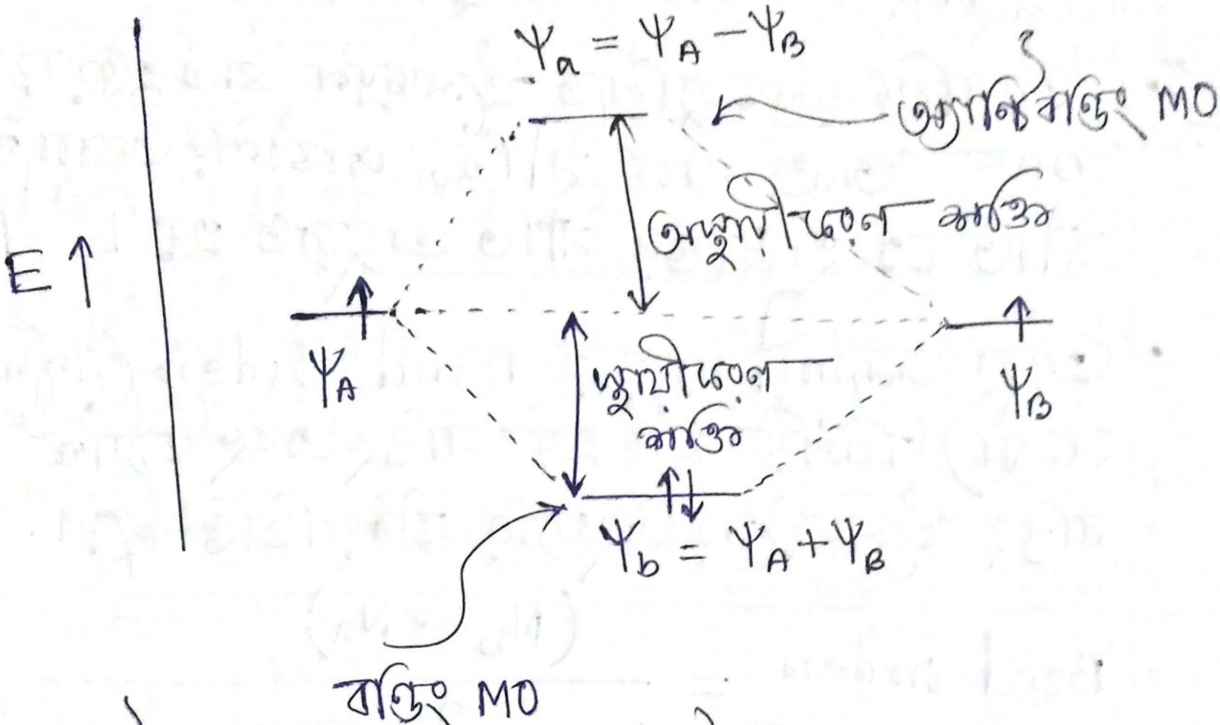
⇒ σ-আণবিক কক্ষক এবং π-আণবিক কক্ষকের পার্থক্য

σ-MO	π-MO
i) দুটি পরমাণবিক কক্ষকের head-on overlap এর ফলে σ-MO গঠিত হয়।	i) দুটি পরমাণবিক কক্ষকের lateral overlap এর ফলে π-MO গঠিত হয়।
ii) এক্ষেত্রে অধিক্রমণের বিস্তার অনেক বেশি হয় বলে σ-MO এর দ্বারা সৃষ্ট বন্ধন অধিক দৃঢ় হয়।	ii) এক্ষেত্রে অধিক্রমণের বিস্তার অনেক কম হয় বলে π-MO এর দ্বারা সৃষ্ট বন্ধন কম দৃঢ় হয়।
iii) এক্ষেত্রে internuclear axis বরাবর ইলেকট্রন মেঘ cylindrically symmetrical হয়।	iii) এক্ষেত্রে internuclear axis বরাবর ইলেকট্রন মেঘ cylindrically symmetrical হয়না।

⇒ পারমানবিক কক্ষক এবং আণবিক কক্ষকের পার্থক্য

পারমানবিক কক্ষক	আণবিক কক্ষক
i) পারমানবিক কক্ষকে ইলেকট্রন-মেঘ একটি নির্দিষ্ট নিউক্লিয়াসের আকর্ষণী বলের ক্ষেত্রে থাকে।	i) আণবিক কক্ষকে ইলেকট্রন-মেঘ একটি নির্দিষ্ট নিউক্লিয়াসের আকর্ষণী বলের ক্ষেত্রে না থেকে ঐ অণু সৃষ্টিকারী সমস্ত পরমাণুর নিউক্লিয়াসের আকর্ষণী বলের ক্ষেত্রে থাকে।
ii) পারমানবিক কক্ষক Monocentric.	ii) আণবিক কক্ষক polycentric.
iii) তরঙ্গ বলবিদ্যায় পারমানবিক কক্ষকগুলিকে তাদের তরঙ্গ অপেক্ষক দ্বারা প্রকাশ করা হয়।	iii) কিন্তু তরঙ্গ বলবিদ্যায় আণবিক কক্ষকগুলিকে ঐ অণু সৃষ্টিকারী পারমানবিক কক্ষকের রৈখিক সমন্বয়ের ফলে গঠিত আনুমানিক তরঙ্গ অপেক্ষক দ্বারা প্রকাশ করা হয়।
iv) পারমানবিক কক্ষকগুলিকে s, p, d, f ইত্যাদি বর্ণ দ্বারা প্রকাশ করা হয়।	iv) আণবিক কক্ষকগুলিকে $\sigma, \sigma^*, \pi, \pi^*, \delta, \delta^*$ ইত্যাদি চিহ্ন দ্বারা প্রকাশ করা হয়।

⇒ Energy level diagram, Electronic Configuration and Molecular behaviours



দুটি পারমাণবিক কক্ষকের রৈখিক সমন্বয়ে হলে একটি নিম্নশক্তি সম্পন্ন বন্ডিং মলিকুলার অরবিটাল এবং অন্য একটি উচ্চশক্তি সম্পন্ন অ্যান্টিবন্ডিং মলিকুলার অরবিটাল প্রাপ্ত হয়।

বন্ডিং আণবিক কক্ষক এবং অণু সৃষ্টিকারী পারমাণবিক কক্ষকের মধ্যে শক্তিস্তরের পার্থক্য কে বলে স্থায়ীকরণ শক্তি (Stabilization energy). আবার, অ্যান্টিবন্ডিং আণবিক কক্ষক এবং উৎপন্ন পারমাণবিক কক্ষকের মধ্যে শক্তির পার্থক্য কে বলে অস্থায়ীকরণ শক্তি (Destabilization energy).

- শক্তির নিত্যতা সূত্রানুযায়ী,

  স্থায়ীকরণ শক্তি = অস্থায়ীকরণ শক্তি।

- আণবিক কক্ষক গুলিতে ইলেকট্রন ভর্তি হওয়ার সময় আউফবাউ নীতি, পাউলির অপবর্জন নীতি এবং হুণ্ডের নীতি অনুসৃত হয়।

- অণুর সমযোজী বন্ধনের Bond order (বন্ধন মাত্রা) নির্ণয় করা হয় বন্ডিং এবং অ্যান্টি বন্ডিং ইলেকট্রনের সংখ্যার উপর ভিত্তি করে।

$$\text{Bond order} = \frac{(N_b - N_a)}{2}$$

N_b = No. of bonding electrons

N_a = No. of anti-bonding electrons

- Bond order > 0 হলে Molecule stable.
- Bond order ≤ 0 হলে Molecule unstable
- Bond order যত বেশি হবে, Bond length তত কম হবে এবং ঐ বন্ধনের বন্ধন শক্তি ও বন্ধন বিয়োজন শক্তি তত বেশি হবে।
- আণবিক ~~কক্ষ~~ কক্ষকে ইলেকট্রন বিন্যাস থেকে অণুর চৌম্বক ধর্ম সম্পর্কে ধারণা করা যায়। যদি সমস্ত ইলেকট্রন যুগ্ম অবস্থায় থাকে, তাহলে অণুটি তিরশ্চৌম্বকীয় (Diamagnetic) ধর্ম প্রদর্শন করে এবং যদি কোন অযুগ্ম ইলেকট্রন থাকে,

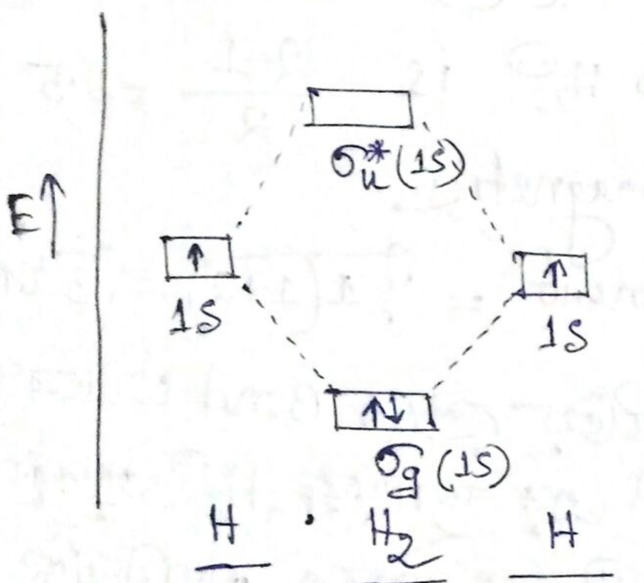
তাহলে অণুটি প্যারাচুম্বকীয় (paramagnetic) ধর্ম প্রদর্শন করবে।

Magnetic moment $= \sqrt{n(n+2)}$ bohr magneton (BM)

n = No. of unpaired electrons.

⇒ Energy level diagram for Homonuclear diatomic Molecule (H_2, He_2, Li_2, Be_2, B_2, C_2, N_2, O_2, F_2, Ne_2) :—

<u>H_2 Mol.</u>

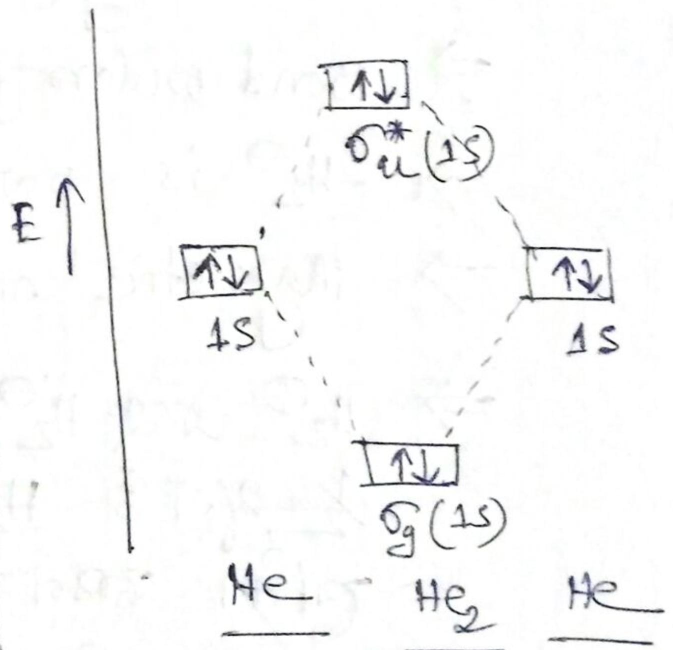


Electronic configuration
⇒ $\sigma_g(1s)^2$

∴ Bond order $= \frac{2-0}{2} = 1$

⇒ Diamagnetic

<u>He_2 Mol</u>



⇒ Electronic config.
$\sigma_g(1s)^2 \sigma_u^*(1s)^2$

⇒ Bond order $= \frac{2-2}{2} = 0$

⇒ Molecule is unstable

⇒ Does not exist.

⇒ Electronic configuration for $H_2^{\oplus}$:

$$\sigma_g(1s)^1$$

⇒ Bond order of $H_2^{\oplus}$ is 0.5

⇒ $H_2^{\oplus}$ is paramagnetic

⇒ Magnetic moment $= \sqrt{n(n+2)}$ BM

$$= \sqrt{1(1+2)} \text{ BM}$$

$$= \sqrt{1 \times 3} \text{ BM}$$

$$= \sqrt{3} \text{ BM}.$$

⇒ Electronic configuration of $H_2^{\ominus}$:

$$\sigma_g(1s)^2 \sigma_u^*(1s)^1$$

⇒ Bond order for $H_2^{\ominus}$ is $\frac{2-1}{2} = 0.5$

⇒ $H_2^{\ominus}$ is paramagnetic.

⇒ Magnetic moment $= \sqrt{1(1+2)} = \sqrt{3}$ BM.

⇒ $H_2^{\oplus}$ এবং $H_2^{\ominus}$ উভয় ক্ষেত্রে Bond order ½ হলেও $H_2^{\oplus}$ এর স্থায়িত্ব $H_2^{\ominus}$ অপেক্ষা বেশি। কারণ $H_2^{\oplus}$ এর ক্ষেত্রে অ্যান্টিবন্ডিং কক্ষক খালি অবস্থায় থাকে, কিন্তু $H_2^{\ominus}$ এর ক্ষেত্রে অ্যান্টিবন্ডিং কক্ষকে একটি ইলেকট্রন দ্বারা পূর্ণ থাকে।

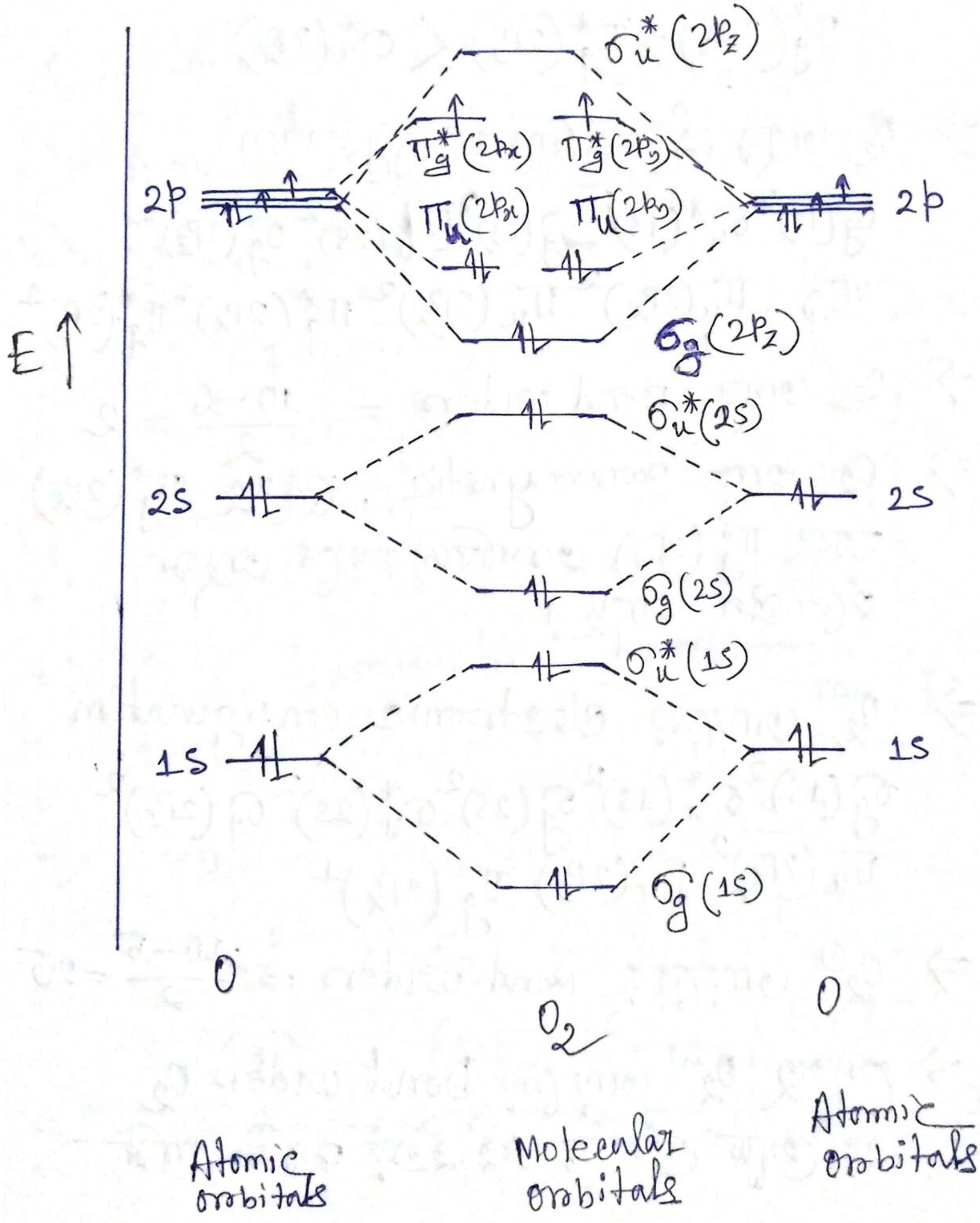
⇒ He_2 এর অস্তিত্ব না থাকলেও $He_2^{\oplus}$ এর ক্ষেত্রে ইলেকট্রনিক configuration $\sigma_g(1s)^2 \sigma_u^*(1s)^1$

সুতরাং bond order $= \frac{2-1}{2} = \frac{1}{2}$. সুতরাং $He_2^{\oplus}$ এর অস্তিত্ব আছে।

⇒ Energy level diagram for O_2, F_2, Ne_2

(যেক্ষেত্রে 2S-2p mixing হয়না)

(z axis taken as bonding axis)



⇒ O_2, F_2, Ne_2 এবং এদের আয়নিত species গুলোর ক্ষেত্রে energy level diagram একই রকম, কিন্তু electronic configuration আলাদা।

⇒ আণবিক কক্ষকগুলোর শক্তি অনুযায়ী ক্রম হল

$$\sigma_g(1s) < \sigma_u^*(1s) < \sigma_g(2s) < \sigma_u^*(2s) < \sigma_g(2p_z) < \pi_u(2p_x) = \pi_u(2p_y) < \pi_g^*(2p_x) = \pi_g^*(2p_y) < \sigma_u^*(2p_z)$$

⇒ O_2 অণুর ইলেকট্রনিক configuration

$$\sigma_g(1s)^2 \sigma_u^*(1s)^2 \sigma_g(2s)^2 \sigma_u^*(2s)^2 \sigma_g(2p_z)^2 \pi_u(2p_x)^2 \pi_u(2p_y)^2 \pi_g^*(2p_x)^1 \pi_g^*(2p_y)^1$$

⇒ O_2 অণুর Bond order $= \frac{10-6}{2} = 2$

⇒ O_2 অণু paramagnetic, যেহেতু $\pi_g^*(2p_x)$ এবং $\pi_g^*(2p_y)$ আণবিক কক্ষকে অযুগ্ম ইলেকট্রন আছে।

⇒ $O_2^{\oplus}$ আয়নের electronic configuration

$$\sigma_g(1s)^2 \sigma_u^*(1s)^2 \sigma_g(2s)^2 \sigma_u^*(2s)^2 \sigma_g(2p_z)^2 \pi_u(2p_x)^2 \pi_u(2p_y)^2 \pi_g^*(2p_x)^1$$

⇒ $O_2^{\oplus}$ আয়নের Bond order $= \frac{10-5}{2} = 2.5$

⇒ যেহেতু $O_2^{\oplus}$ আয়নের bond order O_2 এর থেকে বেশি, তাই ইহার শক্তি বেশি

এবং বন্ধন দৈর্ঘ্য কম।

⇒ $O_2^{\oplus}$ paramagnetic, যেহেতু অযুগ্ম ইলেকট্রন আছে।

⇒ $O_2^{\ominus}$ (সুপার অক্সাইড) আয়নের ইলেকট্রন বিন্যাস

$\sigma_g(1s)^2 \sigma_u^*(1s)^2 \sigma_g(2s)^2 \sigma_u^*(2s)^2 \sigma_g(2p_z)^2$
$\pi_u(2p_x)^2 \pi_u(2p_y)^2 \pi_g^*(2p_x)^2 \pi_g^*(2p_y)^1$

⇒ Bond order $= \frac{10-7}{2} = 1.5$

⇒ Bond length in $O_2^{\ominus}$ > Bond length in O_2

⇒ $O_2^{\ominus}$ paramagnetic.

⇒ O_2^{2-} (peroxide) ion এর ইলেকট্রন বিন্যাস একই রকম হয়, শুধু $\pi_g^*(2p_y)$ আণবিক কক্ষকে অতিরিক্ত একটি ইলেকট্রন থাকে।

⇒ Bond order $= \frac{10-8}{2} = 1$

⇒ O_2^{2-} diamagnetic, যেহেতু কোনো অযুগ্ম ইলেকট্রন নেই।

⇒ বন্ধনক্রমের ক্রম হল —

$O_2^{2-} < O_2^{\ominus} < O_2 < O_2^{\oplus}$

(1) (1.5) (2) (2.5)

⇒ বন্ধন দৈর্ঘ্যের ক্রম — $O_2^{2-} > O_2^{\ominus} > O_2 > O_2^{\oplus}$

⇒ F_2 অণুর ক্ষেত্রে electronic configuration —
(Total $9+9 = 18$ টি ইলেকট্রন আছে)

$\sigma_g(1s)^2 \sigma_u^*(1s)^2 \sigma_g(2s)^2 \sigma_u^*(2s)^2 \sigma_g(2p_z)^2 \pi_u(2p_x)^2$
$\pi_u(2p_y)^2 \pi_g^*(2p_x)^2 \pi_g^*(2p_y)^2$.

⇒ বন্ধনক্রম $= \frac{10-8}{2} = 1$

⇒ F_2 is diamagnetic.

⇒ Ne_2 এর electronic configuration —
(Total $10+10 = 20$ টি ইলেকট্রন আছে)

$\sigma_g(1s)^2 \sigma_u^*(1s)^2 \sigma_g(2s)^2 \sigma_u^*(2s)^2 \sigma_g(2p_z)^2 \pi_u(2p_x)^2$
$\pi_u(2p_y)^2 \pi_g^*(2p_x)^2 \pi_g^*(2p_y)^2 \sigma_u^*(2p_z)^2$

⇒ বন্ধনক্রম $= \frac{10-10}{2} = 0$

⇒ Ne_2 অণুর অস্তিত্ব নেই।