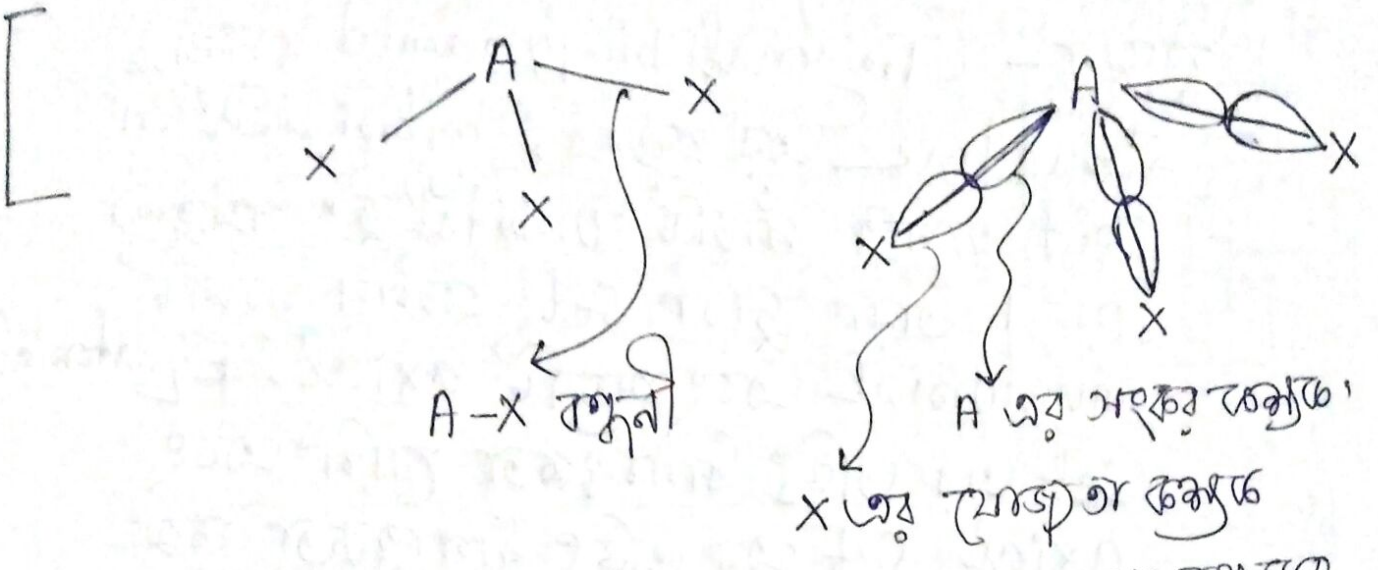
বহুবন্ধন – বহুবন্ধন > বহুবন্ধন – একবন্ধন > একবন্ধন – একবন্ধন।

iv) অণু / আয়নের কেন্দ্রীয় পরমাণুর সঙ্গে যুক্ত প্রান্তিক পরমাণুর তড়িৎ ঋণাত্মকতা বৃদ্ধি পেলে বন্ধন ইলেকট্রন জোড় সরে কেন্দ্রীয় পরমাণু থেকে প্রান্তিক পরমাণুর দিকে যায়। ফলে বন্ধন ইলেকট্রন জোড়গুলির মধ্যে বিকর্ষণ বলের মান হ্রাস পায় এবং বন্ধন কোণ হ্রাস পায়।

Case-I	Case-II	Case-III
		
A এবং X পরমাণুর মধ্যে তড়িৎ ঋণাত্মকতার পার্থক্য খুব কম। বন্ধন জোড় ইলেকট্রনের যথাক্রমে কাছাকাছি অঞ্চলে অবস্থিত। তাই বন্ধন কোণের মান কাছাকাছি	X এর তড়িৎ-ঋণাত্মকতা A এর চেয়ে বেশি। তাই বন্ধন ইলেকট্রন জোড়ের সরণ X এর দিকে বেশি। তাই বন্ধন জোড়ের মধ্যে বিকর্ষণ কম। বন্ধন কোণ কম।	A এর তড়িৎ-ঋণাত্মকতা X এর থেকে বেশি। তাই বন্ধন ইলেকট্রন জোড়ের সরণ A এর দিকে বেশি। তাই বন্ধন জোড় গুলির মধ্যে বিকর্ষণ বেশি। বন্ধন কোণ বেশি।

** <u>বেন্টের সূত্র</u> :— AX_n টাইপের অণুর ক্ষেত্রে, X এর তড়িৎ ঋণাত্মকতা বৃদ্ধির সহিত A–X বন্ধনীতে অংশগ্রহণকারী কেন্দ্রীয় পরমাণুর সংকর কক্ষকের p-character বৃদ্ধি পায়, ফলে ∠XAX বন্ধন কোণ হ্রাস পায়। অর্থাৎ বেন্টের সূত্র এবং VSEPR সূত্র একই ফলাফল নির্দেশ করে।

[

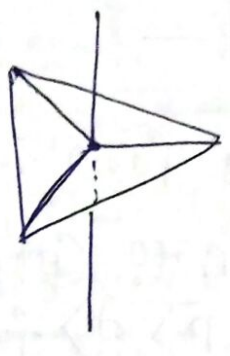


A এর সংকর কক্ষক এবং X এর যোজ্যতা কক্ষকের অভিলেপনের ফলেই A–X বন্ধনী সৃষ্টি হয়]

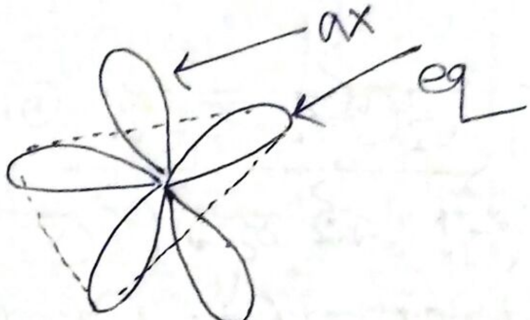
** বেন্টের সূত্রের অন্যরূপ :—

বেন্টের এই সূত্রটিকে অন্যভাবেও বিবৃত করা যায়। আমরা জানি বিভিন্ন অরবিটালের ক্ষেত্রে তড়িৎ-ঋণাত্মকতার ক্রম হল $s > p > d > f$। অর্থাৎ কোনো সংকর কক্ষকের ক্ষেত্রে, p ও d character যত বৃদ্ধি পায়, সেই সংকর কক্ষকের তড়িৎ ঋণাত্মকতা তত হ্রাস পায়। অর্থাৎ,
"তড়িৎ ঋণাত্মক পরমাণু সর্বদা কেন্দ্রীয় পরমাণুর কম তড়িৎ ঋণাত্মক সংকর কক্ষকের সঙ্গে যুক্ত হয়ে বন্ধন গঠনের প্রবণতা দেখায়"। অর্থাৎ তড়িৎ ঋণাত্মক পরমাণু কেন্দ্রীয় পরমাণুর এমন সংকর কক্ষকের সঙ্গে যুক্ত হয় যার s character কম এবং p character বেশি।

যেমন - Trigonal bi-pyramid (TBP) Structure এর ক্ষেত্রে, hybridisation sp^3d হলেও পাঁচটি orbital ই সমতুল্য নয়। তারা দুটি set গঠন। একটি equatorial এবং অন্যটি axial. Equatorial set এর তড়িৎ ঋণাত্মকতা বেশি এবং axial set এর তড়িৎ ঋণাত্মকতা কম হওয়ায় অধিক তড়িৎ ঋণাত্মক পরমাণু সর্বদা axial position এ অবস্থান করে।



TBP

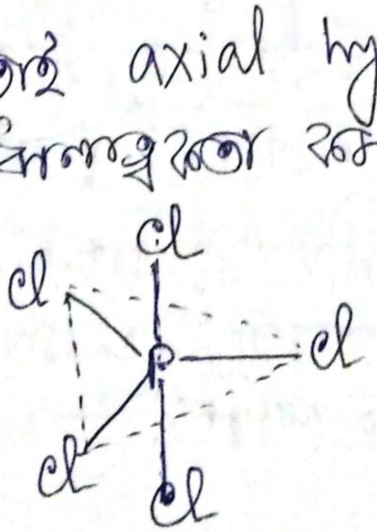


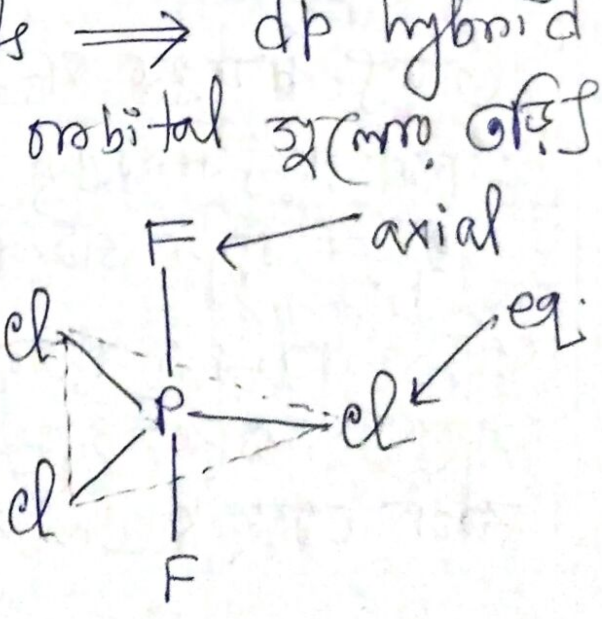
পাঁচটি sp^3d hybrid orbitals. কিন্তু তারা সমতুল্য নয়।

Equatorial 3 orbitals $\Longrightarrow$ sp^2 hybrid

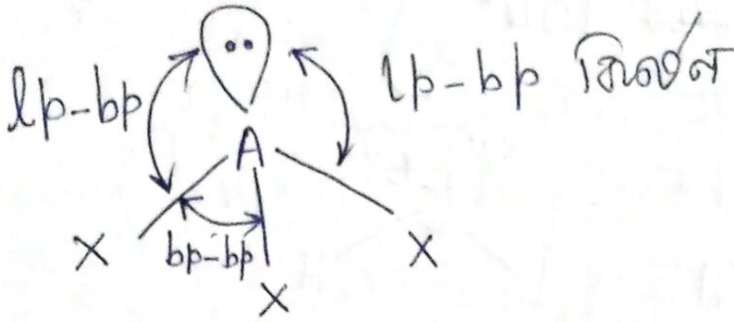
axial 2 orbitals $\Longrightarrow$ dp hybrid

তাই axial hybrid orbital গুলোর তড়িৎ ঋণাত্মকতা কম।



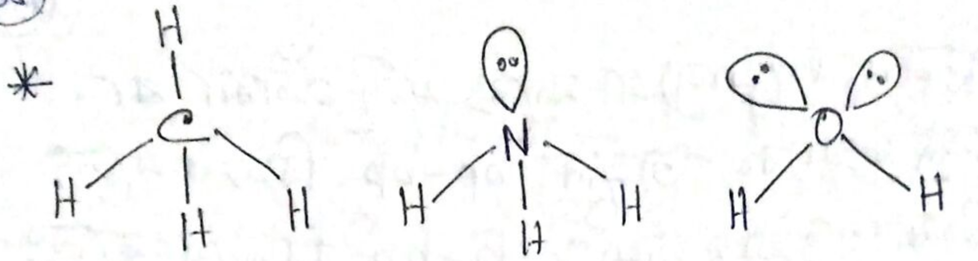


v) কেন্দ্রীয় পরমাণুর যোজ্যতা কক্ষে যদি ফাঁকা বা অপূর্ণ কক্ষক থাকে তাহলে bp-bp বিকর্ষণ বলের মান কম হওয়ায় জন্য lp-bp বিকর্ষণ বলের প্রভাব বৃদ্ধি পায় এবং এর ফলে বন্ধন কোণের সংকোচন হয়।

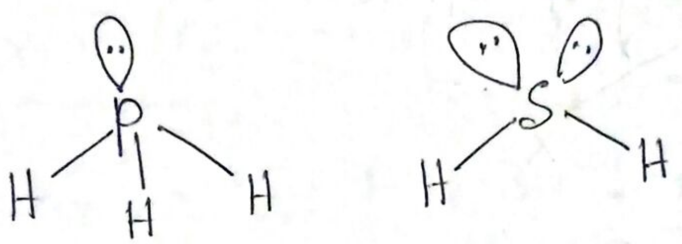


[* bp-bp বিকর্ষণ বল বন্ধন কোণের বৃদ্ধি ঘটায় এবং lp-bp বিকর্ষণ বল বন্ধন কোণের সংকোচন ঘটায়। এখন, যদি কোন কারণের জন্য bp-bp বিকর্ষণ বল কম হয়, তখন lp-bp বিকর্ষণ বলের প্রভাব বেশি হয় যা বন্ধন কোণ কে সংকুচিত করে। যেমন NH_3, OH_2 অণুতে, কেন্দ্রীয় পরমাণুর যোজ্যতা কক্ষে কোন ফাঁকা কক্ষক থাকেনা, তাই lp-bp বিকর্ষণ বলের প্রভাব অপেক্ষাকৃত কম হয় এবং বন্ধন কোণের কম সংকোচন ঘটে। কিন্তু PH_3, SH_2 অণুগুলিতে কেন্দ্রীয় পরমাণুর যোজ্যতা কক্ষে ফাঁকা কক্ষক থাকায় lp-bp বিকর্ষণ বলের প্রভাব অপেক্ষাকৃত বেশি হয় এবং বন্ধন কোণের অধিক সংকোচন ঘটে।]

68



$\angle HCH = 109^\circ 28'$
$\angle HNH = 107^\circ$
$\angle HOH = ~~140~~ 104^\circ$
} [illegible] হ্রাস।



$\angle HPH = 94^\circ$

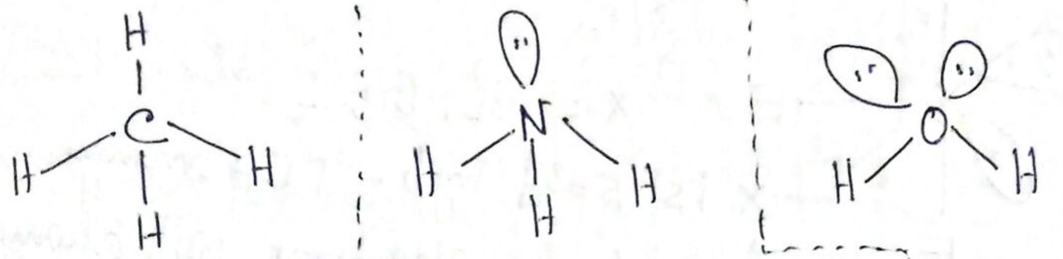
"p" has vacant 3d-orbital. So, it can accomodate more than four electron pairs. But it has only three bond pairs and one lone pair. So, bp-bp repulsion will be less and the effect of lp-bp repulsion will be more.

$\angle HSH = 92^\circ$

"S" has vacant 3d-orbital. So, it can accomodate more than four electron pairs into its valence shell. But it has only two bp and two lp in the present molecule. So, bp-bp repulsion will be less and the effect of lp-bp repulsion will be more.

ঃ VSEPR Theory সংক্রান্ত উদাহরণ ঃ

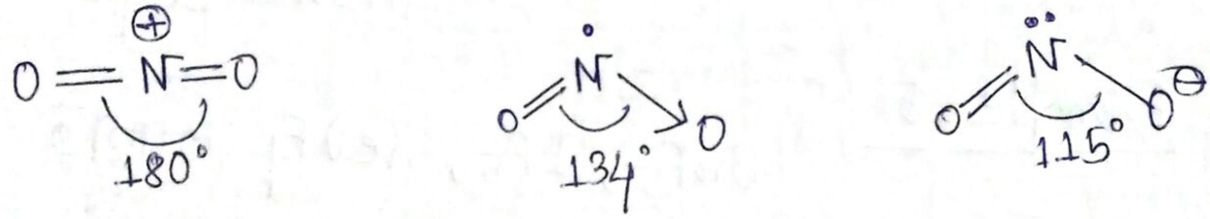
Example - 1



$\angle HCH = 109.5^\circ$	$\angle HNH = 107^\circ$	$\angle HOH = 104^\circ$
- NO lone pair - only bp-bp repulsion - 4 bp-bp	- one lone pair - 3 bp-bp rep. - 1 lp-bp rep.	- Two lone pairs - 2 lp-bp - 1 bp-bp - 1 lp-lp

যেহেতু বিকর্ষণ বলের ক্রম lp-lp > lp-bp > bp-bp তাই H_2O এর ক্ষেত্রে বন্ধন কোণ সর্বনিম্ন।

Example-2

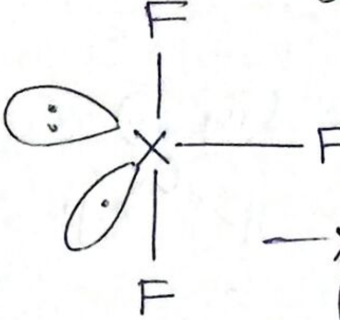


NO lone pair — only one lone electron — one lone pair

যেহেতু le-bp < lp-bp, তাই NO_2 তে $\angle ONO$ বন্ধন কোণ NO_2^- এ $\angle ONO$ বন্ধন কোণ অপেক্ষায় বেশি।

le ⇒ lone electron
lp ⇒ lone pair electron

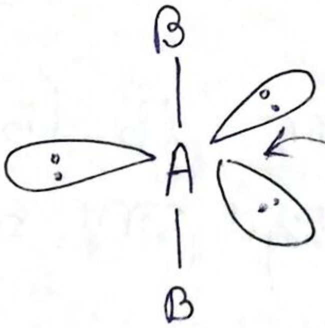
Example-3 ClF_3, BrF_3, IF_3 Molecule গুলো — এগুলো T shaped.



X = Cl, Br, I.

- X is sp^3d hyb. TBP arrangement.
- lone pair electron will always occupy equatorial position.
- Geometry is T shaped

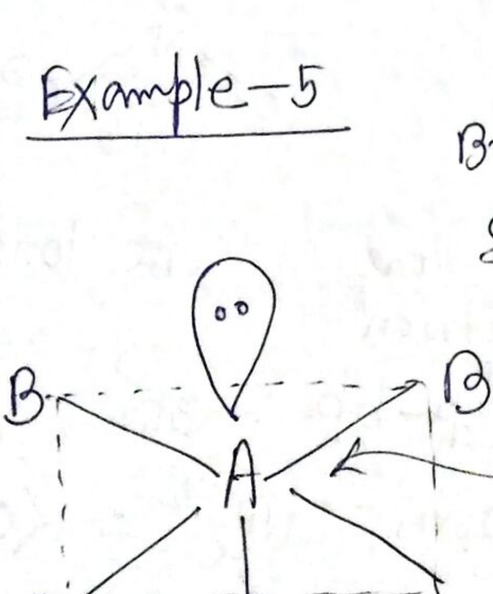
Example-4 $ICl_2^{\ominus}$, $I_3^{\ominus}$, XeF_2 এগুলো linear.



A is sp^3d hybridised.

- lone pair will always occupy equatorial position.
- linear shaped.

Example-5 BrF_5, IF_5, $XeOF_4$ এগুলো Sq. pyramid.



- sp^3d^2 hybridised
- arrangement of electron pairs is octahedral
- lone pair occupy axial position

Sq. pyramid