اکائی 4

5165CH04

# کیمیائی بندش اور سالماتی ساخت

# (Chemical Bonding and Molecular Structure)

© NCERT not to be republished

## مقاصد

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

- کیمیائی بندش کے کوسل-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 بنا سکیں؛
- مختلف قسم کے بند کی تشکیل کے عمل کو سمجھا 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 سمتی خصوصیات کی پیشین گوئی کر سکیں؛
- s-، p- اور d- اربٹل کی شمولیت سے ہائبرائیڈائزیشن (Hybridisation) کی مختلف اقسام کی وضاحت کر سکیں اور سادہ شریک گرفت سالموں کی شکل بنا سکیں؛
- ائونیوکلیر دو ایٹمی سالموں کے سالماتی اربٹل نظریہ (Molecular Orbital Theory) کو بیان کر سکیں؛
- ہائڈروجن بند کے تصور کی وضاحت کر سکیں۔

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

مادہ ایک یا مختلف قسم کے عناصر سے مل کر بنتا ہے۔ عام حالات میں نوبل گیسوں کے علاوہ اور کوئی عنصر قدرت میں آزاد حالت میں نہیں پایا جاتا ہے۔ تاہم ایٹموں کا ایک مجموعہ ایک نوع کی قسم میں نمایاں خاصیتوں کے ساتھ پایا جاتا ہے۔ ''ایٹموں کے ایسے گروپ کو سالمہ (Molecular) کہتے ہیں۔ ظاہر ہے کہ ایک سالمے میں ایٹموں کو باندھنے کے لیے کوئی قوت درکار ہوگی **وہ قوتِ کشش جو مختلف اجزا (ایٹم، آین وغیرہ) کو مختلف کیمیائی انواع میں ایک ساتھ باندھے رکھتی ہے، کیمیائی بند کہلاتا ہے۔**'' چونکہ ایک کیمیائی مرکب کی تشکیل مختلف عناصر کے علیحدہ علیحدہ طریقوں سے ملنے کے نتیجہ میں ہوتی ہے۔ ایٹم کیوں متحد ہوتے ہیں؟ کچھ مخصوص اتحاد ہی کیوں ممکن ہیں؟ ایسا کیوں ہے کہ کچھ ایٹم متحد ہوتے ہیں اور کچھ نہیں؟ سالمات کی مخصوص ساخت کیوں ہوتی ہے؟ ان سوالات کا جواب دینے کے لیے وقتاً فوقتاً مختلف تصورات اور نظریات پیش کیے گئے ہیں۔ یہ کوسل-لیوس اپروچ، ویلنس شیل الیکٹران پیئر ریپلژن تھیوری (VSEPR)، ویلنس بونڈ (VB) تھیوری اور مولیکولر آربٹل (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۔

## 4.1 کیمیائی بندش کے لیے کوسیل-لیوس کا طریقۂ 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 کوسیل اور لیوس نے آزادانہ طور پر ایک تسلّی بخش وضاحت پیش کرنے میں کامیابی حاصل کی۔ وہ پہلے شخص تھے جنھوں 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 گھرے ہوئے ہوں گے۔ الیکٹرانوں کا یہ آکٹیٹ (Octet) ایک مخصوص مستحکم الیکٹرانی 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 جُڑے ہوئے ہوتے ہیں۔''** سوڈیم اور کلورین کے معاملے میں یہ ایک الیکٹران کی منتقلی کی شکل میں ہوسکتا ہے جب سوڈیم کا ایک الیکٹران کلورین پر منتقل ہو جاتا ہے اور $Na^+$ اور $Cl^-$ آین بنتے ہیں۔ دوسرے سالموں جیسے $Cl_2$، $H_2$، $F_2$ وغیرہ میں دو ایٹموں کے درمیان ایک الیکٹران کے جوڑے کے اشتراک سے بند بنتا ہے۔ اس عمل میں ہر ایٹم **الیکٹرانوں کے باہری مستحکم آکٹیٹ** حاصل کر لیتا ہے۔

**لِیوس علامتیں:** سالمہ کے بننے کے دوران کیمیائی اتحاد میں صرف باہری الیکٹران ہی حصّہ لیتے ہیں اور وہ گرفتی الیکٹران (Valence Eletron) کہلاتے ہیں۔ اندرونی الیکٹران کافی محفوظ ہوتے ہیں اور عام طور پر اتحادی عمل میں حصّہ نہیں لیتے۔ جی۔این۔ لیوس، امریکی کیمیاداں نے ایٹم میں گرفتی 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 اردگرد 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 کوسل نے مندرجہ ذیل حقائق کی سمت توجہ دلائی:**

- دوری جدول میں بہت زیادہ برقی منفی ہیلوجن اور بہت زیادہ برقی مثبت قلوی دھاتیں نوبل گیسوں کے ذریعہ جُدا کی گئی ہیں۔
- ہیلوجن ایٹم سے منفی آین کے بننے اور قلوی دھات سے ایک مثبت آین بننے کا تعلق متعلقہ ایٹموں کے ذریعہ الیکٹران حاصل کرنے یا گنوانے سے ہے۔
- اس طرح بننے والے منفی اور مثبت آین مستحکم نوبل گیسوں کا الیکٹرانی تشکل حاصل کر لیتے ہیں۔ نوبل گیسوں میں (ہیلیم کے علاوہ جس میں صرف دو الیکٹران ہوتے ہیں) خاص طور پر آٹھ الیکٹرانوں (Octet) کا مستحکم تشکل پایا جاتا ہے۔ $-ns^2np^6$
- منفی اور مثبت آین برقی سکونی کشش (Electrostatic Attraction) کے ذریعہ قائم رہتے ہیں۔

مثال کے طور پر مندرجہ بالا اسکیم کے تحت سوڈیم اور کلورین سے سوڈیم کلورائڈ کا بننا اس طرح واضح کیا جاسکتا ہے:

| | | |
|---|---|---|
| Na | → | $Na^+ + e^-$ |
| [Ne] $3s^1$ | | [Ne] |
| $Cl + e^-$ | → | $Cl^-$ |
| [Ne] $3s^2\ 3p^5$ | | [Ne] $3s^2\ 3p^6$ or [Ar] |
| $Na^+ + Cl^-$ | → | NaCl or $Na^+Cl^-$ |

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

| | | |
|---|---|---|
| Ca | → | $Ca^{2+} + 2e^-$ |
| [Ar] $4s^2$ | | [Ar] |
| $F + e^-$ | → | $F^-$ |
| [He] $2s^2\ 2p^5$ | | [He] $2s^2\ 2p^6$ or [Ne] |
| $Ca^{2+} + 2F^-$ | → | $Ca^{2+}(F^-)_2$ or $CaF_2$ |

© NCERT not to be republished

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

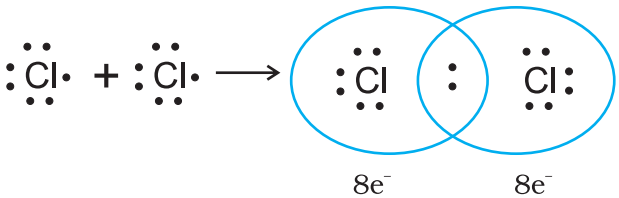
کوسل کے اصول مسلمہ (Poslutates) الیکٹران کی منتقلی کے ذریعہ آین بنے اور آینی قلمی مرکبات بننے سے متعلق جدید تصورات کے لیے بنیاد فراہم کرتے ہیں۔ آینی مرکبات کو سمجھنے اور انہیں منظّم کرنے میں اس کے خیالات بہت اہم ثابت ہوئے ہیں۔ اس کے ساتھ ہی اس نے اس حقیقت کو بھی تسلیم کیا ہے کہ مرکبات کی ایک بڑی تعداد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

### 4.1.1 آکٹیٹ کا قاعدہ (Octet Rule)

1916 میں کوسل اور لیوس نے ایٹموں کے درمیان کیمیائی اتحاد کا ایک اہم نظریہ پیش کیا ہے جیسے کیمیائی بندش کا الیکٹرانی نظریہ کہتے ہیں۔ اس کے مطابق ایک ایٹم دوسرے ایٹم کو گرفتی الیکٹران (Valence Electron) منتقل کر کے (حاصل کر کے یا گنوا کر) اتحاد کر سکتے ہیں یا گرفتی الیکٹرانوں کا ساجھا کر سکتے ہیں تا کہ وہ اپنے گرفتی خول میں آکٹیٹ قائم کر سکیں۔ یہ **آکٹیٹ قاعدہ** کہلاتا ہے۔

### 4.1.2 شریک بندش بند (Covalent Bond)

**لینگمو یئر** (1919) نے لیوس کے اصول مسلّمہ کو بہتر بنانے کے لیے آکٹیٹ کے ساکن مکعبی ترتیب کے تصور کو رد کر کے **شریک گرفت بند (Covalent Bond)** کی اصطلاح پیش کی۔ لیوس۔لینگمو یئر نظریے کو کلورین کے سالمہ $Cl_2$ کے بننے کے عمل کے ذریعہ سمجھا جاسکتا ہے۔ Cl ایٹم جس کا الیکٹرانی تشکل $[Ne]3s^2 3p^5$ 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 ساجھا 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 نوبل گیس (یعنی آرگن) بیرونی شیل آکٹیٹ حاصل کر لیتے ہیں۔



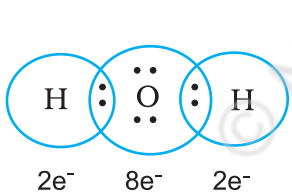

یا Cl – Cl

دو کلورین ایٹموں کے درمیان شریک گرفت بند

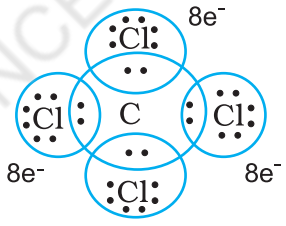
''یہ نقطے الیکٹران کو ظاہر کرتے ہیں۔ اس طرح کی ساخت کو لیوس ڈاٹ ساخت کہا جاتا ہے۔''

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

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




H ایٹم الیکٹران کا ڈپلیٹ اور O آکٹیٹ اختیار کرتے ہیں۔

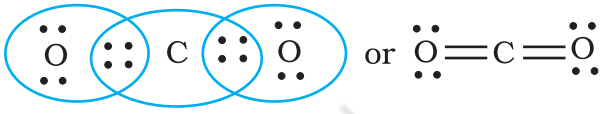



چار Cl ایٹم میں سے ہر ایک Cl اور C ایٹم الیکٹران کا آکٹیٹ اختیار کرتے ہیں۔

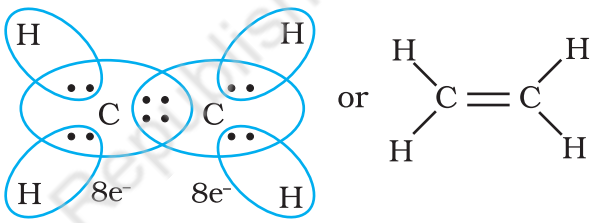
''اس طرح جب دو ایٹم اپنے درمیان الیکٹران کے ایک جوڑے میں شرکت کرتے ہیں تو وہ واحد شریک گرفت بند کے ذریعہ جڑے ہوئے ہوتے ہیں۔'' بہت سے مرکبات میں ایٹموں کے درمیان کثیر بند ہوتے ہیں۔ دو ایٹموں کے درمیان ایک الیکٹران جوڑے سے زیادہ کی شرکت سے کثیر بند بنتے ہیں۔ اگر دو ایٹموں کے درمیان دو الیکٹران جوڑے

© NCERT not to be Republished

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

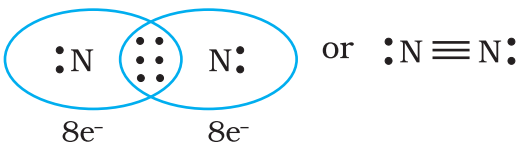



$CO_2$ سالمے میں دوہرا بند




$C_2H_4$ سالمہ

**جب ساجھا کرنے والے ایٹم تین الیکٹران جوڑوں میں شرکت کرتے ہیں جیسا کہ دو نائٹروجن ایٹم ایک نائٹروجن سالمے میں یا دو کاربن ایٹم ایک ایتھائین کے سالمے 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)]

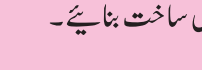
لیوس ڈاٹ ساخت سالموں اور آئنوں میں مشترک الیکٹران جوڑوں اور آکٹیٹ قاعدے کی اصطلاح میں بندش کی تصویر مہیا کرتے ہیں۔ اگرچہ یہ شکل سالمے کی بندش اور خصوصیات کو مکمل طور پر واضح نہ کر سکتی ہو پھر بھی یہ کسی حد تک سالمے کے بننے اور اس کی خصوصیات کو سمجھنے میں مدد کرتی ہے۔ لہٰذا سالمے کا لیوس ڈاٹ ساخت لکھنا بہت فائدے مند ہوتا ہے۔ مندرجہ ذیل اقدامات کی مدد سے لیوس ڈاٹ ساخت لکھی جا سکتی 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 $CH_4$ سالمے میں بندش کے لیے 8 گرفتی الیکٹران دستیاب ہیں (چار کاربن سے اور 4 ہائڈروجن کے چار ایٹموں سے)۔
- این آین کے لیے ہر ایک منفی چارج کا مطلب ہے ایک الیکٹران کا داخل ہونا۔ کیٹ آین کے لیے ہر مثبت چارج کے لیے گرفتی الیکٹرانوں کی کل تعداد میں سے ایک الیکٹران گھٹایا جائے گا۔ مثال کے طور پر $CO_3^{2-}$ آین کے لیے دو منفی چارج کا مطلب ہے تعدیلی ایٹموں کے ذریعے مہیّا کیے گئے الیکٹرانوں کے علاوہ دو الیکٹران زائد ہیں۔ $NH_3^+$ آین کے لیے ایک مثبت چارج کا مطلب ہے کہ تعدیلی ایٹموں کے گروپ میں سے ایک الیکٹران کم ہو گیا۔
- متحد ہونے والے ایٹموں کی کیمیائی علامتیں جانتے ہوئے اور مرکب کے ساختی ڈھانچہ 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 سالمے/آین 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۔

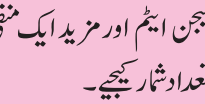
جدول 4.1 میں کچھ سالموں/آینوں کے لیوس نمونے پیش کیے گئے ہیں۔

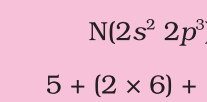
© NCERT not to be republished

**جدول 4.1 کچھ سالموں کے لیوس نمونے**



| سالمے/آین | | لیوس اظہار |
|---|---|---|
| $H_2$ | H : H* | H – H |
| $O_2$ | :Ö::Ö: | :Ö=Ö: |
| $O_3$ | $\ddot{O}^+$ / :Ö: :Ö:$^-$ | :O=Ö$^+$–Ö:$^-$ |
| $NF_3$ | :F̤: N̤ :F̤: / :F̤: | :F–N–F: / :F: |
| $CO_3^{2-}$ | [:Ö: C :Ö: / :O:]$^{2-}$ | [:Ö–C(=O)–Ö:]$^{2-}$ |
| $HNO_3$ | Ö:: N$^+$ :Ö:H / :Ö:$^-$ | Ö =N$^+$–Ö–H / :Ö:$^-$ |





* ہائڈروجن کاھر ایك ایٹم، ھیلیم کا تشکل اختیار کرتا ھے۔ (الیکٹرانوں کا ڈپلیٹ)

**مسئلہ 4.1**

CO کے لیے لیوس ڈاٹ ساخت لکھیے

**حل**

**قدم 1:** کاربن اور آکسیجن ایٹموں کے کُل گرفتی الیکٹرانوں کی تعداد معلوم کیجیے۔ کاربن اور آکسیجن کے باہری (گرفتی) خول تشکل بالترتیب اس طرح ہیں $2s^2\ 2p^2$ اور $2s^2\ 2p^4$۔ دستیاب گرفتی الیکٹران ہیں $4 + 6 = 10$۔

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

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

:C :Ö: or :C — Ö:

یہ کاربن کے آکٹیٹ کو مکمل نہیں کرتی لہٰذا 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۔




or :C≡O:

**مسئلہ 4.2**

نائٹرائٹ آین کے لیے لیوس ساخت بنائیے۔

**حل**

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

$$N(2s^2\ 2p^3),\ O\ (2s^2\ 2p^4)$$

$$5 + (2 \times 6) + 1 = 18 \text{ الیکٹران}$$

**قدم 2:** $NO_2^-$ کا ساختی ڈھانچہ اس طرح لکھا جائے گا:

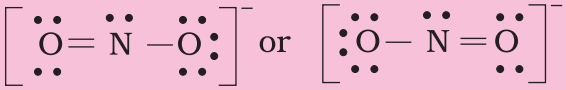
O N O

**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۔

[:Ö: :N̈: :Ö:]$^-$

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

[Ö::N̈: :Ö:]$^-$



or

[Ö= N̈ –Ö:]$^-$ or [:Ö– N̈ =Ö]$^-$

## 4.1.4 فارمل چارج (Formal Charge)

لیوس ڈاٹ ساخت عام طور پر سالموں کی اصل شکل کو ظاہر نہیں کرتے۔ کثیر ایٹمی آینوں میں چارج کُل آین پر ہوتا ہے نہ کہ کسی ایک ایٹم پر۔ لہٰذا یہ ممکن ہے کہ ہر ایک ایٹم کو ایک فارمَل چارج دیا جائے۔ ایک کثیر ایٹمی سالمے یا آین میں کسی ایٹم کا فارمَل چارج تنہا یا آزاد حالت میں اس ایٹم

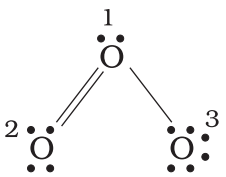
© NCERT Not to be Republished

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

$$\text{لیوس ساخت میں کسی ایٹم پر فارمل چارج} = \left[\begin{array}{c}\text{آزاد ایٹم پر گرفتی الیکٹرانوں کی}\\ \text{کل تعداد}\end{array}\right] - \left[\begin{array}{c}\text{غیر بندشی (تنہا جوڑے)}\\ \text{کے الیکٹرانوں کی کل تعداد}\end{array}\right] - (1/2)\left[\begin{array}{c}\text{بندشی الیکٹرانوں}\\ \text{(مشترک) کی کل تعداد}\end{array}\right]$$

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

آیئے اوزون سالمے 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

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

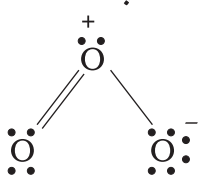
- سرے پر O جسے 2 نشان دیا گیا ہے

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

- سرے پر O جسے 3 نشان دیا گیا ہے

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

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




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

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

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

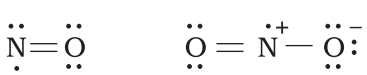
#### مرکزی ایٹم کا نا مکمل آکٹیٹ (The incomplete octet of the central atom)

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 LiCl، $BeH_2$ اور $BCl_3$ وغیرہ۔

Li، Be اور B کے پاس بالترتیب 1، 2 اور 3 گرفتی الیکٹران ہوتے ہیں۔ اس قسم کے کچھ اور مرکبات $AlCl_3$ اور $BF_3$ ہیں۔

#### طاق الیکٹران سالمے (Odd-electron Molecules)

وہ سالمے جن میں الیکٹران کی تعداد طاق ہوتی ہے جیسا کہ نائٹرک آکسائڈ NO اور نائٹروجن ڈائی آکسائڈ $NO_2$ میں آکٹیٹ قاعدہ تمام ایٹموں کے لیے اطمینان بخش نہیں ہے۔

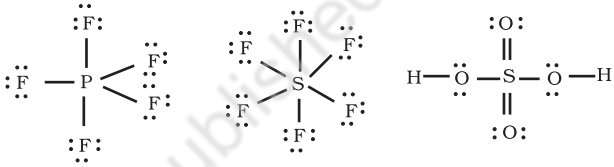



© NCERT Not to be Republished

### توسیعی آکٹیٹ *(The Expanded Octet)*

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

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



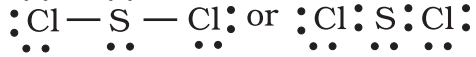


$PF_5$ — P کے گرد 10 الیکٹران

$SF_6$ — S کے گرد 12 الیکٹران

$H_2SO_4$ — S کے گرد 12 الیکٹران

دلچسپ بات یہ ہے کہ، سلفر ایسے بہت سے مرکبات بناتا ہے جن میں آکٹیٹ قاعدہ کا استعمال ہوتا ہے۔ سلفر ڈائی کلورائڈ 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 نوبل گیسوں کی غیر عاملیت ہے۔ تاہم کچھ نوبل گیسیں (مثلاً زینان اور کرپٹان) بھی آکسیجن اور فلورین کے ساتھ مل کر بہت سے مرکبات جیسے $XeF_2$، $KrF_2$، $XeOF_2$ 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 آئنی یا برق گرفتی بند
## (Ionic or Electrovalent Bond)

آئنی بند بننے کے سلسلے میں کوسل اور لیوئس ٹریٹمنٹ سے یہ معلوم ہوتا ہے کہ بنیادی طور پر آئنی مرکبات بننے کا انحصار مندرجہ ذیل پر ہوگا۔

- تعدیلی ایٹموں سے ان کے مثبت اور منفی آین بننے میں آسانی؛
- ٹھوس میں مثبت اور منفی آین کی ترتیب، یعنی قلمی مرکبات کی لیٹس (Lattice)۔

مثبت آین کے بننے میں آئیونائزیشن شامل ہوتا ہے یعنی ایک تعدیلی ایٹم سے الیکٹران کا خارج ہونا اور منفی آین کے لیے تعدیلی ایٹم میں الیکٹران کا شامل ہونا۔

$$M(g) \rightarrow M^+(g) + e^- ;$$

آئیونائزیشن اینتھالپی

$$X(g) + e^- \rightarrow X^-(g) ;$$

الیکٹران گین اینتھالپی

$$M^+(g) + X^-(g) \rightarrow MX(s)$$

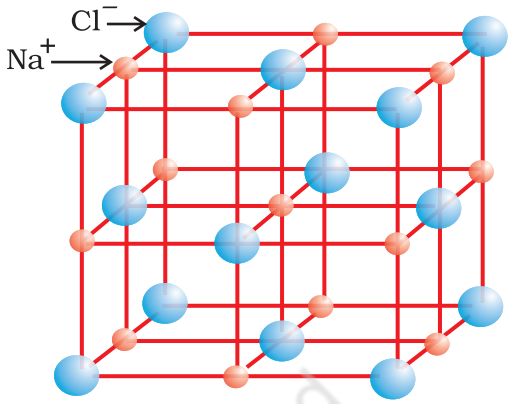
**الیکٹران گین اینتھالپی**، $\Delta_{eg}H$ اینتھالپی کی وہ تبدیلی (اکائی 3) ہوتی ہے کہ جب گیسی حالت میں ایٹم اپنی گراؤنڈ اسٹیٹ میں ایک الیکٹران حاصل کرتا ہے۔ الیکٹران گین کا عمل حرارت زا (Exothermic) ہوسکتا ہے۔ آئیونائزیشن، دوسری طرف، صرف حرارت خور (Endothermic) ہوتا ہے۔ الیکٹران ایفینٹی الیکٹران گین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

**”ظاہر ہے کہ آئنی بندش 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 آئنی مرکبات میں مثبت آین دھاتی عناصر سے اور منفی آین غیر دھاتی عناصر سے حاصل ہوتے ہیں۔ امونیم آین (دو غیر دھاتی عناصر سے مل کر بنتا ہے) ایک استثنٰی ہے۔ یہ بہت سے آئنی مرکبات کے کیٹ آین بناتا ہے۔

قلمی حالت میں آئنی مرکبات میں کیٹ آین اور این آین آپس میں کولمبی باہمی عمل توانائیوں (Coulombic Interation Energies) کے ذریعہ جُڑ کر سہ ابعادی ترتیب میں پائے جاتے ہیں۔ یہ مرکبات مختلف قلمی ساختوں میں کرسٹلائز ہوتے ہیں جس کا انحصار آین کے سائز، پیکنگ کی ترتیب اور دوسرے عوامل پر ہوتا ہے۔ مثال کے طور پر NaCl، سوڈیم کلورائڈ کا قلمی ڈھانچہ نیچے دکھایا گیا ہے۔

© NCERT Not to be Republished




چٹانی نمک کی ساخت

آئنی ٹھوس میں الیکٹران گین اینتھالپی اور آئیونائزیشن اینتھالپی کی کُل مقدار مثبت ہوسکتی ہے لیکن قلمی ساخت کرسٹل لیٹس بننے کے دوران خارج ہونے والی توانائی کی وجہ سے ہی مستحکم ہوتا ہے۔ مثال کے طور پر Na(g) سے $Na^+(g)$ بننے کے دوران آئیونائزیشن اینتھالپی 495.8 kJ $mol^{-1}$ ہوتی ہے؛ جبکہ $Cl(g) + e^- \rightarrow Cl^-(g)$ تبدیلی کے لیے الیکٹران گین اینتھالپی صرف −348.7 kJ $mol^{-1}$ ہی ہے۔ دونوں کی کُل توانائی 147.1 kJ $mol^{-1}$، NaCl(s) کی لیٹس تشکیل کی اینتھالپی (−788 kJ $mol^{-1}$) سے کہیں زیادہ ہے۔ لہٰذا اس عمل میں خارج ہونے والی توانائی جذب ہونے والی توانائی سے زیادہ ہے۔ **لہٰذا ایک آئنی مرکب لیٹس استحکام کے لیے کیفیتی پیمائش اس کی لیٹس تشکیل کی اینتھالپی کے ذریعہ فراہم کیے جاتے ہیں نہ کہ صرف گیسی حالت میں آئنی انواع کے گرد الیکٹرانوں کے آکٹیٹ حاصل کرکے۔**

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

### 4.2.1 لیٹس اینتھالپی (Lattice Enthalpy)

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

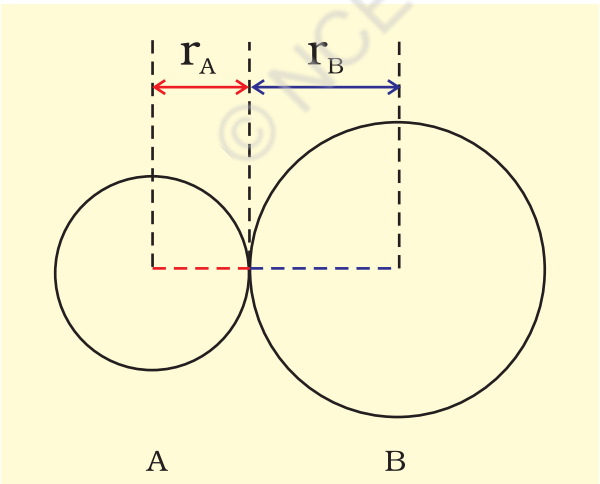
اس عمل میں مخالف چارج والے آئن کے درمیان قوت کشش اور یکساں چارج والے آئنوں کے درمیان دافع قوت شامل ہوتی ہے۔ چونکہ ٹھوس قلم سہ ابعادی ہوتے ہیں اس لیے یہ ممکن نہیں ہوتا کہ لیٹس کی اینتھالپی براہ راست قوتِ کشش اور دافع قوت کے باہمی عمل سے معلوم کی جاسکے۔ کرسٹل جیومیٹری سے تعلق رکھنے والے عوامل کو بھی اس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

## 4.3 بندشی پیرامیٹر (Bond Parameters)

### 4.3.1 بندشی لمبائی (Bond Length)

**ایک سالمے میں بندھے ہوئے دو ایٹموں کے مرکزوں کے درمیان توازنی فاصلہ بندشی لمبائی کہلاتا ہے۔** بندشی لمبائی کی پیمائش اسپیکٹرواسکوپی، 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۔

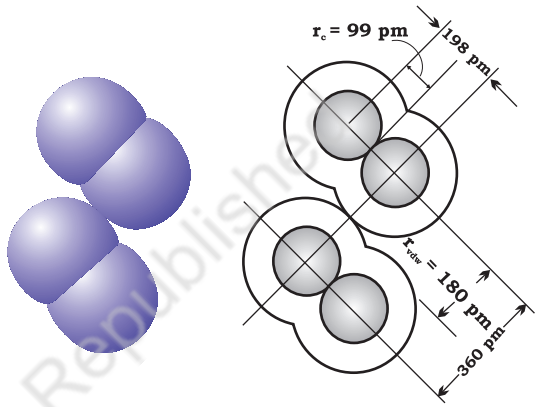
**شریک گرفت نصف قطر کی پیمائش اندازاً ایک ایٹم کے مرکز کا نصف قطر ہوتی ہے جو بندشی حالت میں برابر والے ایٹم کے مرکز کے تعلق میں ہوتا ہے۔** شریک گرفت نصف قطر ایک ہی سالمے میں شریک گرفت بند سے بندھے ہوئے دو یکساں ایٹموں کے درمیانی فاصلے کا نصف حصّہ ہوتا ہے۔




**شکل 4.1** شریک گرفت سالمے AB میں بندشی لمبائی
R) $R = r_A + r_B$ بندشی لمبائی ہے اور $r_A$ اور $r_B$ ایٹم A اور B کے شریک بندش نصف قطر ہیں)

© NCERT Not to be republished

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

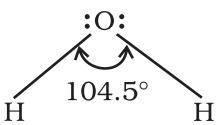



**شکل 4.2** کلورین سالمے میں شریک گرفت اور وَن ڈر والز نصف قطر اندرونی دائرے کلورین ایٹم کے سائز کے مطابق ہیں ($r_{vdw}$ اور $r_c$ بالترتیب وَنڈروالز اور شریک گرفت نصف قطر ہیں)

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

### 4.3.2 بندشی زاویہ (Bond Angle)

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




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

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

**جدول 4.3 عام سالموں میں بندشی لمبائیاں**

| سالمہ | بندشی لمبائی (pm) |
|---|---|
| $H_2$ (H – H) | 74 |
| $F_2$ (F – F) | 144 |
| $Cl_2$ (Cl – Cl) | 199 |
| $Br_2$ (Br – Br) | 228 |
| $I_2$ (I – I) | 267 |
| $N_2$ (N ≡ N) | 109 |
| $O_2$ (O ≡ O) | 121 |
| HF (H – F) | 92 |
| HCl (H – Cl) | 127 |
| HBr (H – Br) | 141 |
| HI (H – I) | 160 |

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

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

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

© NCERT Not to be Republished

### 4.3.3 بانڈ اینتھالپی (Bond Enthalpy)

اس کی تعریف اس توانائی کی مقدار کی شکل میں کی جاتی ہے جو گیسی 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 ہائڈروجن سالمے میں H–H بانڈ اینتھالپی $435.8 kJ mol^{-1}$ ہوتی ہے۔

$$H_2(g) \rightarrow H(g) + H(g);\ \Delta_a H^\ominus = 435.8\ kJ\ mol^{-1}$$

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

$$O_2\ (O = O)\ (g) \rightarrow O(g) + O(g);$$
$$\Delta_2 H^\ominus = 498\ kJ\ mol^{-1}$$
$$N_2\ (N \equiv N)\ (g) \rightarrow N(g) + N(g);$$
$$\Delta_a H^\ominus = 946.0\ kJ\ mol^{-1}$$

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

$$HCl\ (g) \rightarrow H(g) + Cl\ (g);\ \Delta_a H^\ominus = 431.0\ kJ\ mol^{-1}$$

کثیر ایٹمی سالموں میں بندشی 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۔

$$H_2O(g) \rightarrow H(g) + OH(g);\ \Delta_a H_1^\ominus = 502\ kJ\ mol^{-1}$$
$$OH(g) \rightarrow H(g) + O(g);\ \Delta_a H_2^\ominus = 427\ kJ\ mol^{-1}$$

$\Delta_a H_2^\ominus$ 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 $C_2H_5OH$ (Ethanol) اور پانی کے سالموں میں یکساں O – H بند کے لیے توانائی میں فرق پایا جاتا ہے۔ لہٰذا کثیر ایٹمی سالموں میں اوسط بانڈ اینتھالپی **(Average Bond Enthalpy)** کی اصطلاح استعمال کی جاتی ہے۔ اسے حاصل کرنے کے لیے کل بندشی افتراق اینتھالپی کی اصطلاح استعمال کی جاتی ہے۔ اسے حاصل کرنے کے لیے کل بندشی افتراق انتھالپی 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۔

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

### 4.3.4 بانڈ آرڈر (Bond Order)

**شریک گرفت بند کے لیوئس کے بیان میں بانڈ آرڈر ایک سالمہ میں دو ایٹموں کے درمیان بند کی تعداد کی شکل میں دیا جاتا ہے۔** مثال کے طور پر $H_2$ (جس میں مشترک الیکٹران جوڑا ایک ہے)، $O_2$ میں (جس میں مشترک الیکٹران جوڑے دو ہیں) اور $N_2$ میں (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 $\Delta_a H^\ominus$، 946 $kJ\ mol^{-1}$ ہے جو ایک دو ایٹمی سالمہ کے لیے سب سے زیادہ ہوتی ہے۔

**آئسو الیکٹرانی سالموں اور آین میں بانڈ آرڈر مماثل ہوتے ہیں۔ مثال کے طور پر $F_2$ اور $O_2^{2-}$ کے بانڈ آرڈر 1 ہیں اور $NO^+$، CO، $N_2$ کے بانڈ آرڈر 3 ہوتے ہیں۔**

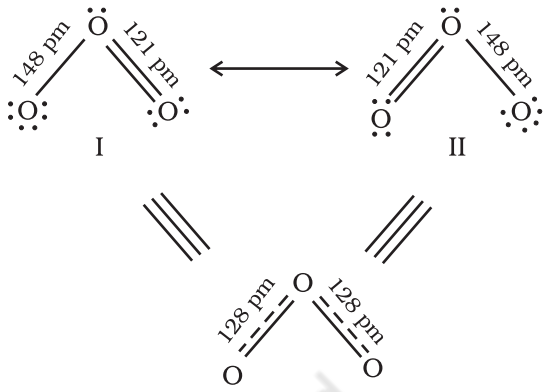
**"سالموں کے استحکام کو سمجھنے کے لیے ایک عام ربط یہ ہے کہ: بانڈ آرڈر بڑھنے کے ساتھ بندشی اینتھالپی بڑھتی ہے اور بندشی لمبائی گھٹتی ہے۔"**

### 4.3.5 گمک ساختیں (Resonance Structures)

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

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

© NCERT Not to be Republished



**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 نپٹنے کے لیے ہی گمک کا تصور پیش کیا گیا ہے "**گمک کے تصور کے مطابق جب کبھی بھی کوئی ایک لیوئس 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**"۔ لہٰذا $O_3$ کے لیے مندرجہ بالا دو ساختیں مستند یا گمک ساختیں بناتی ہیں اور ان کا مخلوط یعنی III ساخت $O_3$ کی ساخت کو زیادہ صحیح طور پر ظاہر کرتی ہے۔ اس کو '**گمک مخلوط**' (Resonance Hybrid) بھی کہتے ہیں۔ گمک کو دوسروں والے تیر سے ظاہر کرتے ہیں۔

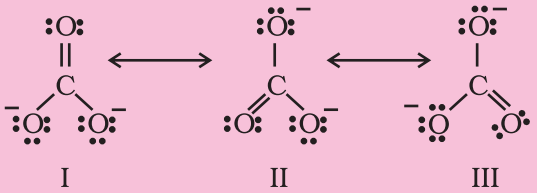
**کاربونیٹ آین اور کاربن ڈائی آکسائڈ کے سالمے** گمک ساختوں کی کچھ اور مثالیں ہیں۔

**مسئلہ 4.3**

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

**حل**

کاربن اور آکسیجن کے درمیان دو اکہرے بند اور ایک دوہرے بند پر منحصر واحد لیوئس 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۔ لہٰذا کاربونیٹ آین کو مستند اشکال I، II اور III کے گمک مخلوط کی شکل میں مندرجہ ذیل طریقے سے ظاہر کیا جا سکتا ہے۔





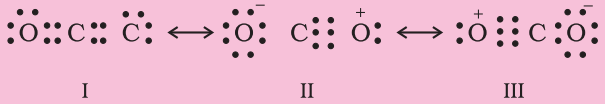

**شکل 4.4** $CO_3^{2-}$ میں گمک I، II اور III تین مستند اشکال دکھاتے ہیں۔

**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 دوہرا 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 لیوئس ساخت اس صورت حال کو ظاہر نہیں کر سکتا اور یہ لازمی ہو جاتا ہے کہ ایک سے زیادہ لیوئس 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 جا سکتی ہے۔






**شکل 4.5** $CO_2$ سالمے میں گمک I، II اور III مستند اشکال دکھاتی ہیں

**عمومی طور پر کہا جا سکتا ہے**

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

© NCERT not to be Republished

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

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

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

- مستند اشکال کی کوئی حقیقت نہیں ہوتی۔
- کوئی 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 ٹوٹومیرزم میں ٹوٹومیرک (کیٹو اور اینول) شکلوں میں دیکھتے ہیں۔
- سالمے کی ایک ہی ساخت ہوتی ہے جو مستند اشکال کی گمک مخلوط ہوتی ہے اور جسے ایک لیوئس ساخت سے ظاہر نہیں کیا جا سکتا۔

### 4.3.6 بند کی قطبیت (Polarity of Bonds)

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

جب دو یکساں ایٹموں مثال کے طور پر $H_2$، $O_2$، $Cl_2$، $N_2$ یا $F_2$ کے درمیان شریک گرفت بندش ہوتی ہے۔ تو مشترک الیکٹرانوں کے جوڑے پر دونوں ایٹموں کے ذریعہ برابر کی کشش ہوتی ہے۔ نتیجہ کے طور پر الیکٹران جوڑا مماثل مرکزوں کے عین درمیان ہوتا ہے۔ اس طرح سے بننے والا بند غیر قطبی شریک گرفت بند کہلاتی ہے۔ اس کے برخلاف غیر متجانس مرکزی سالموں (Heteronuclear Molecule) جیسے HF میں دو ایٹموں کے درمیان مشترک الیکٹرانوں کا جوڑا فلورین کی سمت جھک جاتا ہے کیونکہ فلورین کی الیکٹران منفیت ہائڈروجن کے مقابلے میں بہت زیادہ ہوتی ہے (اکائی 3)۔ حاصل شدہ شریک گرفت بند قطبی شریک گرفت بند ہے۔

قطبیت کی وجہ سے سالموں میں **ڈائپول مومنٹ (Dipole Moment)** ہوتا ہے (جیسا کہ ذیل میں ظاہر کیا گیا ہے) جس کی تعریف اس طرح بیان کی جا سکتی ہے کہ یہ مثبت اور منفی چارج کے مرکز کے درمیانی 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۔

ڈائپول مومنٹ (μ) = چارج (Q) × علیحدگی کا فاصلہ (r)

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

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

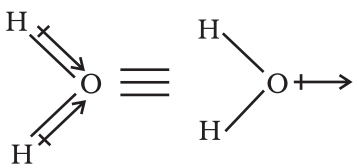
جہاں C کولمب اور m میٹر ہے۔

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 سَر مثبت مرکز کی طرف ہوتا ہے۔ لیکن کیمیا میں ڈائپول مومنٹ کی موجودگی کو صلیبی تیر (⟷+) کے ذریعے ظاہر کیا جاتا ہے جو سالمے کی لیوئس 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 $H_2O$ کا سالمہ جس کی ساخت خمیدہ ہوتی ہے O–H کے دو بندوں کے درمیان 104.5° کا زاویہ ہوتا ہے۔ $6.17 \times 10^{-30}$ C m کا کل ڈائپول (ID = 3.33564 × $10^{-3}$ Cm) دو OH بند کے ڈائپول مومنٹ کا حاصل ہوتا ہے۔

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



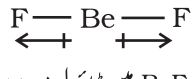
(a) بند ڈائپول (b) حاصل بند ڈائپول

© NCERT Not to be Republished

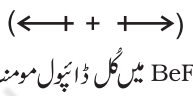
کل ڈائپول مومنٹ $\mu = 1.85\ D$

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

$BeF_2$ میں ڈائپول مومنٹ صفر کے برابر ہوتا ہے۔ یہ اس وجہ سے کہ دو مساوی بند ڈائپول نقطے مخالف سمت میں ہوتے ہیں ایک دوسے کے اثر کو ختم کر دیتے ہیں۔

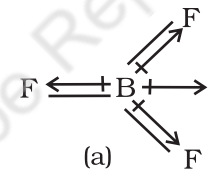



$BeF_2$ میں ڈائپول مومنٹ

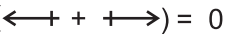


$BeF_2$ میں کُل ڈائپول مومنٹ

ٹیٹرا ایٹمی سالموں جیسے $BF_3$ 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۔




(a)

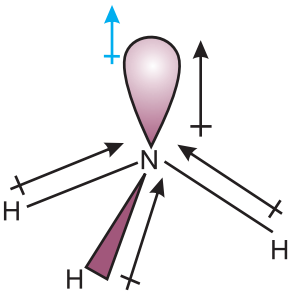


(b)

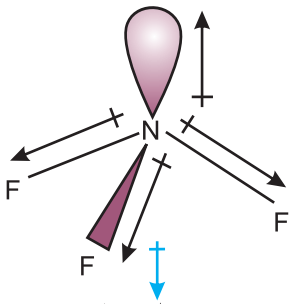
$BF_3$ سالمہ: (a) ڈائپول مومنٹ، (b) کل ڈائپول مومنٹ کو ظاہر کرتے ہوئے

آیئے ہم $NH_2$ اور $NF_3$ 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 الیکٹرونگیٹو ہے $NH_3$ کا حاصل ڈائپول مومنٹ $(4.90 \times 10^{-30}\ C\ m)$ سے $NF_3$ زیادہ ہے $(0.8 \times 10^{-30}\ C\ m)$۔ یہ اس وجہ سے ہے کہ $NH_3$ میں تنہا جوڑے کی وجہ سے ارٹل ڈائپول اسی سمت میں ہے جس سمت میں N – H بانڈ کا حاصل ڈائپول مومنٹ ہے، جبکہ $NF_3$ میں ارٹل ڈائپول $N - F_3$ 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 $NF_3$ کا ڈائپول مومنٹ کم ہوتا ہے۔ جیسا کہ نیچے دکھایا گیا ہے۔

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




$NH_3$ میں حاصل ڈائپول مومنٹ
$4.90 \times 10^{-30}\ C\ m$ =




$NF_3$ میں حاصل ڈائپول مومنٹ
$0.80 \times 10^{-30}\ C\ m$ =

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

- کیٹ آین کا سائز جتنا چھوٹا اور این آین کا سائز جتنا بڑا ہوگا آینی بند کا شریک گرفتی کردار اتنا ہی زیادہ ہوگا۔
- کیٹ آین پر جتنا زیادہ چارج ہوگا۔ آینی بند کی شریک گرفت خصوصیت اتنی ہی زیادہ ہوگی۔
- یکساں سائز اور چارج والے کیٹ آین میں جس کا الیکٹرانی تشکل عام عبوری دھات کی طرح $(n-1)\ d^n\ ns^o$ ہوگا اس سے وہ زیادہ قطبی ہوگا جس کا الیکٹرانی تشکل نوبل گیس $ns^2\ np^6$، خاص قلوی اور قلوی ارضی دھاتوں کے دھاتی کیٹ آین کی طرح ہوگا۔

کیٹ آین الیکٹرانی چارج کو اپنی سمت کھینچ کر این آین 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 آین کی تقطیب کی صلاحیت، این آین کی تقطیب کی صلاحیت اور این آین کے مسخ آین سازی ہونے کی حد وہ عوامل ہیں جو آینی بند کی فی صد شریک گرفت خصوصیت کا تعین کرتے ہیں۔

## 4.4 ویلنس شیل الیکٹران پیئر ریپلژن تھیوری (VSEPR)

جیسا کہ پہلے وضاحت کی جا چکی ہے، لیوئس 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۔ سِڈوک اور پاول نے

© NCERT not to be Republished

جدول 4.5 کچھ چنندہ سالمات کے ڈائپول مومنٹ

| سالمے کی قسم | مثال | ڈائپول مومنٹ μ(D) | جیومیٹری |
|---|---|---|---|
| **سالمہ (AB)** | | | |
| | HF | 1.78 | خطّی (Linear) |
| | HCl | 1.07 | خطّی (Linear) |
| | HBr | 0.79 | خطّی (Linear) |
| | HI | 0.38 | خطّی (Linear) |
| | $H_2$ | 0 | خطّی (Linear) |
| **سالمہ ($AB_2$)** | | | |
| | $H_2O$ | 1.85 | خمیدہ (Bent) |
| | $H_2S$ | 0.95 | خمیدہ (Bent) |
| | $CO_2$ | 0 | خطّی (linear) |
| **سالمہ ($AB_3$)** | | | |
| | $NH_3$ | 1.47 | ٹرائی گونل بائیپرامڈل (Trigonal-pyramidal) |
| | $NF_3$ | 0.23 | ٹرائی گونل بائیپرامڈل (Trigonal-pyramidal) |
| | $BF_3$ | 0 | ٹرائی 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 گرفتی خول میں الیکٹران جوڑوں کے درمیان دافع باہمی عمل کی بنیاد پر سادہ نظریہ پیش کیا۔ اس کو نیہوم اور گلسپی 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 گرفتی خول کے الیکٹران جوڑوں (بندشی یا غیر بندشی) کی تعداد پر ہوتا ہے۔
- گرفتی خول میں الیکٹران کے جوڑے ایک دوسرے کو دھکیلتے ہیں کیونکہ ان الیکٹران بادلوں پر منفی چارج ہوتا ہے۔
- الیکٹرانوں کے یہ جوڑے اسپیس میں ایسا مقام حاصل کرنے کی کوشش کرتے ہیں جہاں قوت دافعہ کم سے کم ہو لہٰذا ان کے درمیان فاصلہ زیادہ سے زیادہ ہوگا۔
- گرفتی خول کو ایک کرّہ (Sphere) کی طرح مانا جاتا ہے جہاں الیکٹران اس کی کرّوی 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 ہوسکتا ہے جہاں دو یا دو سے زیادہ گمک ساختیں ایک سالمے کو ظاہر کرتی ہیں۔

**الیکٹران جوڑوں کا دافع باہمی عمل مندرجہ ذیل ترتیب میں گھٹتا ہے:**

(bp) بندشی جوڑا – (lp) تنہا جوڑا > (lp) تنہا جوڑا – (lp) تنہا جوڑا > (lp) تنہا جوڑا – بندشی جوڑا (bp)

(lp – lp > lp – bp > bp – bp)

© NCERT Not to be Republished

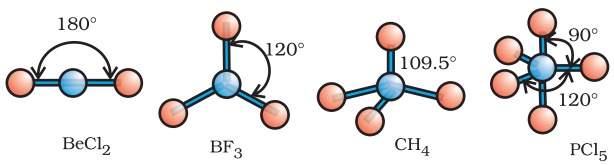
نیوہوم اور گلسپی (1957) نے VSEPR ماڈل کو الیکٹرانوں کے تنہا جوڑے اور بندشی جوڑے کے درمیان اہم فرق کو سمجھا کر بہتر بنانے کی کوشش کی۔ الیکٹرانوں کا تنہا جوڑا مرکزی ایٹم پر ہی قائم رہتا ہے جبکہ ہر گرفتی جوڑا دو ایٹموں کے درمیان مشترک ہوتا ہے۔ نتیجہ کے طور پر سالمے میں تنہا الیکٹرانوں کا جوڑا الیکٹرانوں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

''VSEPR نظریے کے مطابق سالموں کی جیومیٹریائی اشکال کی پیشین گوئی کے لیے سالموں کو دو جماعتوں میں تقسیم کرنا آسان ہوتا ہے جیسے (i) ایسے سالمے جن کے مرکزی ایٹم پر الیکٹرانوں کا تنہا جوڑا نہ ہو اور (ii) ایسے سالمے 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، $AB_2$، $AB_3$، $AB_4$، $AB_5$ اور $AB_6$ مرکبات میں مرکزی ایٹم A کے گرد الیکٹران جوڑوں اور B ایٹموں کی ترتیب خطی (Linear)، ٹرائی گونل پلینر ٹیٹراہیڈرل، ٹرائی گونل بائی پرامڈل اور آکٹاہیڈرل ہے۔ اس طرح کی ترتیب $BF_3$ $(AB_3)$ $PCl_4$ $(AB_4)$ اور $PCl_5$ $(AB_5)$ 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

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 سالمے 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)

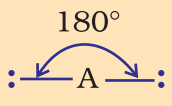
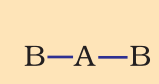
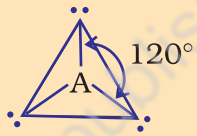
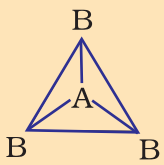
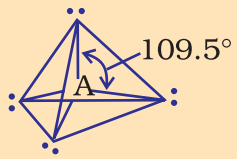
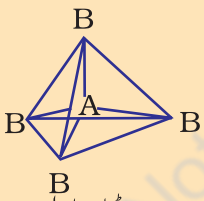
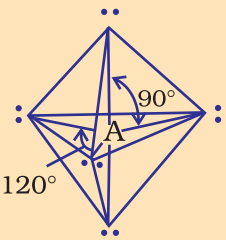
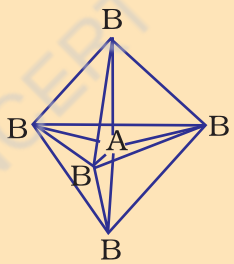
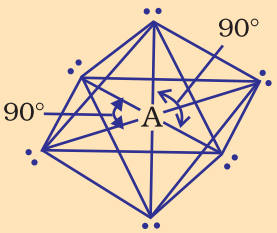
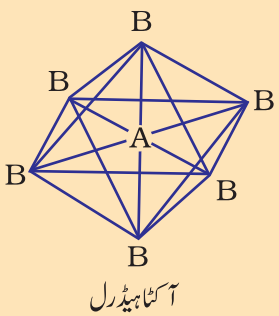
ہم جانتے ہیں کہ لیوئس کا نظریہ سالموں کی ساخت لکھنے میں ہماری مدد کرتا ہے لیکن یہ کیمیائی بند کے بننے کی وجوہات کی وضاحت کرنے میں ناکام ہے۔ یہ $H_2$ اور $F_2$ جیسے سالموں میں بند افتراق اینتھالپی اور بندشی لمبائی ($H_2$ کے لیے 435.8 kJ mol$^{-1}$، 74 pm اور $F_2$ کے لیے 150.6 kJ mol$^{-1}$، 42 pm) کے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

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

**ویلنس بانڈ تھیوری** ہیٹلر اور لنڈن نے 1927 میں پیش کی اور پالنگ اور دیگر سائنسدانوں نے اسے مزید آگے بڑھایا۔ ویلنس بانڈ تھیوری پر بحث عناصر کے الیکٹرانی تشکل (اکائی 2)، ایٹمی اربٹل کا اوورلیپنگ کرائٹیر یا ایٹمی اربٹل کی ہائبریڈائزیشن 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۔ لہٰذا آسانی کے لیے ویلنس بانڈ تھیوری پر بحث کیفیتی اور غیر ریاضیاتی طرز عمل کی اصطلاح میں ہی کی گئی ہے۔ ابتدا میں آیئے ہائڈروجن سالمے کے بننے کے عمل کو دیکھتے ہیں جو تمام سالموں میں سب سے سادہ ہے۔

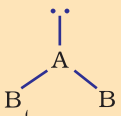
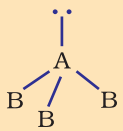
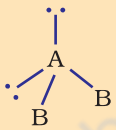
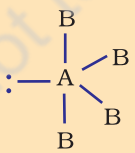
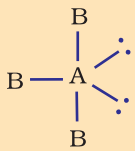
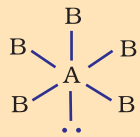
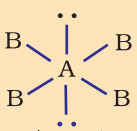
© NCERT Not to be Republished

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

| الیکٹران جوڑوں کی تعداد | الیکٹران جوڑوں کی ترتیب | سالمے کی جیومیٹری | مثالیں |
|---|---|---|---|
| 2 |  خطّی |  خطّی | $BeCl_2$, $HgCl_2$ |
| 3 |  ٹرائی گونل پلینر |  ٹرائی گونل پلینر | $BF_3$ |
| 4 |  ٹیٹراہیڈرل |  ٹیٹراہیڈرل | $CH_4$, $NH_4^+$ |
| 5 |  ٹرائی گونل بائی پیرامڈل |  ٹرائی گونل بائی پیرامڈل | $PCl_5$ |
| 6 |  آکٹاہیڈرل |  آکٹاہیڈرل | $SF_6$ |

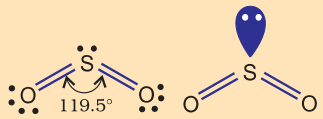
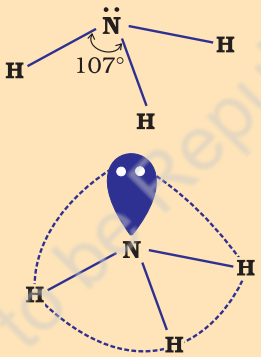
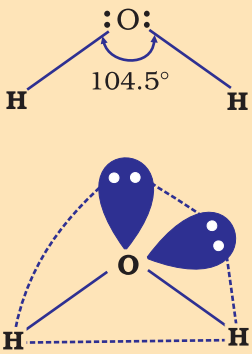
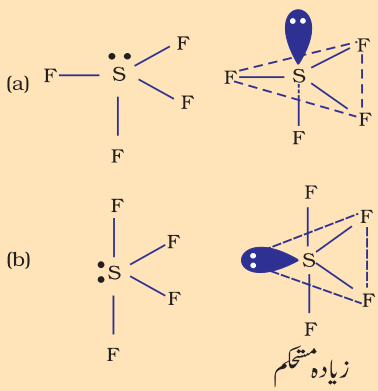
© NCERT Not to be Republished

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

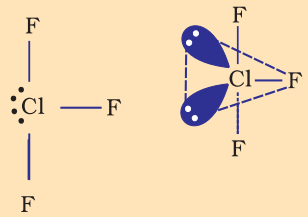
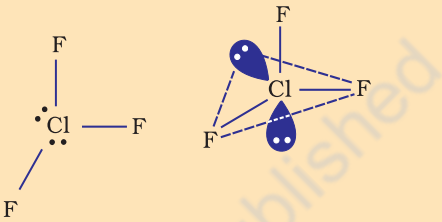
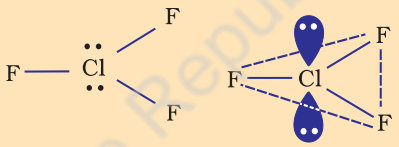
| سالموں کی قسم | بندشی جوڑوں کی تعداد | تنہا جوڑوں کی تعداد | الیکٹران جوڑوں کی ترتیب | جیومیٹری | مثال |
|---|---|---|---|---|---|
| $AB_2E$ | 2 | 1 |  ٹرائی گونل سطحی | خمیدہ | $SO_2$, $O_3$ |
| $AB_3E$ | 3 | 1 |  ٹیٹراہیڈرل | ٹرائی گونل پیرامڈل | $NH_3$ |
| $AB_2E_2$ | 2 | 2 |  سہ گوشی دوہری | خمیدہ | $H_2O$ |
| $AB_4E$ | 4 | 1 |  سہ گوشی ہرمی | سی سا | $SF_4$ |
| $AB_3E_2$ | 3 | 2 |  ٹرائی گونل بائی پیرامڈل | T-شکل | $ClF_3$ |
| $AB_5E$ | 5 | 1 |  آکٹاہیڈرل | مربع پیرامڈ | $BrF_5$ |
| $AB_4E_2$ | 4 | 2 |  آکٹاہیڈرل | مربع سطحی | $XeF_4$ |

© NCERT Not to be Republished

## جدول 4.8 بونڈ پیئر اور لون پیئر رکھنے والے سالموں کی اشکال

| سالمے کی قسم | بندشی جوڑوں کی تعداد | تنہا جوڑوں کی تعداد | الیکٹرانوں کی ترتیب | شکل | حاصل شدہ شکل کی وجوہات |
|---|---|---|---|---|---|
| $AB_2E$ | 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 - بونڈ پیئر قوت دافعہ زیادہ ہے بہ نسبت بونڈ پیئر-بونڈ پیئر قوت دافعہ کے۔ لہٰذا زاویہ 120° سے گھٹ کر 119.5° رہ گیا۔ |
| $AB_3E$ | 3 | 1 |  | ٹرائی گونل بائی پیرامڈل | اگر یہاں lp کی جگہ bp ہوتا تو اس کی شکل ٹیٹراہیڈرل ہوتی لیکن ایک تنہا جوڑا موجود ہے لہٰذا lp - bp قوت دافعہ (جو bp - bp قوت دافعہ سے زیادہ ہے) کی وجہ سے گرفتی جوڑوں کے درمیان زاویہ 109.5° سے گھٹ کر 107° ہو گیا ہے۔ |
| $AB_2E_2$ | 2 | 2 |  | خمیدہ | یہ شکل ٹیٹراہیڈرل ہوتی اگر یہاں چاروں بونڈ 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 lp - bp قوت دافعہ سے زیادہ ہے جو bp - bp سے زیادہ ہے لہٰذا زاویہ 109.5° سے گھٹ کر 104.5° رہ گیا۔ |
| $AB_4E$ | 4 | 1 |  | سی-سا | (a) میں lp محوری مقام پر موجود ہے لہٰذا 90° پر تین lp - bp قوت دافعہ ہیں۔ (b) میں lp خطِ استوائی مقام پر ہے اور دو lp - bp قوت دافعہ ہیں لہٰذا (b) کی تنظیم یا دہ مستحکم ہے۔ (b) میں ظاہر کی گئی شکل مسخ شدہ ٹیٹراہیڈرن، تہہ دار مربع یا سی سا کہلاتی ہے۔ |

© NCERT Not to be Republished

| سالمے کی قسم | بندشی جوڑوں کی تعداد | تنہا جوڑوں کی تعداد | الیکٹرانوں کی ترتیب | شکل | حاصل شدہ شکل کی وجوہات |
|---|---|---|---|---|---|
| $AB_3E_2$ | 3 | 2 | (a)  | T-شکل | (a) میں lp استوائی مقام پر ہیں لہٰذا lp-bp قوت دافعہ کم ہوگی بہ نسبت دوسروں کے جن میں lp محوری مقام پر ہیں لہٰذا (a) کی شکل زیادہ مستحکم ہوگی۔ (T- شکل) |
| | | | (b)  | | |
| | | | (c)  | | |

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 قوتِ کشش اور دافع قوتِ عمل پیرا ہیں۔

قوت کشش پیدا ہوتی ہے:

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

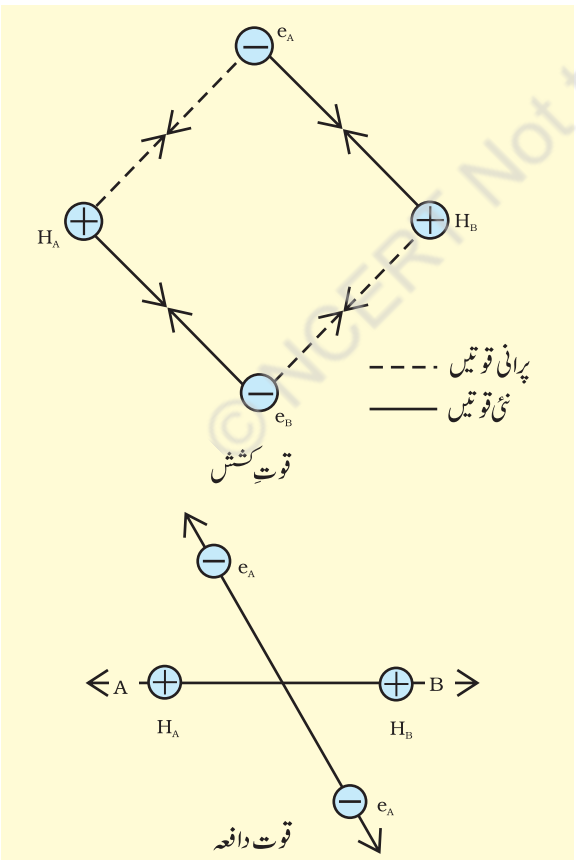
(ii) ایک ایٹم کے نیوکلیس اور دوسرے ایٹم کے الیکٹران کے درمیان یعنی $N_A - e_B$، $N_A - e_B$

اسی طرح دافع قوتِ 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 قوتِ دافعہ انہیں ایک دوسرے سے الگ کرنے کی کوشش کرے گی (شکل 4.7)۔



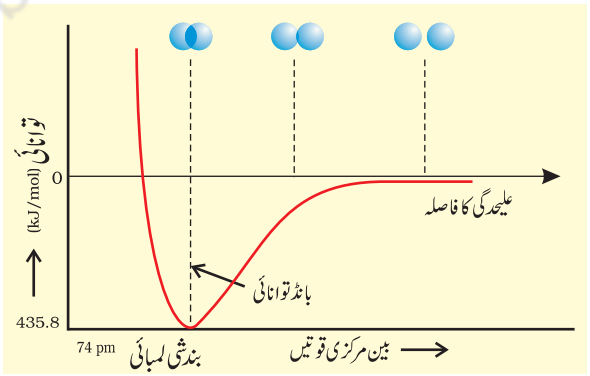

**شکل 4.7** $H_2$ سالمے کی تشکیل کے دوران کشش اور دافع قوتیں

© NCERT Not to be Republished

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

چونکہ توانائی کا اخراج ہوتا ہے جب ہائڈروجن کے دو ایٹموں کے درمیان بند بنتا ہے، لہٰذا 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 نچلی سطح کے مطابق ہے۔ اس کے برعکس ایک مول ہائڈروجن کے سالموں کو جُدا کرنے میں 435.8 kJ mol$^{-1}$ توانائی کی ضرورت ہوتی ہے۔

$$H_2(g) + 435.8 \text{ kJ mol}^{-1} \rightarrow H(g) + H(g)$$




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

### 4.5.1 اربٹل اوور 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 اربٹل کے مابین جُزوی دخل اندازی ہوتی ہے۔ ایٹمی اربٹل کی یہ جُزوی دخل اندازی ایٹمی اربٹل کی اوورلیپنگ کہلاتی ہے جس کے نتیجہ میں الیکٹرانوں کے جوڑے بنتے ہیں۔ اوورلیپ کی مقدار شریک گرفت بند کی توانائی کو طے کرتی ہے۔ عام طور پر جتنی اوورلیپنگ ہوگی دو ایٹموں کے درمیان بننے والا بند اتنا ہی مضبوط ہوگا۔ لہٰذا اربٹل اوورلیپ کے تصور کے مطابق دو ایٹموں کے درمیان شریک گرفت بند کی تشکیل بندش خول میں موجود متضاد اسپن والے الیکٹرانوں کے جوڑے بننے کے نتیجے میں ہوتی ہے۔

### 4.5.2 بندشوں کی سمتی خصوصیات
### (Directional Properties of Bonds)

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

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

ویلنس بانڈ تھیوری $CH_4$، $NH_3$ اور $H_2O$ جیسے کثیر ایٹمی سالموں میں بند کی شکل، ان کے بننے کے عمل اور سمتی خصوصیات کی وضاحت ایٹمی اربٹل کی اوورلیپنگ اور ہائبریڈائزیشن کی اصطلاح میں کرتی ہے۔

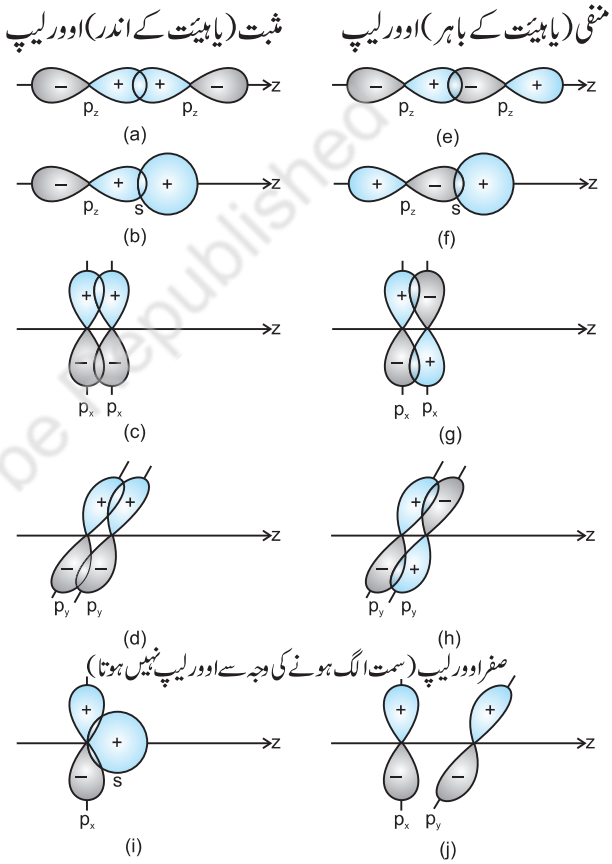
### 4.5.3 ایٹمی اربٹل کی اوورلیپنگ
### (Overlapping of Atomic Orbitals)

جب اربٹل کے دو ایٹم بند تشکیل دینے کے لیے قریب آتے ہیں تو ان کا یہ اوورلیپ مثبت، منفی یا صفر ہو سکتا ہے اس کا انحصار نشان (ہیئت) 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 (ہیئت) ظاہر ہوتے ہیں۔ ان کا چارج سے تعلق نہیں ہوتا ہے۔ بند بنانے کے لیے اربٹل کے نشان (ہیئت) اور سمت یکساں ہونے چاہئیں۔ اسے مثبت اوورلیپ کہتے ہیں۔ s اور p اربٹل کے متعدد اوورلیپوں کو شکل 4.9 میں ظاہر کیا گیا ہے۔

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

© NCERT not to be republished

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




شکل **4.9** $s$، $p$ اربٹل کی مثبت، منفی اور صفر اوورلیپ

آیئے ہم پہلے $CH_4$ (میتھین) سالمہ کو لیتے ہیں گراؤنڈ اسٹیٹ پر کاربن کا الیکٹرانی تشکل $2s^2\ 2p^2$ [He] 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 اربٹل کے درمیان اوورلیپ کے دوران خارج ہونے والی توانائی سے فراہم ہوتی ہے۔ کاربن کے چار اربٹل جن میں سے ہر ایک میں ایک تنہا بغیر جوڑے کا الیکٹران ہوتا ہے چار ہائڈروجن کے $1s$ اربٹل جن میں خود بھی ایک ہی الیکٹران ہوتا ہے، سے اوورلیپ کر سکتے ہیں۔ نتیجہ کے طور پر چار C-H بند بنتے ہیں۔ تاہم یہ دیکھا جائے گا کہ جبکہ کاربن کے تین $p$ اربٹل 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 $2s$ اربٹل اور ہائڈروجن کا $1s$ اربٹل کرّوی متشاکل ہوتے ہیں اور کسی سمت بھی اوورلیپ کر سکتے ہیں۔ لہٰذا 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 اربٹل کی اوورلیپ $CH_4$ سالمے کے بند کی سمتی خصوصیات کے لیے ذمہ دار نہیں ہوسکتی۔ اسی طریقہ اور بحث کا استعمال کرتے ہوئے دیکھا جاسکتا ہے کہ $NH_3$ اور $H_2O$ سالموں میں HNH اور HOH بندشی زاویہ $90°$ کا ہونا چاہیے۔ یہ بیان $NH_3$ اور $H_2O$ سالموں میں حقیقی بندشی زاویوں $107°$ اور $104.5°$ سے مطابقت نہیں رکھتا۔

## 4.5.4 اوورلیپنگ کی قسمیں اور شریک گرفت بند کی فطرت (Types of Overlapping and Nature of Covalent Bonds)

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

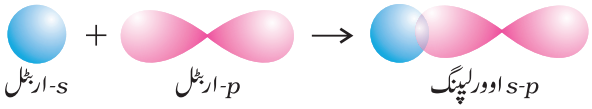
(i) سِگما (σ) بند اور (ii) پائی (π) بند

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

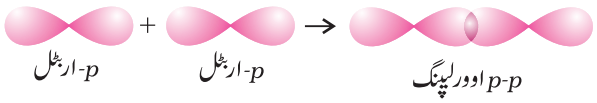
- **s-s اوورلیپنگ:** اس حالت میں دو آدھے بھرے ہوئے s-اربٹل کی بین مرکزی محور کے ساتھ اوورلیپنگ ہوتی ہے جیسا کہ نیچے دکھایا گیا ہے۔

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

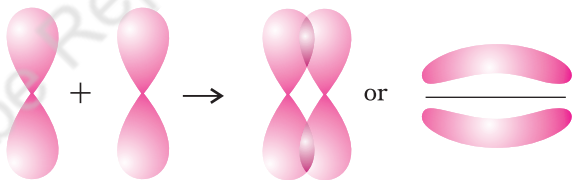
© NCERT Not to be republished




- **p-p اوورلیپنگ:** اس طرح کی اوورلیپنگ نزدیک آنے والے دو ایٹموں کے نصف بھرے ہوئے p-اربٹل کے درمیان ہوتی ہے۔




**(ii) پائی (π) بند:** π بند بنانے میں ایٹمی اربٹل کی اوورلیپنگ اس طرح ہوتی ہے کہ ان کے محور ایک دوسرے کے متوازی اور بین مرکزی محور کے عمودی ہوتے ہیں اس طرح جانبی اوورلیپنگ سے بننے والے اربٹل حصہ لینے والے ایٹموں کی سطح کے اوپر اور نیچے تشتری 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 اوورلیپنگ کی حد پر منحصر ہوتی ہے۔ سگما (σ) بند میں اربٹل کی اوورلیپنگ بہت زیادہ ہوتی ہے۔ لہٰذا یہ پائی (π) بانڈ سے زیادہ طاقتور ہوتے ہیں جہاں اوورلیپنگ 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 جیومیٹریائی شکل کی خصوصیات کی وضاحت کرنے کے لیے پالنگ نے مخلوطیت کا تصور پیش کیا ہے۔ اس کے مطابق ایٹمی اربٹل آپس میں مل کر نئے قسم کے یکساں اربٹل بناتے ہیں جو مخلوط اربٹل کہلاتے ہیں۔ خالص اربٹل کے برعکس **مخلوط اربٹل** 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 اربٹل کی ملاوٹ کا عمل ہے تاکہ ان کی توانائی کو دوبارہ تقسیم کیا جاسکے اور وہ یکساں توانائی اور یکساں شکل والے اربٹل کے نئے گروپ کی شکل میں حاصل ہوسکیں۔ مثال کے طور پر جب کاربن کے ایک $2s^2$ اور تین $2p^2$ اربٹل کا اخلاط ہوتا ہے تو چار نئے مخلوط اربٹل $sp^3$ حاصل ہوتے ہیں۔

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

1۔ مخلوط اربٹل کی تعداد ان ایٹمی اربٹل کے برابر ہوتی ہے جن میں مخلوطیت ہوتی ہے۔

2۔ مخلوط اربٹل توانائی اور شکل کے اعتبار سے ہمیشہ یکساں ہوتے ہیں۔

3۔ مستحکم بند بنانے میں خالص ایٹمی اربٹل کے مقابلے میں مخلوط اربٹل زیادہ اثر دار ہوتے ہیں۔

4۔ یہ مخلوط اربٹل 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۔ لہٰذا مخلوطیت کی قسم کے سالمے کی جیومیٹری کو ظاہر کرتی ہے۔

**مخلوطیت کے لیے اہم شرائط**

(i) ایٹم کے گرفت خول میں موجود اربٹل ہی اخلاط کرتے ہیں۔

(ii) جن اربٹل میں مخلوطیت ہورہی ہے ان کی توانائی تقریباً برابر ہونی چاہیے۔

(iii) یہ ضروری نہیں ہے کہ مخلوطیت میں صرف نصف بھرے ہوئے اربٹل ہی حصّہ لیں گے۔ کچھ جگہوں پر گرفتی خول کے بھرے ہوئے اربٹل بھی مخلوطیت میں حصّہ لیتے ہیں۔

### 4.6.1 مخلوطیت کی قسمیں (Types of Hybridisation)

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

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

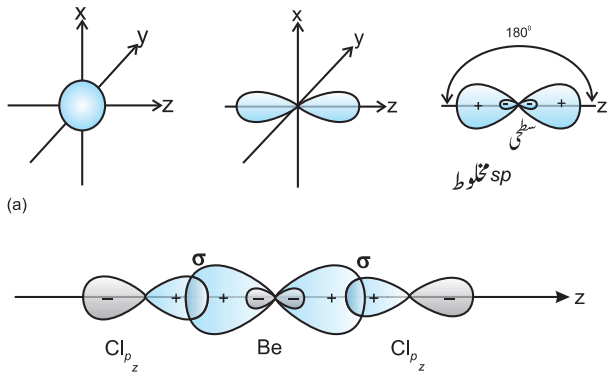
© NCERT not to be Republished

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

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

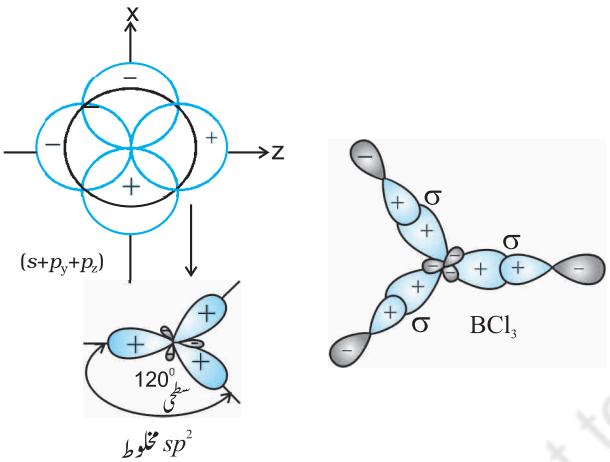
### sp- مخلوطیت والے سالمات کی مثالیں

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




**شکل 4.10** (a) s اور p اربٹل سے sp مخلوط کا بننا (b) خطّی $BeCl_2$ سالمے کا بننا

**(II) $sp^2$ مخلوطیت:** اس قسم کی مخلوطیت میں ایک s اور 2p اربٹل شامل ہوتے ہیں جو تین معادل مخلوط $sp^2$ اربٹل بناتے ہیں۔ مثال کے طور پر $BeCl_3$ سالمے میں مرکزی ایٹم بورون کا گراؤنڈ اسٹیٹ میں الیکٹرانی تشکل $1s^2\ 2s^2\ p^1$ ہوتا ہے۔ مشتعل حالت میں 2s کا ایک الیکٹران خالی 2p اربٹل میں چلا جاتا ہے جس کے نتیجے میں بورون کے پاس تین غیر جفتی الیکٹران ہو جاتے ہیں۔ یہ تین اربٹل (ایک 2s اور دو 2p) مل کر تین $sp^2$ مخلوط اربٹل بناتے ہیں۔ اس طرح بننے والے تین مخلوط اربٹل ٹرائی گونل پلینر ترتیب میں آجاتے ہیں اور کلورین کے 2p اربٹل سے مل کر تین B-Cl بند بناتے ہیں۔ لہٰذا $BCl_3$ کی جیومیٹری ٹرائی گونل پلینر ہوتی ہے اور ClBCl بند زاویہ 120° ہوتا ہے (شکل 4.11)۔

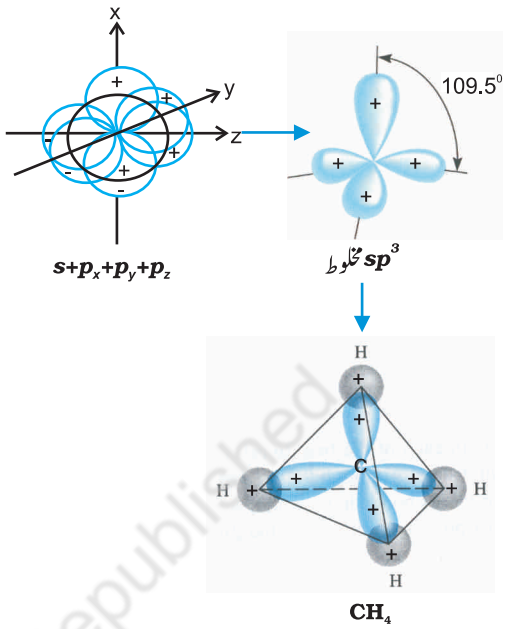



شکل **4.11** $sp^3$ مخلوط اربٹل اور $BCl_3$ سالمے کا بننا

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

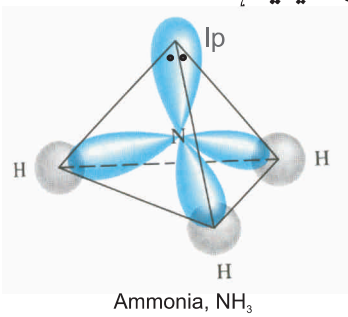
$NH_3$ اور $H_2O$ سالموں کی اشکال بھی $sp^3$ مخلوطیت کی مدد سے واضح کی جاسکتی ہیں۔ $NH_3$ سالمے میں نائٹروجن کا گراؤنڈ اسٹیٹ پر الیکٹرانی تشکل $2s^2\ 2p_x^1\ 2p_y^1\ 2p_z^1$ ہوتا ہے۔ جس میں سے تین $sp^3$ مخلوط اربٹل میں غیر جفتی الیکٹران ہوتے ہیں اور چوتھے میں ایک الیکٹرانوں کا تنہا جوڑا ہوتا ہے۔ یہ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

© NCERT not to be republished




**شکل 4.12** کاربن کے $s$، $p_x$، $p_y$ اور $p_z$ اربٹل کے اتحاد سے بننے والے $sp^3$ مخلوط اربٹل اور $CH_4$ کا بننا

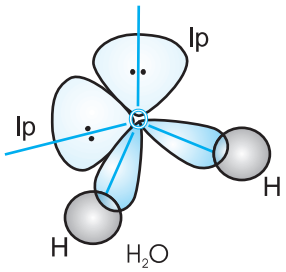
بندشی جوڑوں کے درمیان قوت دافعہ سے زیادہ ہوتی ہے۔ اس طرح سالمہ کی شکل مسخ ہو جاتی ہے اور بند زاویہ 109.5° سے گھٹ کر 107° ہو جاتا ہے۔ اس طرح کے سالموں کی جیومیٹری پیرامڈل ہوتی ہے جیسا کہ شکل 4.13 میں دکھایا گیا ہے۔



Ammonia, $NH_3$

**شکل 4.13** $NH_3$ سالمہ کا بننا

$H_2O$ سالمہ میں آکسیجن کے چار اربٹل (ایک 2s اور تین 2p) میں $sp^3$ مخلوطیت ہوتی ہے اور چار $sp^3$ اربٹل بنتے ہیں جن میں سے دو اربٹل 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 اربٹل چہار سطحی جیومیٹری حاصل کرتے ہیں۔ جس کے دو کونوں میں دو ہائڈروجن کے ایٹم ہوتے ہیں اور باقی دو کونوں میں غیر بندشی جوڑے ہوتے ہیں۔ اس میں بندشی زاویہ 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** $H_2O$ سالمہ کا بننا

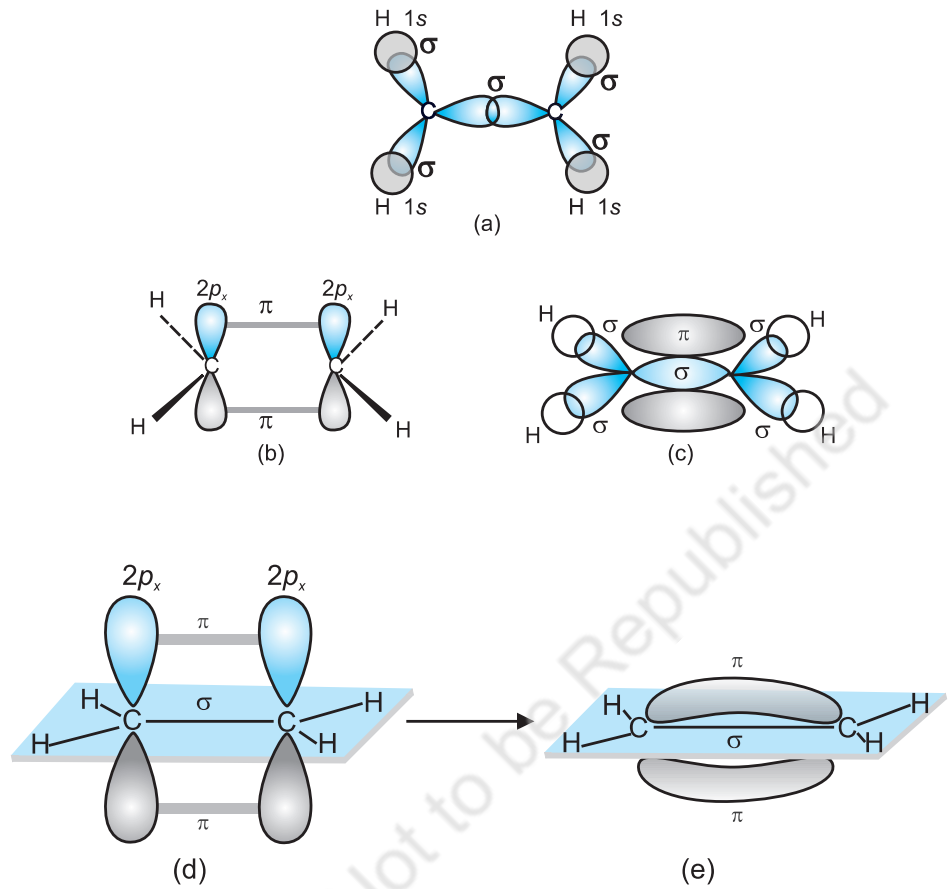
### 4.6.2 $sp^3$، $sp^2$ اور $sp$ مخلوطیت کی کچھ اور مثالیں

**$C_2H_6$ سالمے میں $sp^3$ مخلوطیت:** ایتھین کے سالمے میں دونوں کاربن ایٹموں میں $sp^3$ مخلوط حالت ہوتی ہے۔ کاربن ایٹم کے چار $sp^3$ مخلوط اربٹل میں سے ایک محوری طور پر دوسرے کاربن کے ایسے ہی اربٹل کے ساتھ اوورلیپ کرتا ہے اور ایک $sp^3$-$sp^3$ سگما بند بناتا ہے جبکہ ہر ایک کاربن کے تین مخلوط اربٹل ہائڈروجن ایٹم کے ساتھ $sp^3$-s سگما بند بناتے ہیں جیسا کہ 4.6.1 (iii) میں دکھایا گیا ہے۔ لہٰذا ایتھین میں C-C بندشی لمبائی 154 pm ہوتی ہے اور C-H بندشی لمبائی 109 pm ہوتی ہے۔

**$C_2H_4$ میں $sp^2$ مخلوطیت:** ایتھین سالمہ کے بننے میں ایک کاربن ایٹم کا ایک $sp^2$ مخلوط اربٹل دوسرے ایٹم کے $sp^2$ مخلوط اربٹل کے ساتھ محوری طور پر اوورلیپ کر کے C-C سگما بند بناتا ہے۔ جبکہ ہر ایک کاربن کے باقی دو $sp^2$ مخلوط اربٹل دو ہائڈروجن ایٹموں کے ساتھ $sp^2$-s سگما بند بناتے ہیں جبکہ ہر ایک کاربن کے باقی دو $sp^2$ مخلوط اربٹل دو ہائڈروجن ایٹموں کے ساتھ $sp^2$-s سگما بند بنانے میں استعمال ہوتے ہیں۔ ایک کاربن ایٹم کا غیر مخلوط اربٹل ($2p_x$ یا $2p_y$) دوسرے کاربن ایٹم کے مماثل اربٹل کے ساتھ پہلوی اوورلیپ کر کے ایک کمزور π بند بناتا ہے جو کاربن اور ہائڈروجن کی سطح کے اوپر اور نیچے دو مساوی الیکٹران بادلوں کی شکل میں رہتا ہے۔

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

© NCERT not to be Republished

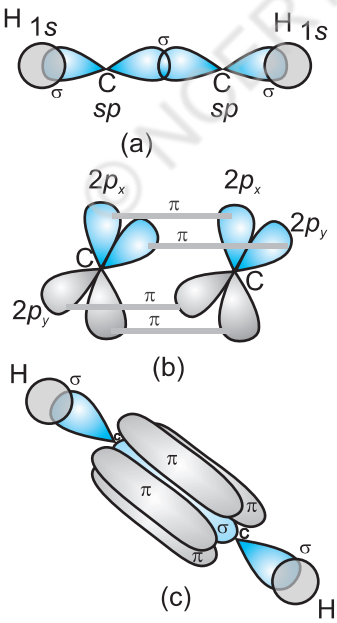



**شکل 4.15** ایتھین میں سگما اور پائی بانڈ کا بننا

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 اربٹل، یعنی $2p_y$ اور $2p_x$ ہوتے ہیں۔

ایک کاربن ایٹم کا sp مخلوط اربٹل دوسرے کاربن ایٹم کے sp مخلوط اربٹل کے ساتھ محوری اوورلیپ کر کے C-C سگما بند بناتے ہیں جبکہ ہر ایک کاربن کا دوسرا مخلوط اربٹل محوری سطح پر ہائڈروجن ایٹم کے نصف بھرے ہوئے s اربٹل پر اوورلیپ کر کے σ بند بناتا ہے۔ دونوں کاربن ایٹموں کے دو غیر مخلوط p اربٹل جانبی اوورلیپ 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 4.16** ایتھائن میں سگما اور پائی بند کا بننا

© NCERT Not to be Republished

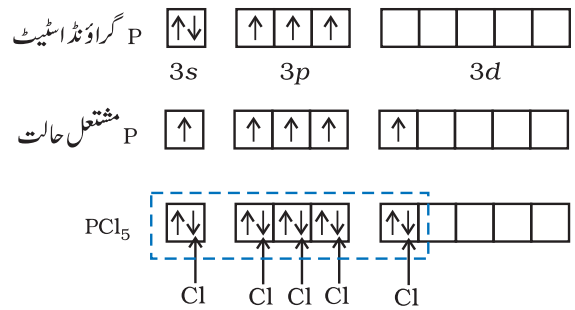
### 4.6.3 -$d$ اربٹل والے عناصر میں مخلوطیت
### (Hybridisation of Elements Involving *d* Orbitals)

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

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

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

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

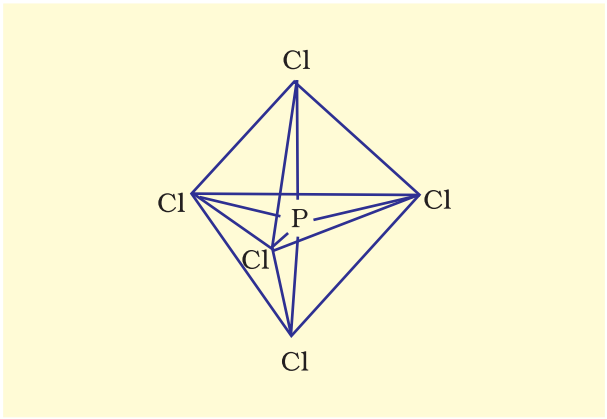





$sp^3d$ مخلوط اربٹل پانچ کلورین ایٹموں کے ذریعہ فراہم کرائے گئے الیکٹرانوں سے بھرے ہوئے




**شکل 4.17** $PCl_5$ سالمہ کی ٹرائی گونل بائی پیرامڈل جیومیٹری



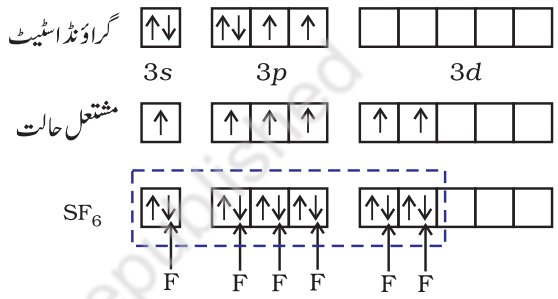
اب پانچ اربٹل (یعنی ایک $s$، تین $p$ اور ایک $d$ اربٹل) مخلوطیت کے لیے دستیاب ہیں جو $sp^3d$ مخلوط اربٹل کو بنائیں گے جو کہ ٹرائی گونل بائی پیرامڈل کے پانچ کونوں کی سمت میں ہوں گے جیسا کہ شکل 4.17 میں دکھایا گیا ہے۔

یہ دیکھنا چاہیے کہ ٹرائی گونل بائی پیرامڈل جیومیٹری میں تمام زاویے برابر نہیں ہوتے۔ $PCl_5$ میں فاسفورس کے پانچ $sp^3d$ مخلوط اربٹل کلورین ایٹم کے $p$ اربٹل، جس میں صرف ایک الیکٹران ہوتا ہے سے اوورلیپ کرکے 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۔ لہٰذا محوری بند، اسطوانی بند کے مقابلے میں تھوڑے سے لمبے اور کمزور پائے ہوتے ہیں جس کی وجہ سے $PCl_5$ زیادہ متعامل ہوتا ہے۔

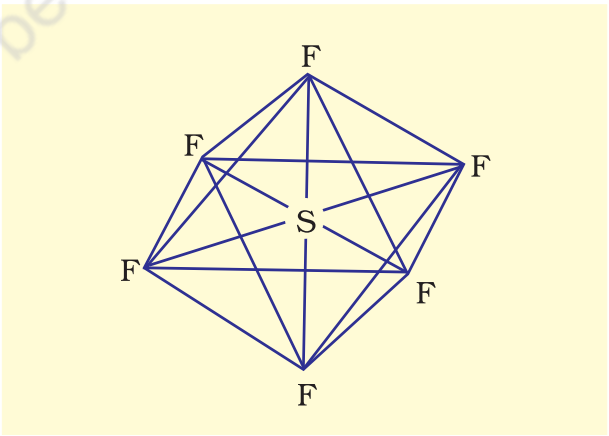
**(ii) $SF_6$ کا بننا ($sp^3\ d^2$ مخلوطیت):** $SF_6$ میں مرکزی ایٹم سلفر کا گراؤنڈ اسٹیٹ میں الیکٹرانی تشکل $3s^2\ 3p^4$ ہے۔ مشتعل حالت میں دستیاب چھ اربٹل یعنی، ایک $s$، تین -$p$ اور دو -$d$ اربٹل میں ایک ایک

© NCERT Not to be Republished

الیکٹران ہوتا ہے۔ یہ اربٹل مخلوطیت کے بعد چھ نئے $sp^3\ d^2$ مخلوط اربٹل بناتے ہیں جو $SF_6$ میں باقاعدہ آکٹاہیڈرن کے چھ کونوں کی سمت ہوتے ہیں۔ یہ چھ $sp^3d^3$ ہے۔ مخلوط اربٹل فلورین ایٹم کے ایک الیکٹران سے گھرے ہوئے ہوتے ہیں اربٹل پر اوورلیپ کرکے 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۔




$sp^3d^2$ مخلوطیت




**شکل 4.18** $SF_6$ سالمہ کی آکٹا ہیڈرل جیومیٹری

## 4.7 مولیکیولر اربٹل تھیوری
## (Molecular Orbital Theory)

مولیکولر اربٹل نظریہ 1932 میں ایف۔ ہُنڈ اور آر۔ ایس۔ مُلیکن نے تیار کیا تھا۔ اس نظریہ کی خصوصیات مندرجہ ذیل ہیں:

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

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

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

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

(v) بندشی مولیکولر اربٹل کی توانائی کم ہوتی ہے لہٰذا متعلقہ اینٹی بونڈنگ مولیکولر اربٹل سے اس کا استحکام زیادہ ہوتا ہے۔

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

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

### 4.7.1 مولیکیولر آربٹل کا بننا ایٹمی اربٹل کا خطّی اتحاد
### (Formation of Molecular Orbitals Linear Combination of Atomic Orbitals (LCAO)

لہر میکانیات (Wave Mechanics) کے مطابق ایٹمی اربٹل کو لہر تفاعل ($\psi$) سے ظاہر کرتے ہیں جو الیکٹران لہروں کی وسعت کو ظاہر کرتا ہے۔ انہیں شروڈنجر 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، مولیکیولر اربٹل جو سالموں کے لیے ایک الیکٹران لہر فنکشن ہوتے ہیں انہیں براہِ راست شروڈنجر 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 اربٹل کا خطی اتحاد** (Linear Combination of Atomic Orbital) کہلاتا ہے۔

© NCERT not to be Republished

آیئے اس طریقہ کو ہومونیوکلیر دو ایٹمی ہائڈروجن سالمے کے لیے استعمال کرتے ہیں۔ مان لیجیے ہائڈروجن سالمہ دو ایٹم A اور B سے مل کر بنا ہے۔ ہر ایک ہائڈروجن ایٹم اپنی گراؤنڈ اسٹیٹ میں 1s اربٹل میں ایک الیکٹران ہوتا ہے۔ ان ایٹموں کے ایٹمی اربٹل لہر فنکشن $\psi_A$ اور $\psi_B$ سے ظاہر کیے جاسکتے ہیں۔ ریاضیاتی طور پر مالیکیولر اربٹل مالیکیولر اربٹل کا بننا ایٹمی اربٹل کے خطّی اتحاد سے ظاہر کیا جاسکتا ہے جو منفرد ایٹمی اربٹل کے لہر فنکشن کے جمع اور گھٹا کرنے سے حاصل ہوسکتا ہے جیسا کہ نیچے دکھایا گیا ہے۔

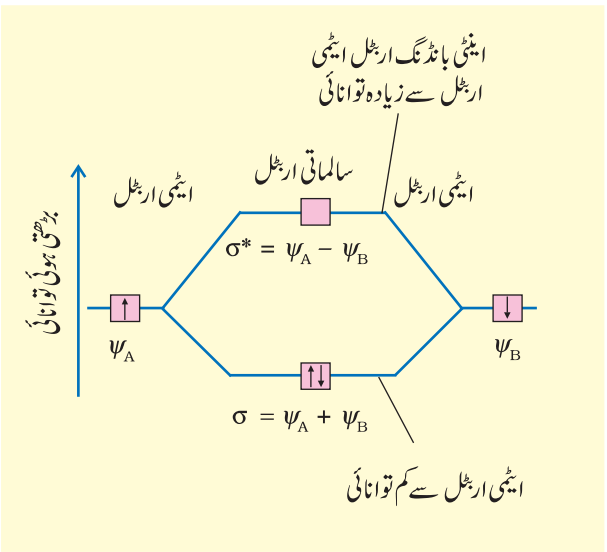
$$\psi_{MO} = \psi_A \pm \psi_B$$

لہٰذا σ اور σ* دو مالیکیولر اربٹل اس طرح بنیں گے۔

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

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

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




**شکل 4.19** دو ایٹم A اور B کے مرکز پر ایٹمی اربٹل $\psi_A$ اور $\psi_B$ کے خطّی اتحاد سے بننے والے بانڈنگ (σ) اور اینٹی بانڈنگ (σ*) مولیکیولر اربٹل کا بننا

کیفیتی طور پر، سالماتی اربٹل کا بننا اتحادی ایٹموں کی الیکٹرانی لہروں کی تعمیری اور تخریبی تداخل (Constructive and Distructive Interference) کی اصطلاحات میں سمجھا جاسکتا ہے۔ بانڈنگ مالیکیولر اربٹل کے بننے میں بندشی ایٹموں کی دو الیکٹران لہریں ایک دوسرے کو تعمیری تداخل کے سبب تقویت پہنچاتی ہیں جبکہ اینٹی بانڈنگ مالیکیولر اربٹل کے بنے میں الیکٹران لہریں تخریبی تداخل کی وجہ سے ایک دوسرے کو رَد کر دیتی ہیں۔ نتیجہ کے طور پر بانڈنگ مالیکیولر اربٹل کی الیکٹران کثافت اتحادی ایٹموں کے مرکزوں کے درمیان قائم رہتی ہے جس کی وجہ سے نیوکلیس کے درمیان دفع بہت کم ہوتا ہے جبکہ اینٹی بانڈنگ مولیکیولر اربٹل میں زیادہ تر الیکٹران کثافت کے درمیان کی جگہ سے دور ہوتے ہیں۔ دراصل مرکزوں کے درمیان ایک نوڈل مستوی ہوتا ہے (جس پر الیکٹران کثافت صفر ہوتی ہے) جس کی وجہ سے نیوکلیس کے درمیان قوت دافعہ زیادہ ہوتی ہے۔ گرفتی مالیکیولر اربٹل میں موجود الیکٹران مرکزوں کو ایک ساتھ تھامے رہتے ہیں جس کی وجہ سے سالمہ مستحکم ہو جاتا ہے۔ لہٰذا ایک گرفتی مالیکیولر اربٹل میں ہمیشہ ان دونوں ایٹمی اربٹل سے کم توانائی ہوتی ہے جن سے مل کر وہ بنتے ہیں۔ اس کے برعکس وہ الیکٹران جو انٹی بانڈنگ مالیکیولر اربٹل میں ہوتے ہیں وہ سالمہ کو غیر مستحکم کرتے ہیں۔ یہ اس وجہ سے ہوتا ہے کہ اس اربٹل میں الیکٹرانوں کی آپسی قوت دافعہ الیکٹرانوں اور نیوکلیس کے درمیان کشش سے زیادہ ہوتی ہے جس کی وجہ سے کل توانائی میں اضافہ ہوتا ہے۔

یہ بات قابلِ غور ہے کہ اینٹی بانڈنگ اربٹل کی توانائی ان ایٹمی اربٹل سے اوپر اٹھ جاتی ہے جن اربٹل سے مل کر وہ بنتے ہیں جبکہ بندشی اربٹل کی توانائی ان سے نیچے گر جاتی ہے جو ان کے بنانے والے ہیں۔ تاہم، دونوں مالیکیولر اربٹل کی کُل توانائی اتنی ہی رہتی ہے جتنی کہ ابتدائی دو ایٹمی اربٹل کی ہوتی ہے۔

### 4.7.2 ایٹمی اربٹل کے اتحاد کی شرائط
### (Conditions for the Combination of Atomic Orbitals)

مالیکیولر اربٹل بنانے کے لیے ایٹمی اربٹل کا خطّی اتحاد اسی وقت ممکن ہے جبکہ مندرجہ ذیل شرائط پوری ہوسکیں۔

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

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

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

**3۔ متحد ہونے والے ایٹمی اربٹل کا اوورلیپ زیادہ سے زیادہ ہونا چاہیے۔** جتنا زیادہ اوورلیپ ہوگا مالیکیولر اربٹل کے مرکزوں کے درمیان اتنی ہی زیادہ الیکٹران کثافت ہوگی۔

### 4.7.3 مالیکیولر اربٹل کی قسمیں (Types of Molecular Orbitals)

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

اس تسمیہ میں 'سگما (σ) مالیکیولر اربٹل بند-محور کے گرد تشاکلی ہوتے ہیں جبکہ پائی (π) مالیکیولر اربٹل تشاکلی نہیں ہوتے۔' مثال کے طور پر 1s- اربٹل کا خطّی اتحاد جو دو مرکزوں کے گرد ہوتا ہے اور دو مالیکیولر اربٹل بناتا ہے جو بند-محور کے گرد تشاکلی ہوتے ہیں۔ ایسے مالیکیولر اربٹل σ قسم کے ہوتے ہیں اور ان کو σ1s اور σ* 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 **2pz** اربٹل کا خطّی اتحاد بھی دو سگما مالیکیولر اربٹل 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 مالیکیولر اربٹل بانڈ-محور کے گرد تشاکلی نہیں ہوتے کیونکہ سالماتی سطح کے اوپر مثبت لوب اور نیچے منفی لوب ہوتا ہے۔ ایسے مالیکیولر اربٹل کو π اور π* سے ظاہر کرتے ہیں (شکل 4.20(c))۔ π- بانڈنگ مالیکیولر اربٹل میں بین مرکزی محور کے اوپر اور نیچے الیکٹران- کثافت زیادہ ہوتی ہے۔ π* اینٹی بانڈنگ مالیکیولر اربٹل میں مرکزوں کے درمیان نوڈ ہوتی ہے۔

### 4.7.4 مالیکیولر اربٹل کے انرجی لیول ڈائیگرام (Energy Level Diagram for Molecular Orbitals)

ہم نے دیکھا کہ دو ایٹموں کے 1s ایٹموں اربٹل دو مالیکیولر اربٹل σ1s اور σ1s* بناتے ہیں۔ اسی طرح 2s اور 2p ایٹمی اربٹل (دو ایٹموں پر آٹھ ایٹمی اربٹل) مل کر مندرجہ ذیل آٹھ مالیکیولر اربٹل دیتے ہیں۔

$\sigma^*2s$ $\sigma^*2p_z$ $\pi^*2p_x$ $\pi^*2p_y$ اینٹی بانڈنگ مالیکیولر اربٹل

$\sigma 2s$ $\sigma 2p_z$ $\pi 2p_x$ $\pi 2p_y$ بانڈنگ مولیکیولر اربٹل

ان مالیکیولر اربٹل 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 مالیکیولر اربٹل 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 مالیکیولر اربٹل کی توانائی کے درجات کی یہ ترتیب باقی سالموں، $Li_2$، $Be_2$، $B_2$، $C_2$، $N_2$ کے لیے صحیح نہیں ہے۔ مثال کے طور پر تجرباتی طور پر یہ دیکھا گیا ہے کہ $B_2$، $C_2$، $N_2$ وغیرہ جیسے سالمات کے لیے مختلف مالیکیولر اربٹل 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 **$\sigma 2p_z$ مالیکیولر اربٹل کی توانائی $\pi^*2p_x$ اور $\pi 2p_y$ مالیکیولر اربٹل سے زیادہ ہے۔**

### 4.7.5 الیکٹرانی تشکل اور سالماتی طرزِ عمل (Electronic Configuration and Molecular Behaviour)

مختلف مالیکیولر اربٹل میں الیکٹرانوں کا بٹاؤ سالمے کا **الیکٹرانی تشکل** کہلاتا ہے۔ سالمے کے الیکٹرانی 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 اربٹل میں الیکٹرانوں کی تعداد $N_b$ ہے اور اینٹی بانڈنگ اربٹل میں الیکٹرانوں کی تعداد $N_a$ ہے تو:

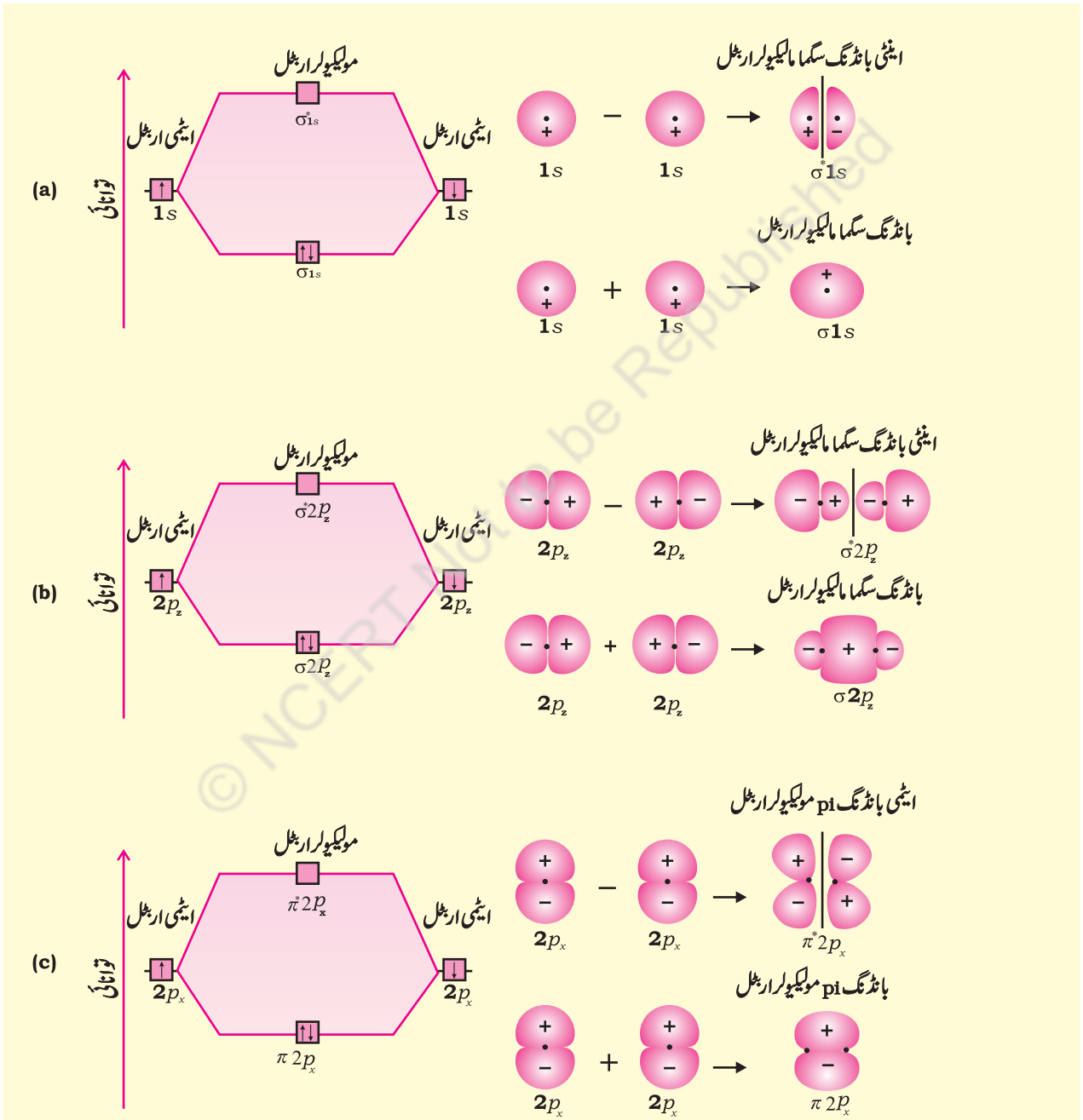
(i) اگر $N_b$، $N_a$ سے زیادہ ہے تو سالمہ مستحکم ہوگا اور

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

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

## بانڈ آرڈر *(Bond Order)*

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




**شکل 4.20** (a) 1s - ایٹمی اربٹل، (b) $2p_z$ ایٹمی اربٹل اور (c) $2p_x$ ایٹمی اربٹل کے اتحاد سے بننے والے بانڈنگ اور اینٹی بانڈنگ مالیکیولر اربٹل کی توانائیاں اور خدوخال

© NCERT Not to be Republished

$(BO) = ½(N_b - N_a)$

سالموں کی استحکام سے متعلق اوپر بیان کیے گئے اصولوں کو بانڈ آرڈر کی اصطلاحات میں مندرجہ ذیل طریقہ سے دوبارہ بیان کیا جاسکتا ہے۔ ایک مثبت بانڈ 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)*

بانڈ آرڈر کی تکملی 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 بانڈ آرڈر کو بندشی لمبائی کی قریبی پیمائش کے طور پر لیا جاسکتا ہے جب بانڈ آرڈر بڑھتا ہے تو بندشی لمبائی کم ہوتی ہے۔

### مقناطیسی فطرت *(Magnetic Nature)*

اگر کسی سالمے میں تمام مالیکیولر آربٹل 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 مالیکیولر آربٹل 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 دوایٹمی سالموں میں بندش
## (Bonding in Some Homonuclear Diatomic Molecules)

اس سیکشن میں ہم کچھ ہم نیوکلیائی دوایٹمی 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 ارٹبل میں ایک الیکٹران ہوتا ہے۔ لہٰذا، ہائڈروجن کے سالمہ میں کُل دو الیکٹران ہوتے ہیں جو $\sigma 1s$ مالیکیولر آربٹل میں موجود ہوتے ہیں۔ لہٰذا ہائڈروجن سالمے کا الیکٹرانی تشکل ہوتا ہے:

$H_2 : [\sigma 1s]^2$

ہائڈروجن سالمے $H_2$ کا بانڈ آرڈر مندرجہ ذیل طریقے سے معلوم کیا جاسکتا ہے۔

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

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

**2. ہیلیم سالمہ (He):** ہیلیم ایٹم کا الیکٹرانی تشکل $1s^2$ ہے۔ ہیلیم کے ہر ایک ایٹم میں دو الیکٹران ہوتے ہیں لہٰذا ہیلیم کے سالمہ میں چار (4) الیکٹران ہوں گے۔ یہ الیکٹران $\sigma 1s$ اور $\sigma^* 1s$ مالیکیولر آربٹل میں ہوتے ہیں جس کی وجہ سے الیکٹرانی تشکل مندرجہ ذیل ہوتا ہے۔

$He_2 : (\sigma 1s)^2\ (\sigma^* 1s)^2$

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

$He_2$ سالمہ لہٰذا غیر مستحکم ہے اور پایا نہیں جاتا۔

اسی طرح یہ بھی دکھایا جاسکتا ہے کہ $Be_2$ سالمہ $(\sigma 1s)^2\ (\sigma^* 1s)^2\ (\sigma 2s)^2\ (\sigma^* 2s)^2$ بھی نہیں پایا جاتا۔

**3. لیتھیم سالمہ ($Li_2$):** لیتھیم کا الیکٹرانی تشکل $1s^2, 2s^1$ ہے $Li_2$ میں چھ الیکٹران ہیں۔ لہٰذا $Li_2$ سالمہ کا الیکٹرانی تشکل، $Li_2 : (\sigma 1s)^2\ (\sigma^* 1s)^2\ (\sigma 2s)^2$ 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 الیکٹرانی تشکل سے یہ بات ظاہر ہے کہ بانڈنگ مالیکیولر آربٹل میں چار الیکٹران موجود ہیں اور دو الیکٹران اینٹی بانڈنگ مالیکیولر آربٹل میں موجود ہیں۔ لہٰذا اس کا بانڈ آرڈر، $½(4-2) = 1$ ہے۔ اس کا مطلب ہے کہ $Li_2$ سالمہ مستحکم ہے اور چونکہ اس کے پاس غیر جوڑے کے الیکٹران نہیں ہیں لہٰذا یہ ڈایا مقناطیسی ہوگا۔ درحقیقت ڈایا مقناطیسی $Li_2$ سالمے بخارات کی شکل میں پائے جاتے ہیں۔

**4. کاربن سالمہ ($C_2$):** کاربن کا الیکٹرانی تشکل $1s^2\ 2s^2\ 2p^2$ ہے۔ $C_2$ میں بارہ الیکٹران ہوتے ہیں۔ لہٰذا، $C_2$ سالمہ کا الیکٹرانی تشکل:

$$C_2 : (\sigma 1s)^2 (\sigma^* 1s)^2 (\sigma 2s)^2 (\sigma^* 2s)^2 (\pi 2p_x^2 = \pi 2p_y^2)$$

© NCERT not to be republished

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

کاربن کا بانڈ آرڈر $\frac{1}{2}(8-4) = 2$ 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 دوہرا بند دونوں پائی بند پر مشتمل ہوتا ہے کیونکہ دو پائی مالیکیولر اربٹل 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 الیکٹرانی تشکل $1s^2\ 2s^2\ 2p^4$ ہے۔ ہر ایک آکسیجن ایٹم کے پاس 8 الیکٹران ہیں لہٰذا $O_2$ سالمہ میں 16 الیکٹران ہوں گے۔ $O_2$ سالمہ کا الیکٹرانی تشکل اس طرح

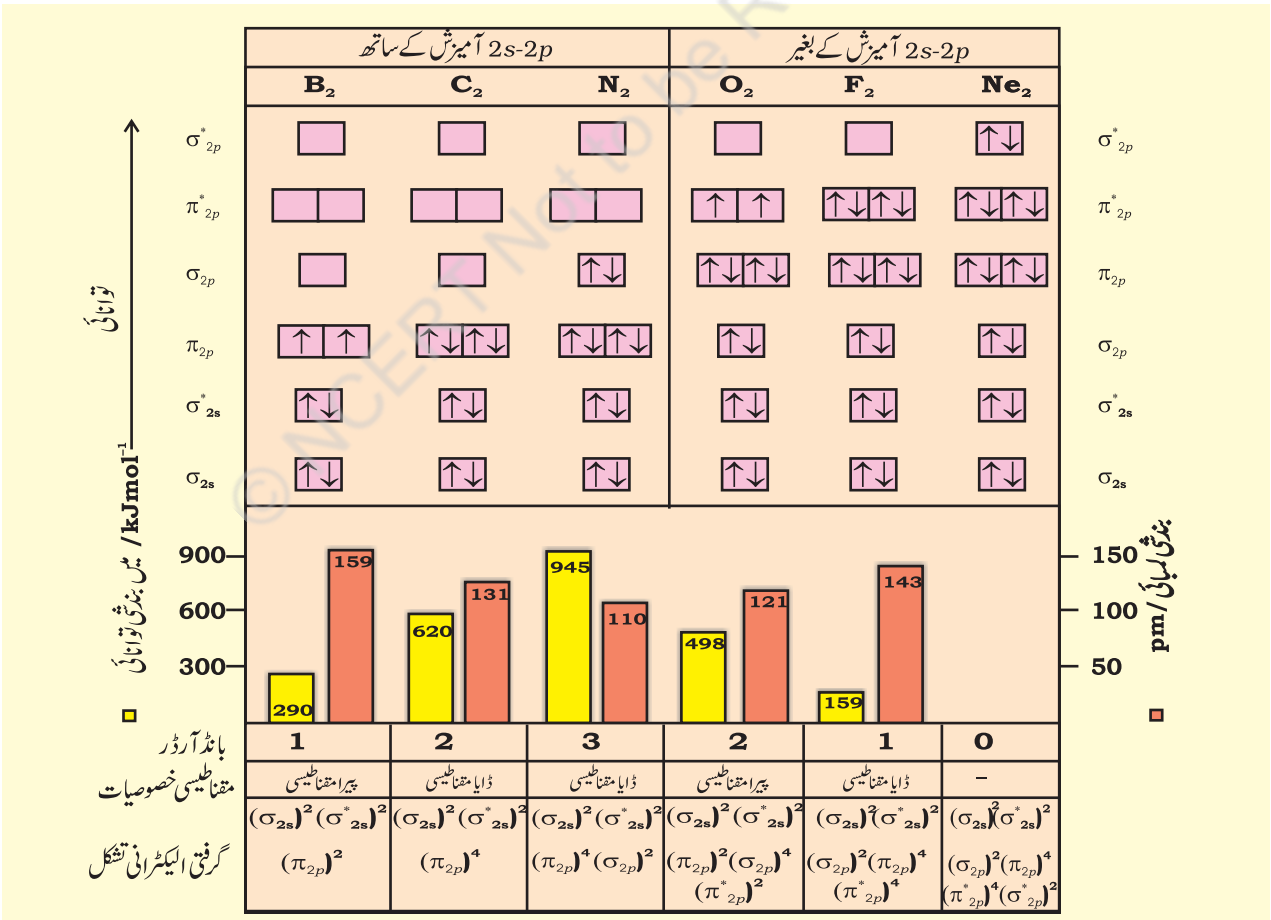
$$O_2 : (\sigma 1s)^2(\sigma^* 1s)^2(\sigma 2s)^2(\sigma^* 2s)^2(\sigma 2p_z)^2$$
$$(\pi\ 2p_x^{\ 2} \equiv \pi\ 2p_y^{\ 2})\ (\pi^* 2p_x^{\ 1} \equiv \pi^* 2p_y^{\ 1})$$

$O_2$ : $\begin{bmatrix} KK\ (\sigma 2s)^2(\sigma^* 2s)^2(\sigma 2p_z)^2 \\ (\pi 2p_x^2 \equiv \pi 2p_y^2), (\pi^* 2p_x^1 \equiv \pi^* 2p_y^1) \end{bmatrix}$ ہوگا۔

$O_2$ سالمے کے الیکٹرانی تشکل سے یہ واضح ہوتا ہے کہ بانڈنگ مالیکیولر اربٹل میں 10 (دس) الیکٹران موجود ہیں اور 6 الیکٹران اینٹی بانڈنگ مالیکیولر اربٹل میں موجود ہیں۔ لہٰذا اس کا

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

لہٰذا 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 $\pi^*2p_y$ مالیکیولر اربٹل میں موجود ہیں۔ **لہٰذا $O_2$ سالمہ، ایک پیرا مقناطیسی سالمہ ہونا چاہیے۔ ایک اندازہ جس کی تصدیق تجرباتی مشاہدہ سے ہوتی ہے۔ اس طرح یہ نظریہ آکسیجن کی پیرا مقناطیسی فطرت کی کامیابی کے ساتھ وضاحت کرتا ہے۔**




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

اسی طرح دوری جدول کے دوسرے دور کے عناصر کے دوسرے ہم نیوکلیائی دو ایٹمی سالموں کے الیکٹرانی تشکل بھی لکھے جا سکتے ہیں۔ شکل 4.21 میں $B_2$ سے $Ne_2$ تک عناصر کی سالمی خصوصیات اور مالیکیولر اربٹل کا بھراؤ دیا گیا ہے۔ مالیکیولر اربٹل کی ترتیب اور ان کے الیکٹرانوں کی تعداد دکھائی گئی ہے۔ بندشی توانائی، بندشی لمبائی، بانڈ آرڈر، مقناطیسی خصوصیات اور بندش الیکٹران تشکل آربٹل 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 کھِسک جاتے ہیں۔ یہ جُزوی مثبت چارج والے ہائڈروجن دوسرے زیادہ الیکٹرونگیٹو 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۔

$$---H^{\delta+} - F^{\delta-} --- H^{\delta+} - F^{\delta-} --- H^{\delta+} - F^{\delta-}$$

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

ہائڈروجن بند کو ٹوٹی ہوئی لائن (– – –) سے ظاہر کرتے ہیں جبکہ ایک ٹھوس لائن شریک بندش بند کو ظاہر کرتی ہے۔ **لہٰذا 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 یا 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 ہو جاتا ہے جس کے نتیجہ میں ہائڈروجن دوسرے عنصر X کے مقابلے میں بہت زیادہ برقی مثبت ہو جاتا ہے۔ چونکہ الیکٹران X کی سمت کھسک جاتے ہیں لہٰذا ہائڈروجن پر ایک جزوی مثبت چارج آجاتا ہے ($\delta^+$) جبکہ X پر جزوی منفی چارج ($\delta^-$) آجاتا ہے۔ اس کے نتیجے میں قطبی سالمہ بنتا ہے جس میں برقی سکونی قوتِ کشش ہوتی ہے اور جسے مندرجہ ذیل طریقہ سے ظاہر کرتے ہیں۔

$$H^{\delta+} - X^{\delta-} --- H^{\delta+} - X^{\delta-} --- H^{\delta+} - X^{\delta-}$$

ہائڈروجن بند کی قدر مرکب کی طبیعی حالت پر منحصر ہوتی ہے۔ یہ ٹھوس حالت میں سب سے زیادہ ہوتی ہے اور گیسی 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)

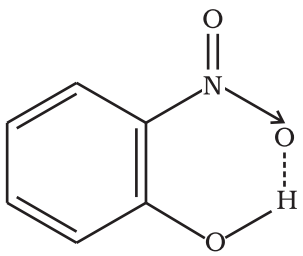
H– بند دو قسم کے ہوتے ہیں

(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-نائٹروفینول سالمے میں درون سالمی ہائڈروجن بندش

© NCERT Not to be republished

## خلاصہ

برقی مثبت اور برقی منفی آیونوں کے بننے کے عمل میں کوسیل کی پہلی بصیرت کا تعلق آیونوں کے ذریعہ نوبل گیس تشکل حاصل کرنے کے عمل سے تعلق رکھتا ہے۔ آیونوں 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 گرفتی الیکٹرانوں کی تعداد کو ظاہر کرتے ہیں اور لیوئس نقطہ ساختیں سالموں میں بندش کا تصویری اظہار ہیں۔

ایک آینی مرکب کی شکل مثبت اور آیونوں کے ایک باترتیب سہ ابعادی مجموعہ کی شکل میں ہوتی ہے جسے کرسٹل لیٹس (Crystal Latice) کہتے ہیں۔ قلمی ٹھوس میں مثبت اور منفی آیونوں کے درمیان ایک چارج کا توازن ہوتا ہے۔ **قلمی جالی لیٹس تشکیل کی اینتھالپی** کے ذریعہ مستحکم ہوتی ہے۔

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

سالمات اور کثیر ایٹمی آیونوں 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 آین 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 آین 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 دافع قوتوں کی ترتیب کا تسلسل اس طرح ہوتی 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 اربٹل 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 اربٹل کے انطباق شامل ہیں جن میں ایک ایک الیکٹران موجود ہے۔ یہ دیکھا گیا ہے کہ جیسے جیسے دونوں ہائڈروجن ایٹم ایک دوسے کے نزدیک آتے ہیں تو اس نظام کی مضمر توانائی کم ہوجاتی ہے۔ بین مرکزی متوازن فاصلے بندشی فاصلے پر یہ توانائی کم سے کم ہو جاتی ہے۔ ان نیوکلیس کو مزید قریب لانے کی کوشش توانائی میں فوری اضافہ کردے گی اور سالمہ کو غیر مستحکم بنادے گی۔ انطباق کی وجہ سے نیوکلیس 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 بندشی لمبائی کی قدریں محض انطباق سے حاصل نہیں ہوتیں بلکہ دوسرے متغیروں کو بھی اس میں شامل کرنا لازمی ہے۔

کثیر ایٹمی سالموں کی مخصوص شکل کی وضاحت کے لیے پالنگ نے **ایٹمی اربٹل کی مخلوطیت** کا تصور پیش کیا تھا $BeCl_2$، $BCl_3$، $CH_4$، $NH_3$ اور $H_2O$ جیسے سالموں کی جیومیٹریائی اشکال کی وضاحت کے لیے Be، B، C، N اور O کے ایٹمی اربٹل کی $sp$، $sp^2$ اور $sp^3$ مخلوطیت کا استعمال کیا گیا تھا۔ یہ $C_2H_4$ اور $C_2H_2$ جیسے سالموں میں کثیر بند کے بننے کی بھی وضاحت کرتے ہیں۔

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

سالموں کا الیکٹرانی تشکل مالیکیولر اربٹل میں ان کی بڑھتی ہوئی توانائی کی ترتیب میں الیکٹرانوں کو بھرتے ہوئے لکھا جاتا ہے۔ جیسا کہ ایٹموں میں ہوتا ہے، مالیکیولر اربٹل میں بھی الیکٹرانوں کو بھرنے کے لیے پالی کا اصول اخراج (Paulis Exclusion Principle) اور ہُنڈ کا قانون استعمال ہوتا ہے۔ سالمے اس وقت مستحکم کہے جاسکتے ہیں جب گرفتی مالیکیولر اربٹل میں الیکٹرانوں کی تعداد اینٹی بانڈنگ مالیکیولر اربٹل 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 F، O 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 سالمے میں موجود ہوتی ہے) ہوسکتی ہے۔ ہائڈروجن بونڈ بہت سے مرکبات کی اشکال اور خصوصیات پر گہرا اثر رکھتے ہیں۔

## مشقیں

4.1 کیمیائی بندش کی تشکیل کی وضاحت کیجیے۔

4.2 مندرجہ ذیل عناصر کے ایٹموں کے لیے لیوس ڈاٹ علامات لکھیے:

Mg, Na, B, O, N, Br

4.3 مندرجہ ذیل ایٹموں اور آینوں کے لیے لیوئس علامات لکھیے:

S اور $S^{2-}$؛ Al اور $Al^{3+}$؛ H اور $H^-$

4.4 مندرجہ ذیل سالموں اور آینوں کے لیے لیوئس اشکال بنایئے:

$H_2S$، $SiCl_4$، $BeF_2$، $CO_3^{2-}$، HCOOH۔

4.5 آکٹیٹ قاعدے کی تعریف بیان کیجیے۔ اس کی اہمیت اور حدود لکھیے۔

4.6 آینی بندش بننے کے لیے موافق عوامل لکھیے۔

4.7 VSEPR ماڈل کا استعمال کرتے ہوئے مندرجہ ذیل سالموں کی اشکال پر بحث کیجیے:

$BeCl_2$، $BCl_3$، $SiCl_4$، $AsF_5$، $H_2S$، $PH_2$

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۔

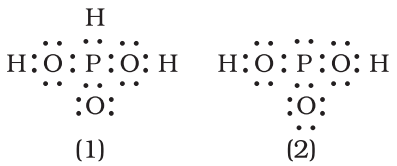
4.9 بانڈ آرڈر کی اصطلاح میں آپ بندشی لمبائی کو کیسے ظاہر کریں گے۔

4.10 بندشی لمبائی کی تعریف بیان کیجیے۔

4.11 $CO_3^{2-}$ آین کے حوالے سے گمک کے اہم پہلوؤں کی وضاحت کیجیے۔

© NCERT Not to be Republished

4.12 $H_3PO_3$ کی مندرجہ ذیل اشکال 1 اور 2 سے ظاہر کیا جا سکتا 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۔





(1) (2)

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

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

(a) K اور S (b) Ca اور O (c) A1 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۔

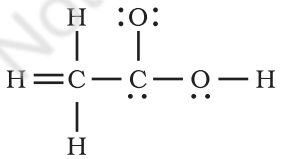
4.16 ڈائپول مومنٹ کی اہمیت/استعمال لکھیے۔

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 بند کو ان کے بڑھتے ہوئے آینی کردار کی ترتیب میں لکھیے LiF، $K_2O$، $N_2$، $SO_2$ اور $ClF_3$

4.20 $CH_3COOH$ کی نیچے دی گئی ڈھانچہ ساخت صحیح ہے، لیکن کچھ بند غلط جگہوں پر دکھائے گئے ہیں ایسیٹک ایسڈ کے لیے صحیح لیوئس 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 ہائڈروجن 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 اربٹل کی مخلوطیت سے آپ کیا سمجھتے ہیں؟ $sp$، $sp^2$ اور $sp^3$ مخلوط اربٹل کی شکل بیان کیجیے۔

4.25 مندرجہ ذیل تعامل میں A1 ایٹم کی مخلوطیت میں تبدیلی (اگر کوئی ہے تو) بتائیے۔

$$AlCl_3 + Cl^- \rightarrow AlCl_4^-$$

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

$$BF_3 + NH_3 \rightarrow F_3B.NH_3$$

4.27 تصویر کی مدد $C_2H_2$ اور $C_2H_4$ سالموں میں دوہرے اور تہرے بند بنتے ہوئے دکھائیے۔

© NCERT Not to be Republished

4.28 مندرجہ ذیل سالموں میں کل سگما اور پائی بند کی تعداد بتائیے۔

$C_2H_2$ (a) $C_2H_4$ (b)

4.29 X- محور کو بین مرکزی محور سمجھتے ہوئے بتائیے کہ مندرجہ ذیل میں سے کون سگما بند نہیں بنائے گا اور کیوں؟

$1s$ اور $1s$ (a) $1s$ اور $2p$ (b) $2p_y$ اور $2p_y$ (c) $1s$ اور $2s$ (d)

4.30 مندرجہ ذیل سالموں میں کاربن ایٹم کے ذریعہ کون سے مخلوط اربٹل استعمال کیے گئے ہیں؟

$CH_3 - CH_3$ (a) $CH_3 - CH = CH_2$ (b) $CH_3 - CH_2 - OH$ (c) $CH_3 - CHO$ (d)

$CH_3COOH$ (e)

4.31 بونڈ پیئر الیکٹران اور لون پیئر الیکٹران سے آپ کیا سمجھتے ہیں؟ ہر ایک کی ایک ایک مثال دے کر سمجھائیے۔

4.32 سگما اور پائی بانڈ میں فرق بتائیے۔

4.33 ویلنس بانڈ تھیوری کی بنیاد پر $H_3$ سالمے کی بننے کی وضاحت کیجیے۔

4.34 مالیکیولر اربٹل بنانے کے لیے ایٹمی اربٹل کے خطّی اتحاد کے لیے لازمی حالات لکھیے۔

4.35 مالیکیولر آربٹل 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۔

$O_2$ ، $O_2^+$ ، $O_2^-$ (سُپر آکسائڈ)، $O_2^{2-}$ (پرآکسائڈ)

4.37 اربٹل 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 ہائڈروجن بانڈ کی تعریف بیان کیجیے۔ یہ ون ڈروالز قوتوں کے مقابلے زیادہ قوی ہوتا ہے یا کمزور؟

4.40 اصطلاح بانڈ آرڈر سے کیا مراد ہے؟ $N_2$ ، $O_2$ ، $O_2^+$ اور $O_2^-$ کا بانڈ آرڈر معلوم کیجیے۔

© NCERT not to be republished