হবে। অর্থাৎ আণবিক কক্ষকটির তরঙ্গ অপেক্ষকের মান ঐ কাঠামোটি যখন নিউক্লিয়াস দ্বারা গঠিত পারমাণবিক কক্ষকের তরঙ্গ অপেক্ষকের চেয়ে বেশি সম্ভাব্য নির্ভরশীল হবে। এইরূপে আণবিক কক্ষকের Resultant wave function কে তখন বিভিন্ন পারমাণবিক কক্ষকের তরঙ্গ অপেক্ষকের algebraic sum হিসাবে প্রকাশ করা হয়। যদি একটি ইলেকট্রনের তরঙ্গ অপেক্ষক A নিউক্লিয়াসের জন্য ψ_A হয় এবং B নিউক্লিয়াসের জন্য ψ_B হয়, তখন A এবং B Combined নিউক্লিয়াস framework এর জন্য ইলেকট্রনটির তরঙ্গ অপেক্ষক হবে

$$\psi_{MO} = C_A\psi_A \pm C_B\psi_B .$$

যেখানে C_A এবং C_B, ψ_A এবং ψ_B পারমাণবিক কক্ষক দুটির Contribution নির্দেশ করে।

- পারমাণবিক কক্ষক দুটির তরঙ্গ অপেক্ষকের যোগফলের দ্বারা প্রাপ্ত আণবিক কক্ষককে বলা হয় bonding molecular orbital এবং বিয়োগফলের দ্বারা প্রাপ্ত আণবিক কক্ষককে বলা হয় anti-bonding molecular orbital.

$$\therefore \psi_b = C_A\psi_A + C_B\psi_B \; ; \; \psi_a = C_A\psi_A - C_B\psi_B$$

⇒ LCAO এর নিয়মাবলী :—

i) LCAO পদ্ধতির ক্ষেত্রে সংযুক্তিতে অংশগ্রহণকারী পারমাণবিক কক্ষকগুলির শক্তির পার্থক্য শূন্য বা খুব কম হওয়া প্রয়োজন।

ii) সমন্বয়কারী পারমাণবিক কক্ষকগুলির Symmetry, বন্ধন অক্ষের সাপেক্ষে একই রকম হতে হবে। যেমন $2p_x$ পারমাণবিক কক্ষকের সাথে অপর $2p_x$ পারমাণবিক কক্ষকের সমন্বয় হবে, কিন্তু কখনোই $2p_z$ বা $2p_y$ এর সমন্বয় হবেনা। আবার, সমন্বয়কারী পারমাণবিক কক্ষকের Symmetry sign যদি এক হয় তাহলে bonding molecular orbital গঠিত হয় এবং Symmetry sign যদি ~~আলাদা হয়~~ বিপরীত হয় তাহলে anti-bonding molecular orbital গঠিত হয়।

iii) পারমাণবিক কক্ষকগুলির অধিক্রমণের মাত্রা সর্বাধিক হওয়া প্রয়োজন। অধিক্রমণের মাত্রা যত বেশি হবে তাদের দ্বারা গঠিত আণবিক কক্ষকের স্থায়িত্ব তত বেশি হবে। অধিক্রমণের মাত্রা S হলে

$$S = \int \psi_A \psi_B \, d\tau .$$

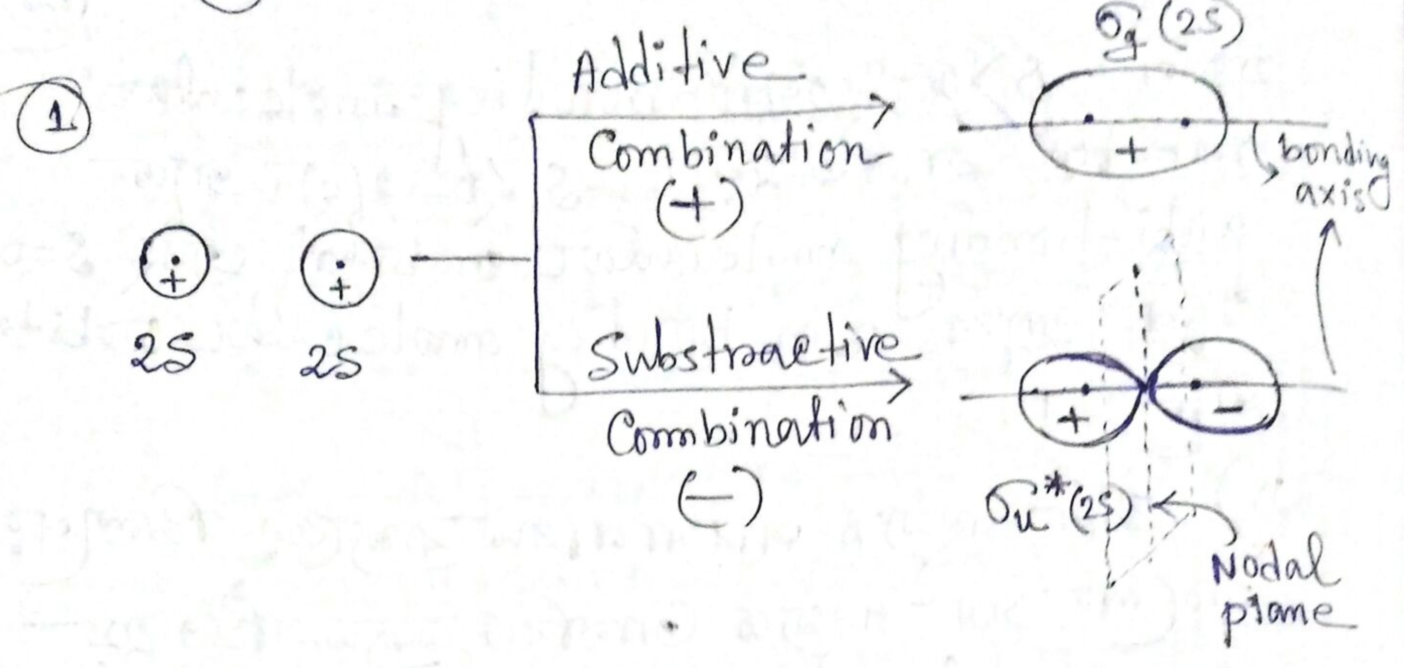
যখন $S>0$, তখন bonding molecular orbital গঠিত হয়। $S<0$ হলে তাকে anti-bonding molecular orbital এবং $S=0$ হলে তাকে non-bonding molecular orbital বলে।

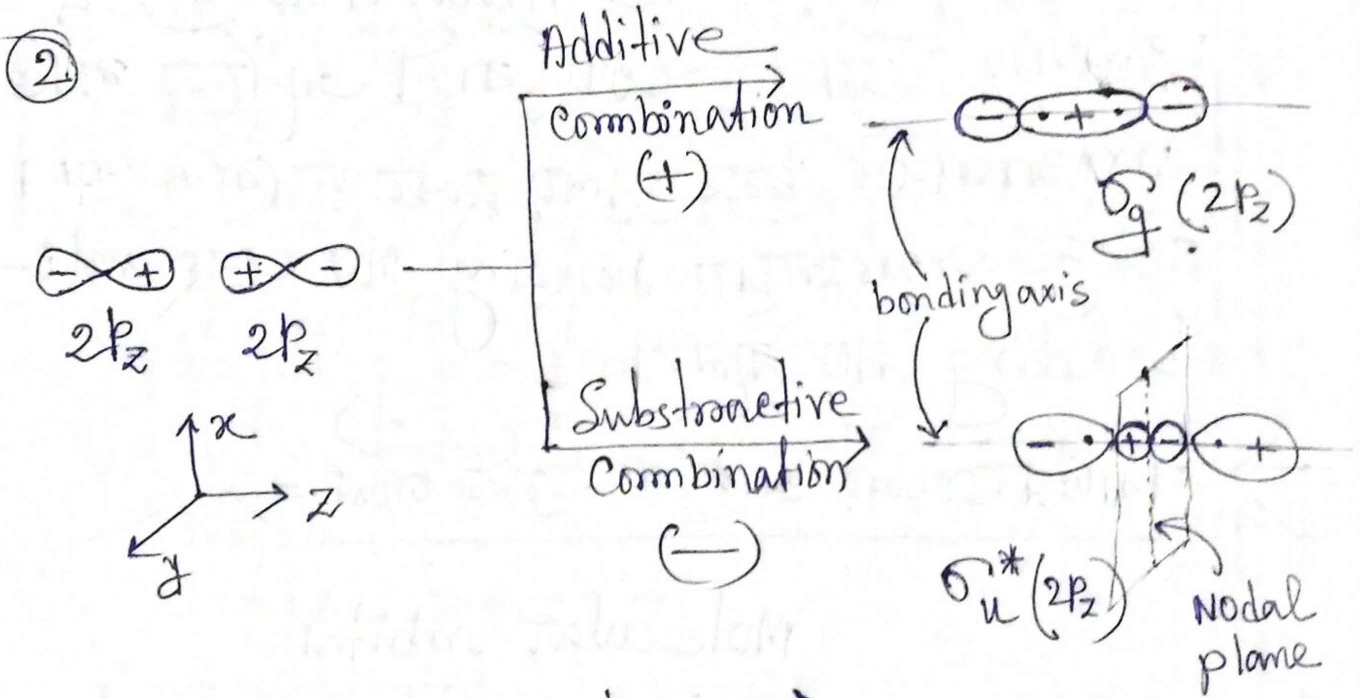
iv) সম সংখ্যক পারমাণবিক কক্ষকের মিলনের ফলে সম সংখ্যক আণবিক কক্ষক গঠিত হয় যার অর্ধেকের শক্তি পারমাণবিক কক্ষকগুলির তুলনায় কম হয় এবং বাকী অর্ধেকের শক্তি পারমাণবিক কক্ষকগুলির তুলনায় বেশি হয়। তাদের যথাক্রমে bonding MO এবং anti-bonding MO বলে।

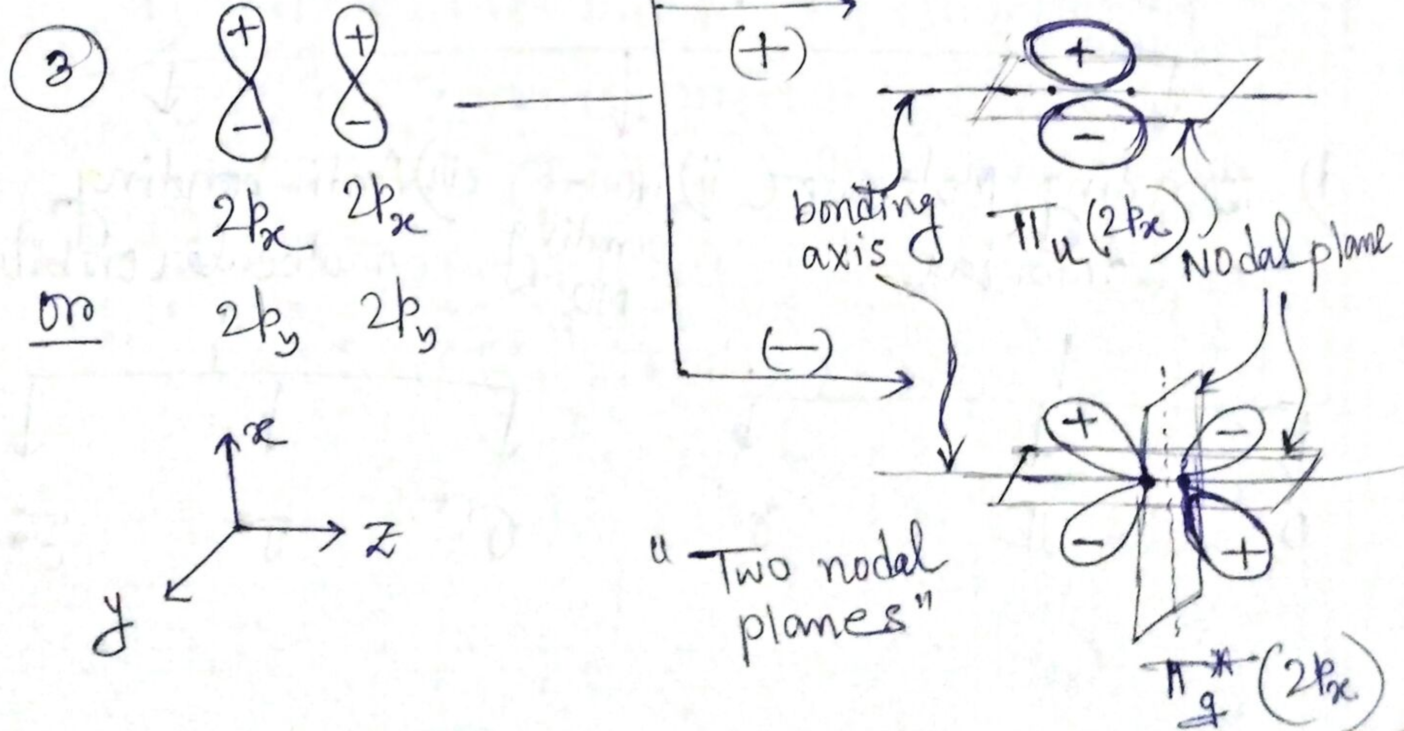
⇒ বিভিন্ন প্রকার আণবিক কক্ষক গঠন ⇒

Molecular orbital

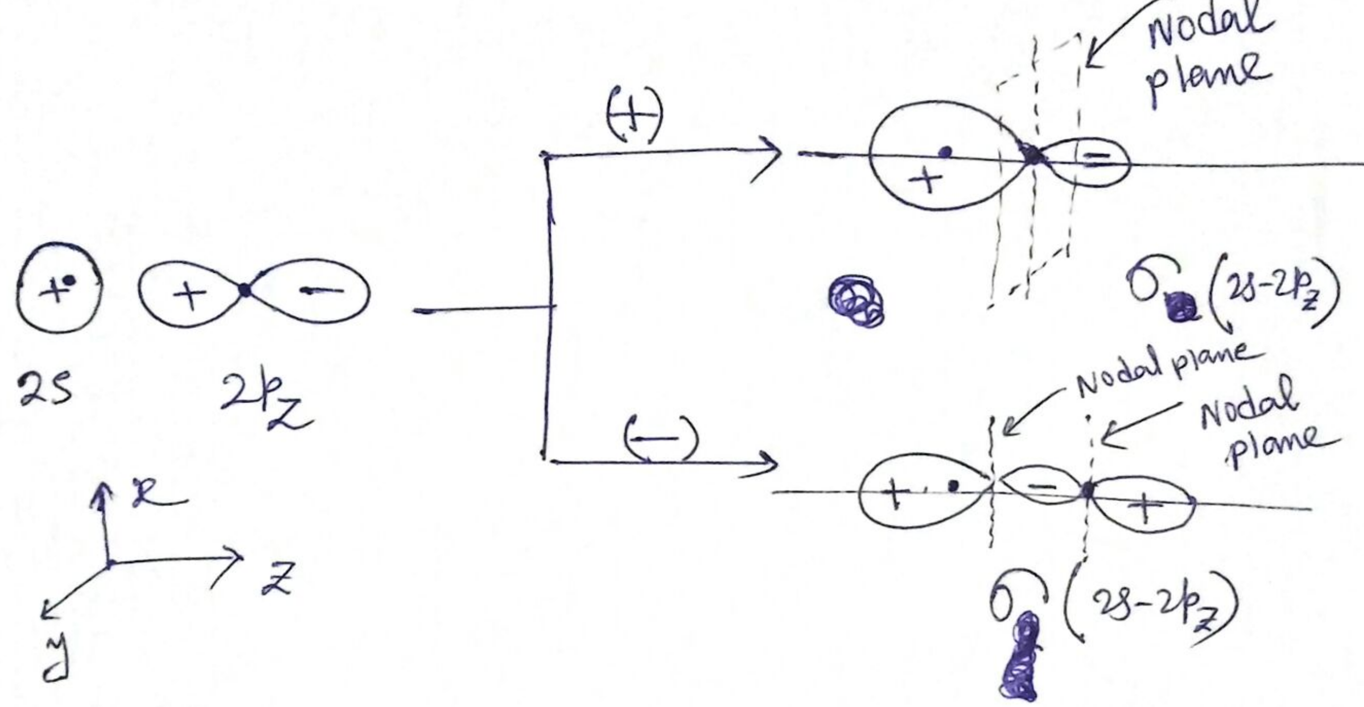
- i) Bonding Molecular orbital
  - σ
  - π
  - δ
- ii) Non-bonding MO
- iii) Anti-bonding molecular orbital
  - σ^*
  - π^*
  - δ^*


1.
2S
2S
Additive Combination (+)
$\sigma_g(2s)$
bonding axis
Substractive Combination (−)
$\sigma_u^*(2s)$
Nodal plane

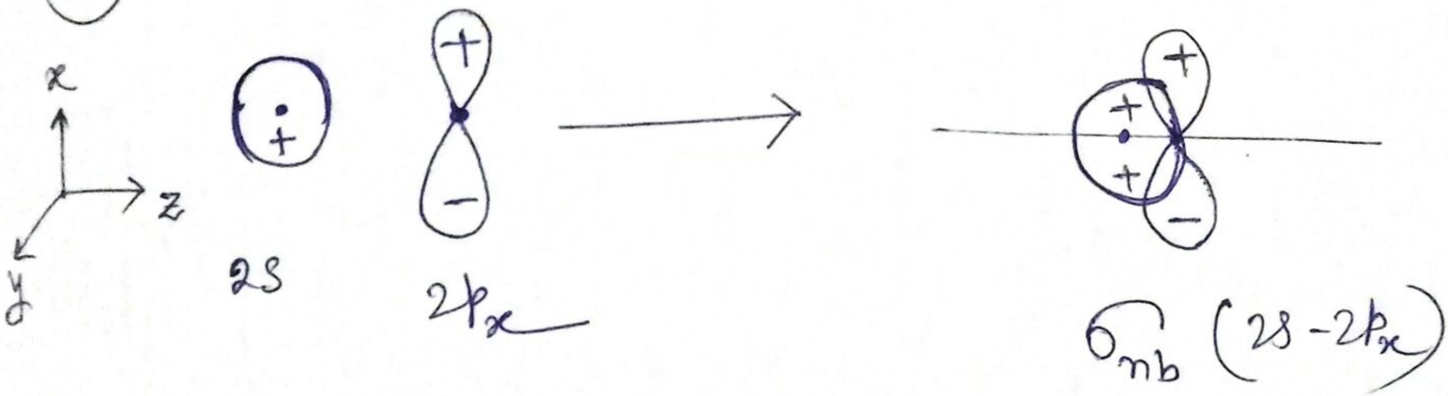

2.
$2p_z$
$2p_z$
x
z
y
Additive Combination (+)
$\sigma_g(2p_z)$
bonding axis
Substractive Combination (−)
$\sigma_u^*(2p_z)$
Nodal plane


3.
$2p_x$
$2p_x$
or
$2p_y$
$2p_y$
x
z
y
(+)
bonding axis
$\pi_u(2p_x)$
Nodal plane
(−)
"Two nodal planes"
$\pi_g^*(2p_x)$

(4)

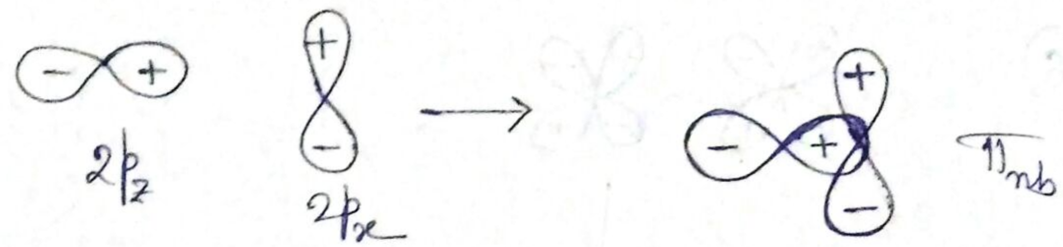


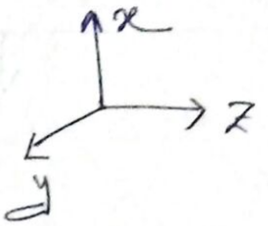
(5)



এক্ষেত্রে "++" অভিলেপন "+-" অভিলেপন দ্বারা বাতিল হয়ে যায়। অর্থাৎ অভিলেপনের মান শূন্য।

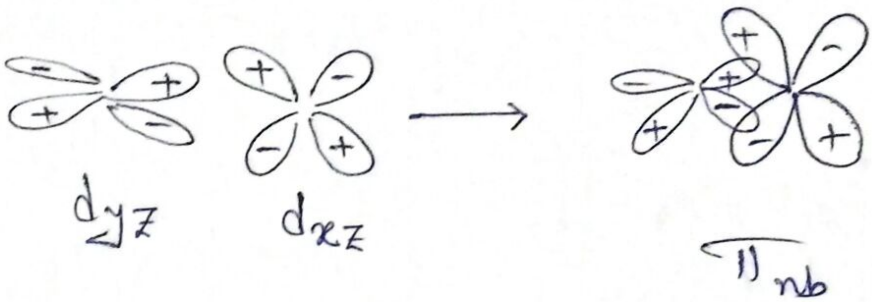
⑥





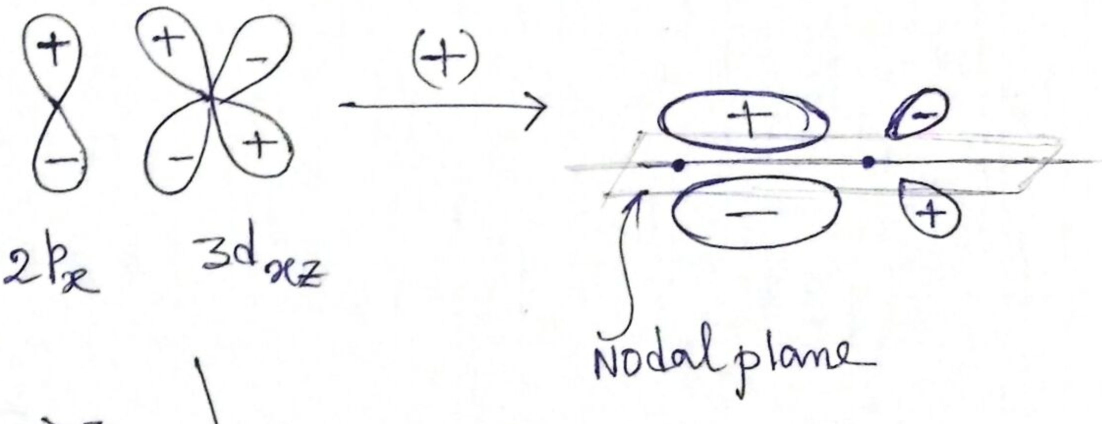
Non-bonding interaction

⑦

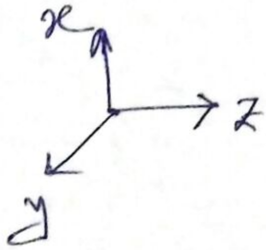


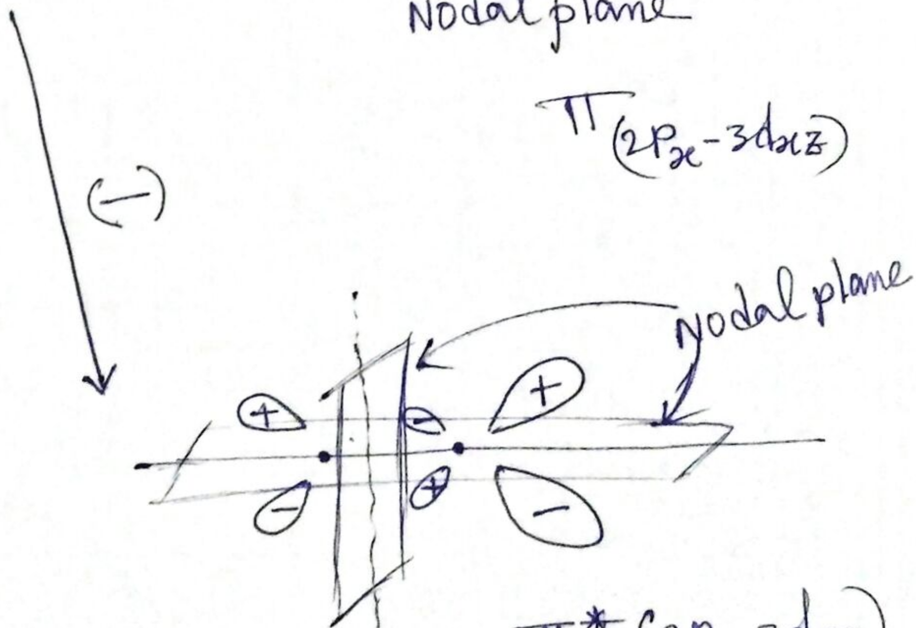
Non-bonding interaction

⑧



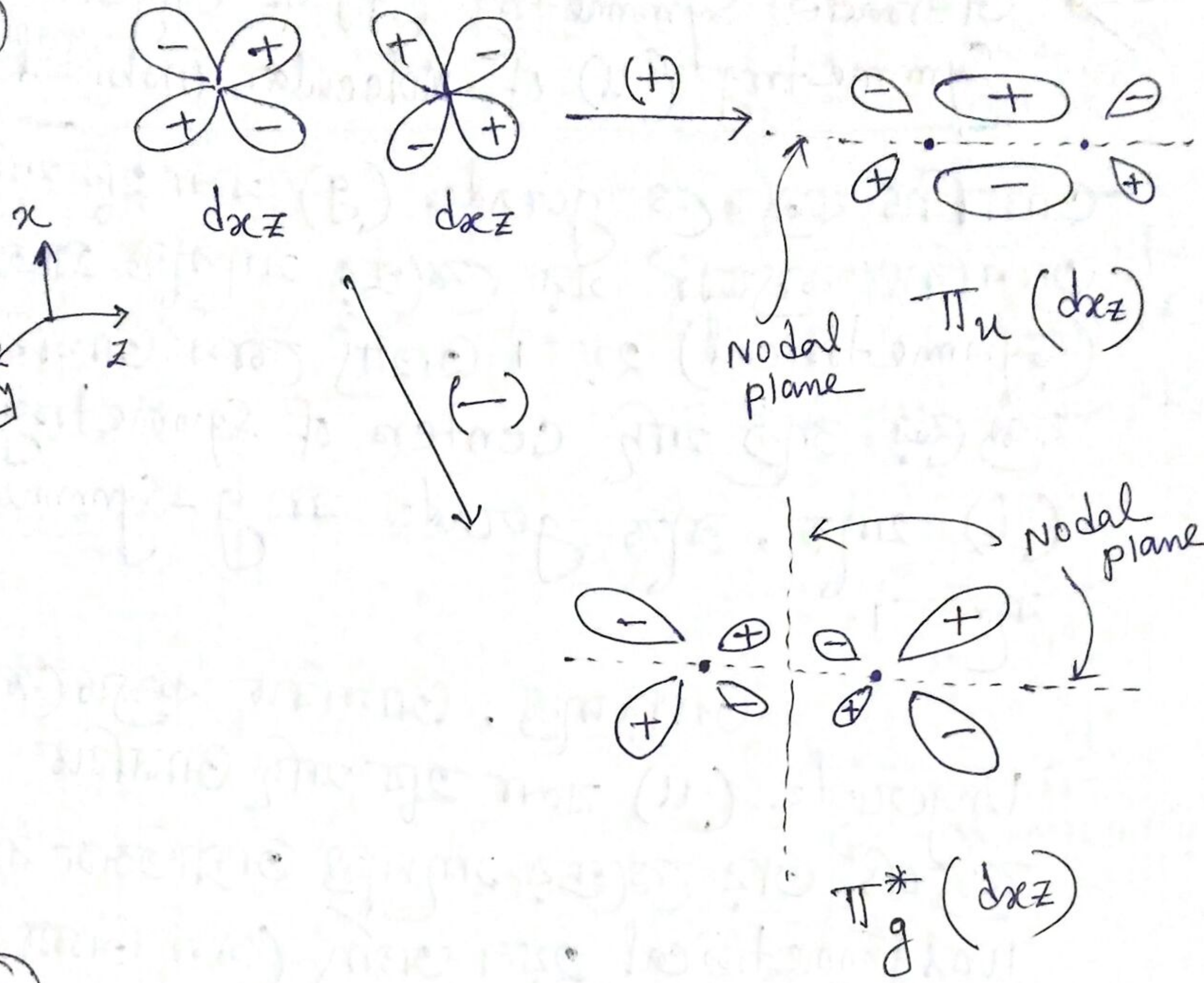
$\pi_{(2p_x - 3d_{xz})}$



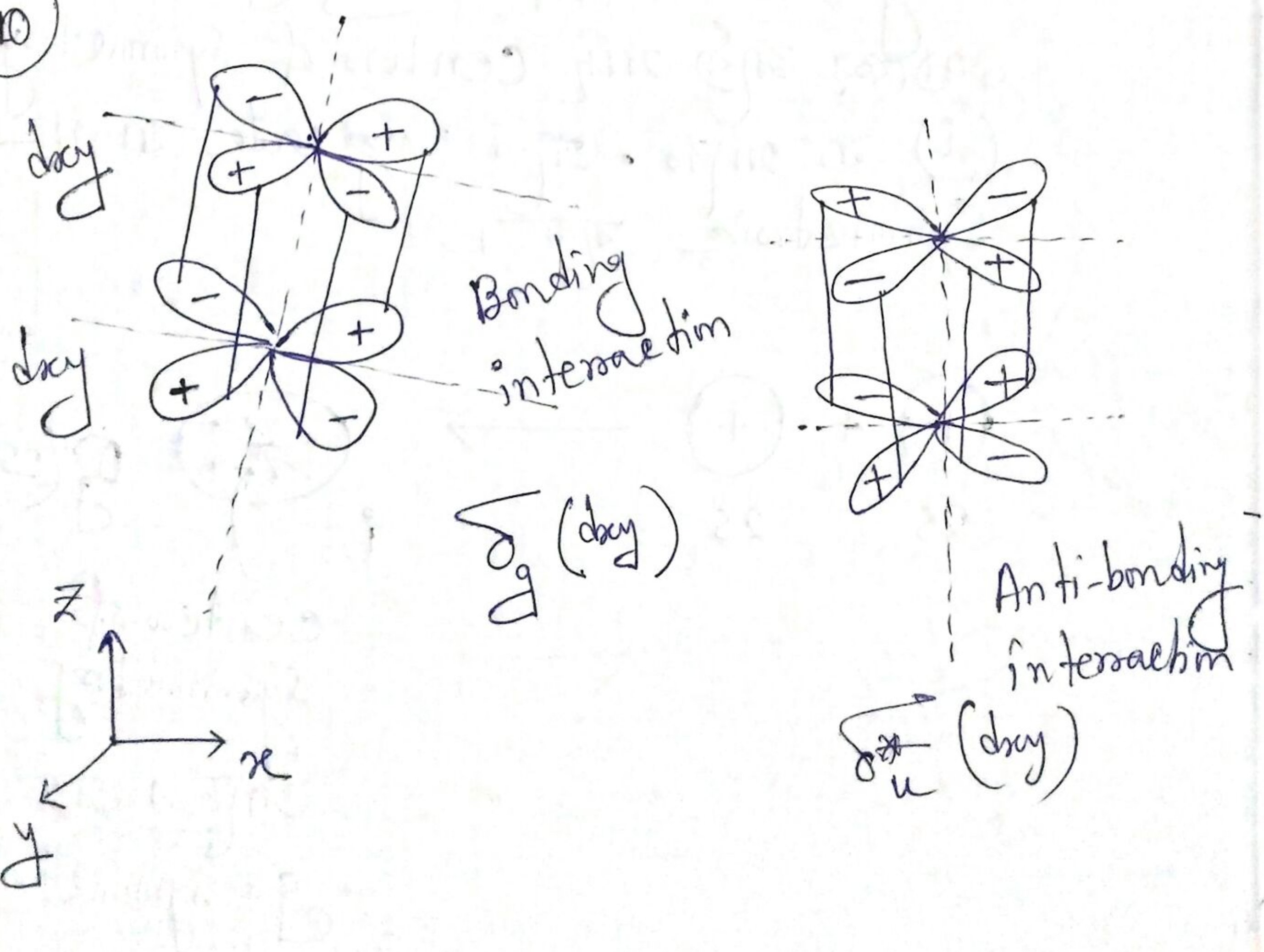


$\pi^{*}(2p_x - 3d_{xz})$

9


x
z
y
dxz
dxz
(+)
(−)
Nodal plane
πu (dxz)
Nodal plane
π*g (dxz)

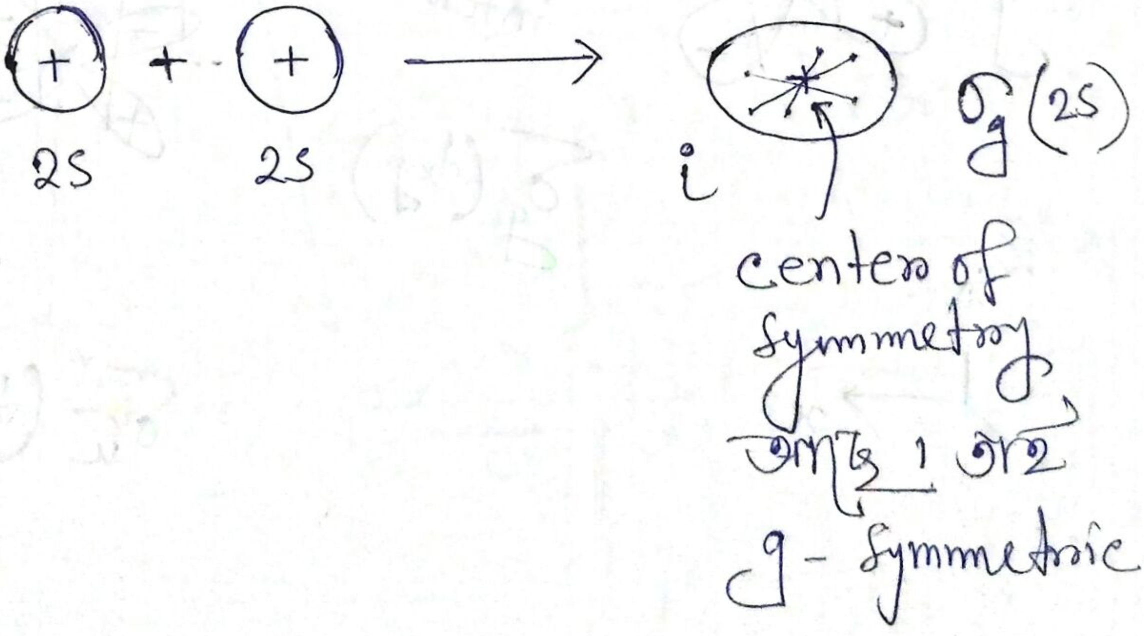
10

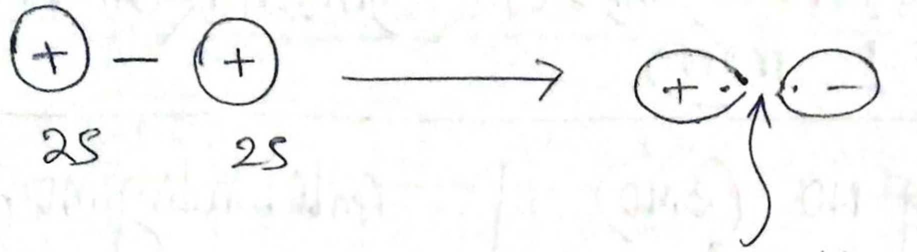

dxy
dxy
Bonding interaction
δg (dxy)
z
x
y
Anti-bonding interaction
δ*u (dxy)

⇒ Gerade Symmetry (g) & Ungerade Symmetry (u) of Molecular orbital

- আণবিক কক্ষককে gerade (g) বলা হবে যদি আণবিক কক্ষকটি তার কেন্দ্রের সাপেক্ষে প্রতিসম (symmetrical) হয়। অর্থাৎ কোন আণবিক কক্ষকের মধ্যে যদি center of symmetry (i) থাকে, তাকে gerade বা g-symmetric বলে।

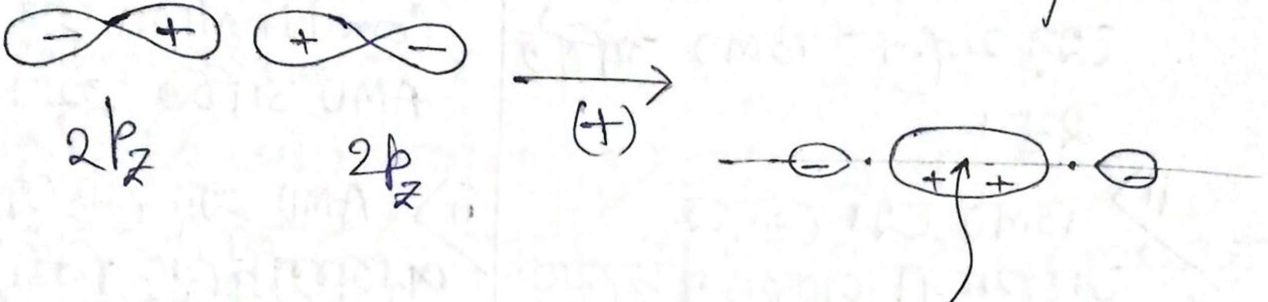
অপরপক্ষে, আণবিক কক্ষককে Ungerade (u) বলা হবে যদি আণবিক কক্ষকটি তার কেন্দ্রের সাপেক্ষে অপ্রতিসম বা unsymmetrical হয়। অর্থাৎ কোন আণবিক কক্ষকের মধ্যে যদি center of symmetry (i) না থাকে, তাকে ungerade বা u-symmetric বলে।





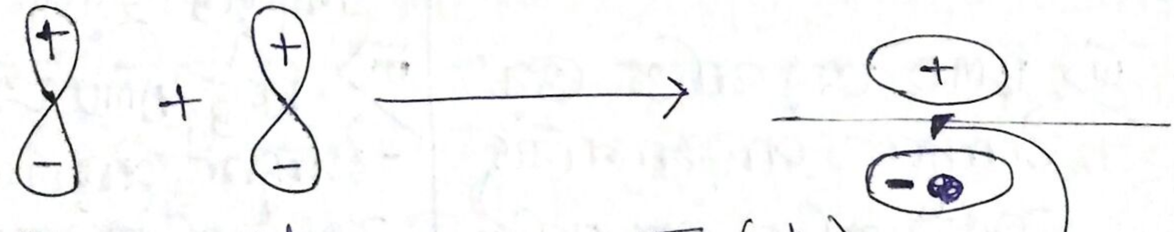
$\sigma_u^*(2s)$

center of symmetry নেই। i নেই। তাই u- symmetric.



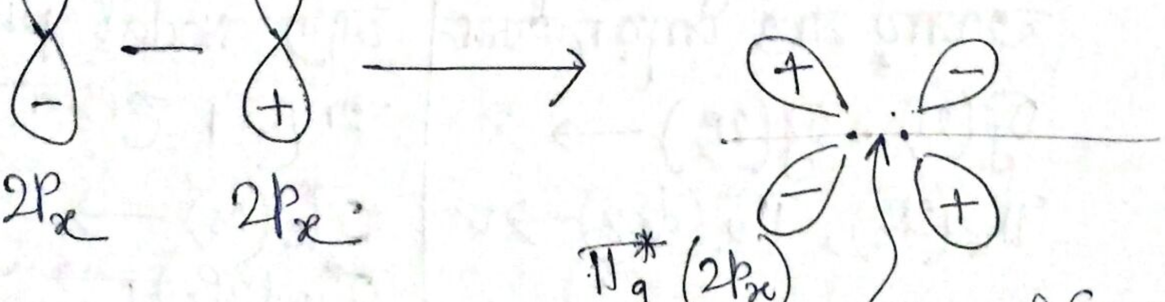
center of symmetry আছে।

$\sigma_g(2p_z)$



$\pi_u(2p_x)$

center of symmetry নেই। u- symmetric



$\pi_g^*(2p_x)$

center of symmetry

⇒ বন্ডিং আণবিক অরবিটাল এবং অ্যান্টিবন্ডিং আণবিক অরবিটালের পার্থক্য

Bonding MO (BMO)	Antibonding MO (AMO)
i) পারমাণবিক অরবিটাল গুলির additive combination এর ফলে BMO গঠিত হয়।	i) পারমাণবিক অরবিটাল গুলির Substractive Combination এর ফলে AMO গঠিত হয়।
ii) BMO এর ক্ষেত্রে সংযোজী পরমাণুদ্বয়ের নিউক্লিয়াস দুটির মধ্যে ইলেকট্রন মেঘের ঘনত্ব সর্বাধিক হয়।	ii) AMO এর ক্ষেত্রে পরমাণুদ্বয়ের নিউক্লিয়াস দুটির মধ্য থেকে ইলেকট্রন মেঘ অপসারিত হয়ে দূরবর্তী অংশে ঘনীভূত হয়।
iii) BMO এর শক্তি ওর উৎপাদক পারমাণবিক অরবিটাল গুলির প্রত্যেকটির শক্তি থেকে কম হয়।	iii) কিন্তু AMO এর শক্তি উৎপাদক পারমাণবিক অরবিটাল গুলির প্রত্যেকটির শক্তি অপেক্ষা বেশি হয়।
iv) BMO এর ক্ষেত্রে Nodal plane থাকতেও পারে আবার নাও পারে। যেমন- $\sigma_g(2s)$, $\sigma_g(2p_z) \longrightarrow \times$ $\pi_u(2p_x)$, $\pi_u(d_{xz}) \longrightarrow \checkmark$	iv) AMO এর ক্ষেত্রে সর্বদা দুটি নিউক্লিয়াসের মধ্যে Nodal plane থাকে। যেমন $\sigma^*_u(2s) \longrightarrow \checkmark$ $\sigma^*_u(2p_z) \longrightarrow \checkmark$ $\pi^*_g(2p_x) \longrightarrow \checkmark$