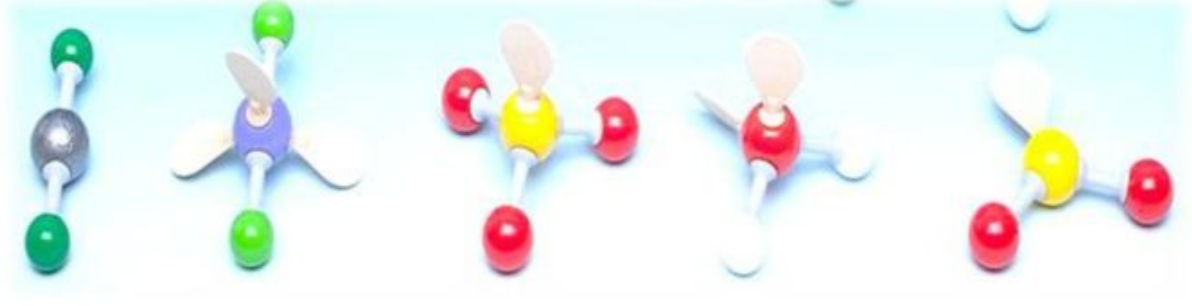




2. கட்டமைப்பும் பிணைப்பும்

உள்ளடக்கம்

2.1 பங்கீட்டுப் பிணைப்புகள்

- 2.1.1 லூயிசின் புள்ளி வடிவங்கள் மற்றும் லூயிசின் புள்ளிக்கோட்டுக் கட்டமைப்புகள்

2.2 ஈதற் பங்கீட்டு வலுப் பிணைப்புகள்

2.3 வலுவளவு ஒட்டு இலத்திரன் சோடித் தள்ளுகைக் கொள்கை (VSEPR - கொள்கை)

- நேர்கோட்டு - இலத்திரன் சோடிக் கேத்திர கணித ஒழுங்கு
- தள முக்கோணம் - இலத்திரன் சோடி கேத்திர கணித ஒழுங்கு
- நான்முகி - இலத்திரன் சோடி கேத்திர கணித ஒழுங்கு
- முக்கோண இருபக்க கூம்பகம் - இலத்திரன் சோடி கேத்திர கணித ஒழுங்கு
- எண்முகி - இலத்திரன் சோடி கேத்திர கணித ஒழுங்கு

2.3.1 அணு ஒபிற்றல்களின் கலப்பாக்கம்

2.3.2 இரட்டை மற்றும் மும்மைப் பிணைப்பு உருவாதல்.

2.3.3 பரிவுக் கட்டமைப்புகள்

- பரிவின் பண்புகள்
- முறைமையான ஏற்றம்
- பரிவுக் கட்டமைப்புகளில் சார்பு உறுதியைத் துணிவதற்கான நியதிகள்

- 2.3.4 மூலக்கூறுகளின் முனைவுத் தன்மையில் மின்னெதிர் தன்மையினதும் கேத்திர கணித ஒழுங்கமைப்பினதும் தாக்கம்

2.3.5 இருமுனைவுத் திருப்புத்திறன்

- 2.3.6 மின்னெதிர் தன்மையின் பருமனில் தாக்கத்தை ஏற்படுத்தும் காரணிகள்

2.4 அயன் பிணைப்பு / அயன் இடைத்தாக்கம்

2.5 உலோகப் பிணைப்புகள்

2.6 துணை / வழி / இரண்டாம் நிலை இடைத் தாக்கங்கள்/ கவர்ச்சிகள்

- அயன் - இருமுனைவு இடைத்தாக்கங்கள்
- இருமுனைவு - இருமுனைவு இடைத்தாக்கங்கள் ஐதரசன் பிணைப்பு
- அயன் - தூண்டப்பட்ட இருமுனைவு இடைத்தாக்கம்
- இருமுனைவு - தூண்டப்பட்ட இருமுனைவு இடைத் தாக்கங்கள்
- லண்டன் இடைத்தாக்கங்கள் (விசைகள்) / கலைவு இடைவிசைகள் (கணநிலை தூண்டப்பட்ட - சோண்டப்பட்ட முனைவு)

அறிமுகம்

நிலையற்ற / உறுதியற்ற இலத்திரன் நிலையமைப்பை உடைய மூலகங்கள் வலுவளவு ஒட்டைப் பூர்த்தி செய்வதன் மூலம் உறுதித் தன்மையைப் பெறுவதற்காக இரசாயனப் பிணைப்புகளை உருவாக்குகின்றன.

பின்வரும் வரைபடம் (வரிவடிவம்) எவ்வாறு வலுவளவு இலத்திரன்கள் வெவ்வேறு வகையான இரசாயனப் பிணைப்புகளை உருவாக்கும்பொழுது பங்கு கொள்கின்றன எனப் பல ஏற்றுக் கொள்ளப்பட்ட மாதிரியுருக்களின் ஊடாகச் சுருக்கமாகத் தருகின்றது.

**உரு 2.1 இரசாயனப் பிணைப்பு வகைகள்****2.1 பங்கிட்டுப் பிணைப்புகள்**

பங்கிட்டுப்பிணைப்புகள் ஒரு சோடி இலத்திரன்கள் ஒரே மூலகத்தின் இரு அணுக்களால் அல்லது வேறுபட்ட மூலகங்களின் இரு அணுக்களால் பங்கிடப்படும்பொழுது உருவாகின்றது. ஒவ்வொரு அணுவும் ஒவ்வொரு இலத்திரனை வழங்குவதன் மூலம் ஒரு சோடி இலத்திரன் உருவாக்கப்படுகின்றது. இதன் விளைவாக இரு அணுக்களினதும் வலுவளவு ஒட்டு இலத்திரன்களினது மொத்த எண்ணிக்கையைக் கருதும்போது உறுதியான இலத்திரன் அமைப்பைப் பெறுகின்றன.

கஸ்வெல்லும் லூயியும் (Caswell and Lewis) வலுவளவு ஒட்டின் உச்சப் பெறுமானமாக எட்டு (8) இலத்திரன்களால் நிரப்பப்படும்போது உறுதியான இலத்திரன் நிலையமைப்பைப் பெறுகின்றன எனக் கருதினர். எனவே அது அட்டம விதி (Octet rule) எனப்படும்.

இலத்திரன் நிலையமைப்புப் பற்றிய அறிவின்படி இரண்டாம் ஆவர்த்தன மூலகங்களின் $2s, 2p$ ஒபிற்றல்களின் உச்ச வலுவளவு இலத்திரன்களின் எண்ணிக்கை 8. ஆகவே, இரண்டாம் ஆவர்த்தன ($n=2$) மூலகங்கள் இரசாயனப் பிணைப்புகளை உருவாக்கும்பொழுது அட்டம நிலையைப் பூர்த்தி செய்து உயர் உறுதித் தன்மையை அடைகின்றன. C, N, O, F ஆகிய மூலகங்கள் இரசாயனப் பிணைப்புகளை உருவாக்கி அட்டம அமைப்பைப் பூர்த்தியாக்குவது கூடுதலாகப் பொருத்தமானதாகும்.

மூன்றாம் ஆவர்த்தனமும் ($n=3$) அதற்குக் கீழே உள்ள ஆவர்த்தனங்களின் வலுவளவு ஓடு s, p உபசக்தி மட்டத்துடன் d உபசக்தி மட்டத்தையும் கொண்டுள்ளன. ஆகவே இரசாயனப் பிணைப்புகள் உருவாகும் பொழுது எட்டுக்கு மேற்பட்ட இலத்திரன்களை வலுவளவு ஓட்டில் சில சந்தர்ப்பங்களில் இம்மூலகங்கள் கொண்டிருக்கலாம். உதாரணமாக SO_2, SO_3 ஆகியவற்றில் கந்தகத்தின் வலுவளவு ஓட்டில் இருக்கும் இலத்திரன்கள் எட்டை விட அதிகம். கந்தகத்தின் வலுவளவு ஓட்டில் d ஒபிற்றல்கள் இருப்பதால் 18 இலத்திரன்களைக் கந்தக அணு அனுமதிக்கின்றது. (permits) வலுவளவு ஓட்டில் உள்ள d ஒபிற்றல்களும் பிணைப்புகளில் பங்கு கொள்வதினால் கந்தக அணுக்களில் உள்ள வலுவளவு இலத்திரன்கள் எட்டிலும் பார்க்க அதிகரிக்கலாம். எவ்வாறாயினும் d ஒபிற்றல்கள் பிணைப்பில் பங்குபற்றுவது கட்டாயமான தொன்றல்ல. உதாரணமாக H_2S மூலக்கூறில் கந்தக அணுவில் d ஒபிற்றல்கள் பிணைப்பில் ஈடுபடாது அட்டக அமைப்பை அடைகின்றது.

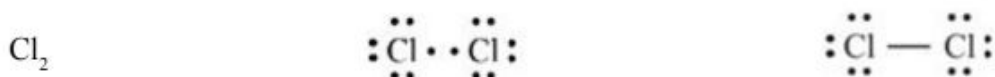
இருப்பினும், இரசாயனப் பிணைப்புகளை உருவாக்கும்போது அட்டக நிலையை எல்லா மூலகங்களும் கட்டாயமாக அடையாத சந்தர்ப்பங்கள் உள்ளன. சில இலத்திரன் பற்றாக்குறையுடைய சேர்வைகள் உதாரணமாக $BeCl_2, BH_3, AlCl_3$ (இலத்திரன் பற்றாக்குறைச் சேர்வைகள்) போன்றவை Be, B, Al ஆகிய மூலகங்களில் பூர்த்தி செய்யப்படாத வலுவளவு ஓட்டுடன் சேர்வைகள் உருவாக்கப்படுகின்றது. ஐதரசன் அணுவில் $1s$ ஒபிற்றல் மட்டும் உண்டு. வலுவளவு ஓடு இரு இலத்திரன்களைக் கொண்டிருக்கும்போது உறுதி நிலை பெறப்படுகின்றது. மேலே விபரிக்கப்பட்ட எல்லா உதாரணங்களிலும் இரசாயனப் பிணைப்புகள் உருவான பின்பு, வலுவளவு ஓட்டில் உள்ள இலத்திரன்களின் எண்ணிக்கை இரட்டை எண்ணாக உள்ளது. ஆனால் இது எப்பொழுதும் உண்மையானதன்று. NO, NO_2 போன்ற சேர்வைகள் அட்டக அமைப்புப் பூர்த்தி செய்யப்படாது ஒற்றை எண்ணிக்கையான இலத்திரன்களைக் கொண்டுள்ளன.

மூலக்கூறுகளிலும் அயன்களிலும் இலத்திரன் பரம்பலை விளக்குவதற்காக ஒரு மாதிரியுரு Gilber Lewis இனால் அறிமுகப்படுத்தப்பட்டது. அது லூயிசின் புள்ளிக் கட்டமைப்பு (Lewi's dot structure) என அறியப்பட்டது.

2.1.1 லூயிசின் புள்ளி வடிவங்கள் மற்றும் புள்ளிக் கோட்டுக் கட்டமைப்புகள்

லூயிசின் புள்ளி வடிவம் தரப்பட்ட ஒரு இரசாயன சூத்திரத்திலுள்ள பிணைப்பு வகையைப் படங்களால் விளக்குவதற்கும் ஒவ்வொரு அணுவிலும் வலுவளவு ஓட்டில் இலத்திரன் பங்கிடுதலைக் காட்டுவதற்கும் பயன்படும். லூயிசின் கட்டமைப்பில் பிணைப்பில் ஈடுபடும் இலத்திரன் சோடிகள் இரு மூலக அணுக்களிடையில் வரையப்படும் ஒரு குறுகிய கோட்டினால் காட்டப்படும்.

இரசாயனச்சூத்திரம் → லூயிசின் புள்ளி வடிவம் → லூயிசின் கட்டமைப்பு



லூயிசின் புள்ளி வடிவங்களை வரையும்பொழுது பின்வரும் காரணிகளையுடைய பட்டியலைக் கருத்திற் கொள்ளவேண்டும்.

- மூலகங்கள் H உம் F உம் பொதுவாக மைய அணுவாகக் கருதப்படுவதில்லை ஏனெனில் இவ்வணுக்கள் ஒற்றைப் பிணைப்பை மாத்திரம் உருவாக்குவதாலாகும். பல பிணைப்புகளை உருவாக்கக்கூடிய அணுக்கள் மைய அணுக்களாக இடப்படும்.
- தாழ் மின்னெதிர்த்தன்மை உடைய மூலகங்கள் பொதுவாக மைய அணுக்களாக இருக்கும். எனினும் இது எப்பொழுதும் உண்மையானதன்று. H_2O மூலக்கூறினைக் கருதும்பொழுது உயர்ந்த மின்னெதிர்த்தன்மை உடைய ஒட்சிசன் அணு மைய அணுவாக இடப்பட்டுள்ளது.

ஒரு மைய அணுவையுடைய மூலக்கூறுகளுக்குப் பின்வரும் உண்மைகளைக் கருதுவது முக்கியமானது.

1. மைய அணுவையும் அதைச் சூழ உள்ள அணுக்களையும் இனம் காணவேண்டும்.
2. தரப்பட்ட இரசாயனச் சூத்திரத்திலுள்ள ஒவ்வொரு அணுவிலும் உள்ள வலுவளவு

இலத்திரன்களைக் கருத்திற் கொண்டு அச்சூத்திரத்திலுள்ள மொத்த இலத்திரன்களின் எண்ணிக்கையைக் கணிக்க.

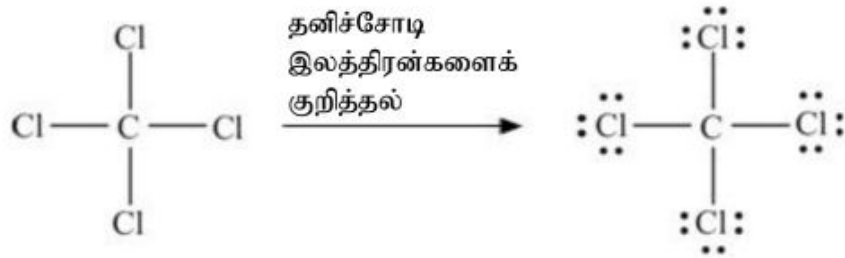
உதாரணம்:- நீரில் ஒட்சிசன் அணு வலுவளவு ஒட்டில் இருந்து 6 இலத்திரன்களையும் ஒவ்வொரு ஐதரசன் அணுவும் ஒவ்வொரு இலத்திரனையும் (இரு ஐதரசன் அணுக்களிலிருந்து 2 இலத்திரன்கள்) வழங்குவதால் வலுவளவு ஒட்டில் மொத்தமாக $8(6e + 2e = 8e)$ வலுவளவு இலத்திரன்கள் உண்டு. அது ஓர் எதிரேற்றமுடைய அயனாக இருப்பின் எதிரேற்றங்களும் எண்ணப்படல் வேண்டும்.

உதாரணம்:- OH^- இல் ஒட்சிசன் அணு 6 இலத்திரன்களையும், ஐதரசன் அணு ஒரு இலத்திரனையும் வழங்குவதுடன் எதிர் ஏற்றத்தினால் வழங்கப்படும் ஒரு இலத்திரனுடன் மொத்தமாக மைய அணுவில் 8 இலத்திரன்கள் வலுவளவு ஒட்டில் உண்டு. ஓர் அயன் நேர்ஏற்றமுடையதாக இருப்பின், அவ்ஏற்றத்திற்குச் சமமான எண் மொத்த வலுவளவு இலத்திரன்களின் எண்ணிக்கையிலிருந்து கழிக்கப்படல் வேண்டும்.

உதாரணம்:- NH_4^+ இல் N அணு 5 வலுவளவு இலத்திரன்களை வழங்குகின்றது. அத்துடன் 4 ஐதரசன் அணுக்கள் 4 இலத்திரன்களை வழங்குகின்றன. எனினும் அது ஒரு ஏற்றமுள்ள கற்றயனாக இருப்பதால் ஒரு இலத்திரனை (நேர்ஏற்றங்களிற்கு சமமான எண்ணிக்கை) கழிப்பதனால் நைதரசன் அணுவின் வலுவளவு ஒட்டில் $(5e + 4e - 1e = 8e)$ 8 இலத்திரன்கள் உண்டு.

3. ஒரு பிணைப்பானது ஒரு சோடி புள்ளிகளினால் மைய அணுவிற்கும் அதைச்சூழ்ந்துள்ள அணுவுக்கும் இடையில் குறிக்கப்படும். மைய அணுவுடன் அதைச்சூழ உள்ள எல்லா அணுவும் ஆகக் குறைந்தது ஒரு பிணைப்பினால் இணைக்கப்படும்.

4. பிணைப்பில் ஈடுபடும் சோடி இலத்திரன்களை முதலில் குறித்தல் (இரு அணுக்களுக்குமிடையில் குறுகிய கோடொன்றினால் குறிக்கப்படும்) சோடி புள்ளிகளினால் ஒவ்வொரு சோடி இலத்திரன்களையும் மின்னெதிர்த்தன்மை கூடிய மூலகத்திற்கு பகிர்ந்து இடப்படும். மைய அணு மின்னெதிர்த்தன்மை கூடிய மூலகமாக இல்லாவிடின் தனிச்சோடி இலத்திரன்கள் குழு உள்ள மூலகங்களில் குறிக்கப்படும். CCl_4 இதற்கு உதாரணமாக அமையும்.



உரு 2.2 CCl_4 லுயி புள்ளிக் கோட்டுக் கட்டமைப்பு

NH_3 இல் சூழ்ந்துள்ள அணுக்கள் ஐதரசனாக இருப்பதால் மிகுதியாக உள்ள சோடி இலத்திரன்கள் நைதரசன் அணுவில் குறிக்கப்படும்.

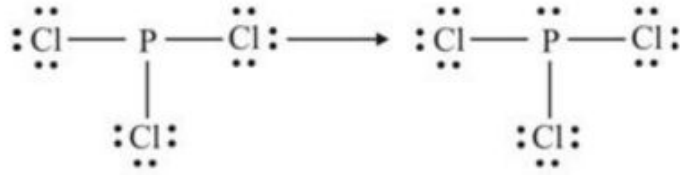


உரு 2.3 NH_3 இன் லுயியின் புள்ளிக் கோட்டுக் கட்டமைப்பு

லுயியின் கட்டமைப்பில் இரண்டு அணுக்களுக்கு இடையில் பிணைப்பு இலத்திரன்கள் கீழ் உள்ளவாறு காட்டப்படும்.

ஒற்றைப் பிணைப்பு	$\longrightarrow \text{M} \cdot \cdot \text{L}$ அல்லது $\text{M} : \text{L}$
இரட்டைப் பிணைப்பு	$\longrightarrow \text{M} :: \text{L}$
மும்மைப் பிணைப்பு	$\longrightarrow \text{M} ::: \text{L}$
ஈதல் பிணைப்பு L இல் இருந்து M இற்கு	$\longrightarrow \text{L} : \text{M}$

5. குழு உள்ள அணுக்களில் இலத்திரன் சோடிகளைப் பகிர்ந்தபின் மிகுதியாக உள்ள சோடி இலத்திரன்கள் மைய அணுவில் குறிக்கப்படும்.



உரு 2.4 PCl_3 இன் லூயிசின் புள்ளிக் கோட்டுக் கட்டமைப்பு

6. முறைமையான ஏற்றத்தைக் கொடுப்பதற்கும் (formal charge) அட்டகநிலை பூர்த்தி செய்யப் பட்டுள்ளதா எனச் சரிபார்ப்பதற்கும் எல்லா இலத்திரன்சோடிகளும் பகிர்ந்தளிக்கப்பட்ட பின் ஒவ்வொரு அணுவிலும் உள்ள இலத்திரன்களும் பிணைப்பில் ஈடுபடாத நிலையில் உள்ள இலத்திரன் எண்ணிக்கையுடன் ஒப்பிடப்படல்வேண்டும். ஒவ்வொரு பிணைப்பிலும் ஒரு இலத்திரன் ஒவ்வொரு அணுவிற்கும் எண்ணப்படும். அத்துடன் தனிச்சோடி இலத்திரன் இருப்பின் இரு இலத்திரன்களும் அவ்வணுவிற்கு எண்ணப்படும். அட்டமநிலை பூர்த்திக்கு முன்னுரிமை வழங்கப்படும்.

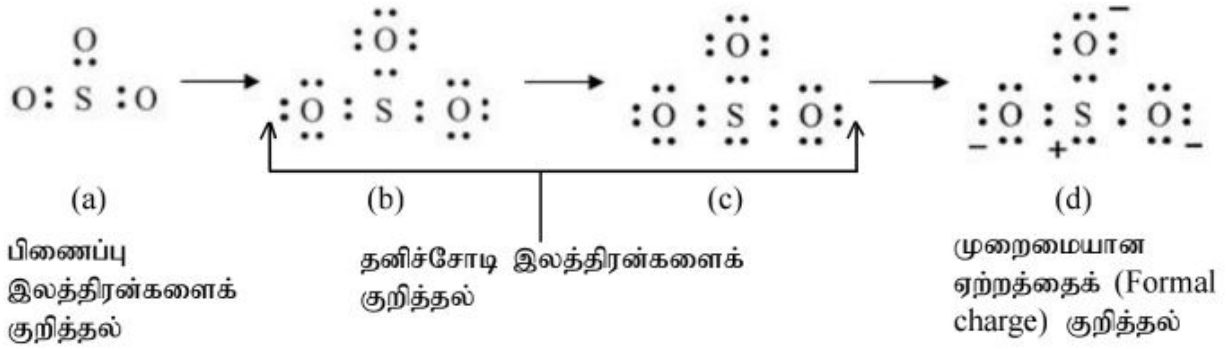
NH_2^- அயனைக் கருதுக.



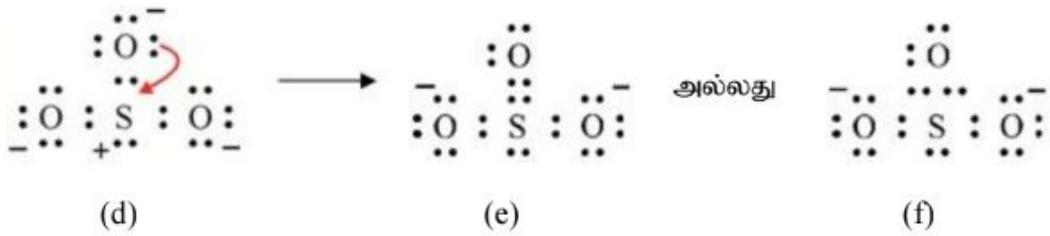
இங்கு நைதரசனைச் குழு உள்ள இலத்திரன்களின் எண்ணிக்கை 8, ஆயினும் லூயிசின் புள்ளி வடிவத்தில் நைதரசன் அணு 5 இலத்திரன்களை மட்டும் வழங்கியிருப்பினும் நைதரசன் 6 இலத்திரன்களை வழங்கியிருப்பதுபோன்று தோன்றுகிறது. ஆகவே இதனைச் சரி செய்வதற்கு (rectify) (-1) ஏற்றம் நைதரசன் அணுவில் முறைமையான ஏற்றமாக (formal charge) வழங்கப் படுகின்றது.

அணுக்களில் உள்ள ஏற்றத்தைக் குறைப்பதற்காகவும் அட்டக நிலையைப் பூர்த்தி செய்வதற்காகவும் இலத்திரன் பகிர்வை மீள ஒழுங்குபடுத்துவதற்குத் தனிச்சோடி இலத்திரன்கள் பிணைப்பு சோடி இலத்திரன்களாக மாற்றப்படும்.

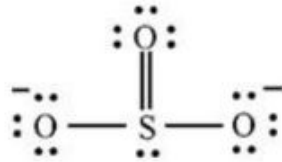
SO_3^{2-} ஐ உதாரணமாக எடுத்தால் கந்தக அணு 6 இலத்திரன்களை வழங்கும், ஒவ்வொரு ஓட்சிசன் அணுவும் 6 இலத்திரன்களை வழங்கும். எனவே மூன்று ஓட்சிசன் அணுக்களிலிருந்தும் 18 இலத்திரன்கள் அத்துடன் மேலும் இரண்டு இலத்திரன்கள் (-2) ஏற்றத்திலிருந்து மொத்தமாக 26 இலத்திரன்கள் $(6e+3(6e)+2e) = 26e$ லூயிசின் கட்டமைப்பிற்கு உள்ளது.



அட்டக அமைப்பை பூர்த்தி செய்யும் பொருட்டும் முறைமையான ஏற்றத்தைக் குறைப்பதற்காகவும் இலத்திரன்கள் மீள பகிர்ந்தளிக்கப்படுகின்றன.



இறுதியாக SO_3^{2-} இன் லூயிசின் கட்டமைப்புக் கீழே தரப்பட்டுள்ளது.



உரு 2.5 SO_3^{2-} இன் லூயிசின் புள்ளிக் கோட்டுக் கட்டமைப்பு

இங்கு எல்லா ஒட்சிசன் அணுக்களும் அட்டக அமைப்பைப் பூர்த்தி செய்துள்ளன. மொத்தமாக 10 இலத்திரன்கள் கந்தக அணுவின் வலுவளவு ஒட்டில் உள்ளது. இது அட்டக நிலையை மீறி உள்ளது. எப்படியாயினும் கந்தக அணுவின் வலுவளவு ஒட்டில் வெற்று d-ஒபிற்றல் இருப்பதால் இந்நிலை அனுமதிக்கப்படுகின்றது.

ஒரு தரப்பட்ட இரசாயன சூத்திரத்திற்குப் பல / ஒன்றுக்கு மேற்பட்ட மையஅணுக்கள் இருக்கும் பொழுது அதன் அணுக்களின் வரி வடிவம் (skeleton of atoms) தெரிந்திருத்தல் முக்கியம். பின்வரும் அட்டவணை 2.1 இல் லூயிசின் புள்ளி வடிவமும் புள்ளிக் கட்டமைப்பும் சில மூலக்கூறுகளுக்கும் அயன்களுக்கும் தரப்பட்டுள்ளது.

அட்டவணை 2.1 சில மூலக்கூறுகளினதும் அயன்களினதும் லூயிசின் புள்ளி வடிவமும் லூயிசின் கட்டமைப்பும்

சூத்திரம்	வலுவளவு ஒட்டில் உள்ள இலத்திரன்களின் எண்ணிக்கை	லூயிசின் புள்ளி வடிவம்	லூயிசின் கட்டமைப்பு
CO_2	16	$\text{:}\ddot{\text{O}}\text{:}::\text{C}::\text{:}\ddot{\text{O}}\text{:}$	$\ddot{\text{O}}=\text{C}=\ddot{\text{O}}$
POCl_3	32	$\begin{array}{c} \text{:}\ddot{\text{O}}\text{:} \\ \text{:}\ddot{\text{Cl}}\text{:} \text{ : } \text{P} \text{ : } \text{:}\ddot{\text{Cl}}\text{:} \\ \text{:}\ddot{\text{Cl}}\text{:} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{:}\ddot{\text{O}}\text{:} \\ \text{:}\ddot{\text{Cl}}\text{---P---}\text{:}\ddot{\text{Cl}}\text{:} \\ \text{:}\ddot{\text{Cl}}\text{:} \end{array}$
HCN	10	$\text{H}:\text{C}::\text{N}:$	$\text{H---C}\equiv\text{N:}$
NO_2^-	18	$\text{:}\ddot{\text{O}}\text{:}^- \text{ : } \ddot{\text{N}} \text{ : } \ddot{\text{O}}\text{:}$	$\text{:}\ddot{\text{O}}\text{:}^- \text{---}\ddot{\text{N}}=\ddot{\text{O}}\text{:}$
NO_3^-	24	$\begin{array}{c} \text{:}\ddot{\text{O}}\text{:}^- \\ \text{:}\ddot{\text{O}}\text{:}^- \text{ : } \text{N}^+ \text{ : } \ddot{\text{O}}\text{:} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{:}\ddot{\text{O}}\text{:}^- \\ \text{:}\ddot{\text{O}}\text{:}^- \text{---}\text{N}^+=\ddot{\text{O}}\text{:} \end{array}$
NO_2^+	16	$\ddot{\text{O}}::\text{N}^+::\ddot{\text{O}}$	$\ddot{\text{O}}=\text{N}^+=\ddot{\text{O}}$

உதாரணம் 2.1:

2.1 இன் எண்ணக்கருவைச் சரிபார்த்தல்.

CO விற்கு லூயிசின் புள்ளி வடிவங்களையும் லூயிசின் கட்டமைப்பையும் வரைக.

விடை:

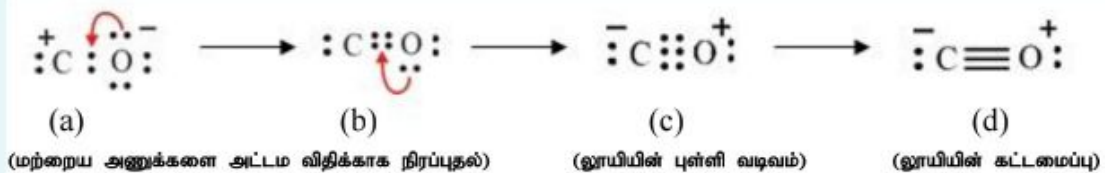
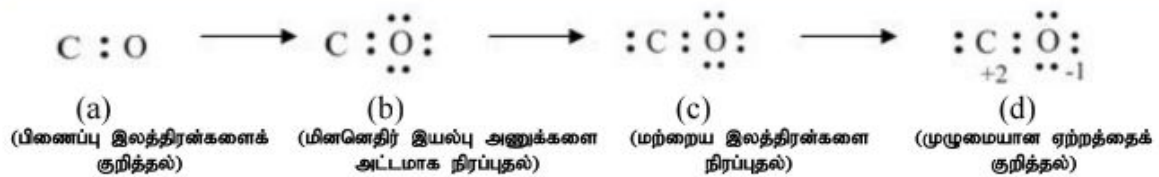
C அணுவின் வலுவளவு இலத்திரன்கள் = 4e

O அணுவின் வலுவளவு இலத்திரன்கள் = 6e

மொத்த வலுவளவு இலத்திரன்கள் = 4e + 6e = 10e

பிணைப்பு இலத்திரன் சோடிகளைக் குறித்தபின் மிகுதியாக 8 இலத்திரன்கள் உண்டு. மின்னெதிர்த்தன்மை கூடிய ஒட்சிசன் அணுவின் மீது இலத்திரன்களைப் பகிர்ந்து அட்டக நிலையைப் பூர்த்தி செய்தபின் மேலும் ஒரு சோடியுள்ளது. இத்தனிச்சோடி இலத்திரன் காபன் அணுவின்மீது குறிக்கப்பட்டுள்ளது.

ஆரம்ப இலத்திரன் பகிர்வு கீழே (A) இல் காட்டப்பட்டுள்ளது. எவ்வாறாயினும் காபன் அணுவிற்கு அட்டகநிலை பூர்த்தியாக்கப்படவில்லை. ஆகவே இலத்திரன்களின் மீள்பகிர்வு வளைந்த அம்புக்குறிகளால் (A) யிலும் (B) யிலும், காபன் அணுவின் அட்டக நிலையைப் பூர்த்தி செய்வதற்கும் முறைமையான ஏற்றம் (formal charge)ஐ குறைப்பதற்குமான முயற்சியாகக் காட்டப்பட்டுள்ளது. இம்முயற்சியின் விளைவாகக் கட்டமைப்பு (C) உருவாகின்றது. ஆகவே கட்டமைப்பு (C) லூயிசின் புள்ளி வடிவமாகவும், (D) CO இன் லூயிசின் கட்டமைப்பாகவும் கருதப்படுகின்றது. மின்னெதிர்த்தன்மை கூடிய ஒட்சிசன் அணுவின்மீது நேர்ஏற்றம் குறிக்கப்பட்டுள்ளதைக் கவனத்திற் கொள்க. நேர்ஏற்றம் மின்னெதிர்த்தன்மை கூடிய ஒட்சிசன் அணுவில் இருப்பது ஏற்றதாக இல்லாவிடினும் அட்டக நிலையைப் பூர்த்தி செய்வதற்குச் சாத்தியமான நிலையில் அட்டகநிலைக்கு முதலுரிமை கொடுக்கப்படுவதால், இச்சந்தர்ப்பத்தில் இவ்வமைப்பு ஏற்றுக் கொள்ளப்படுகின்றது. இது அடிப்படை அட்டம விதி.

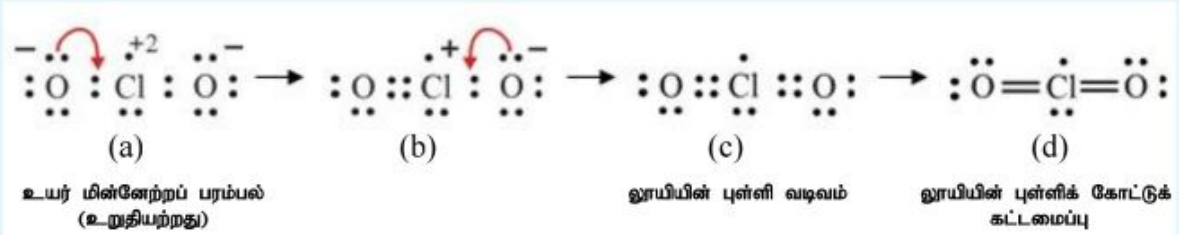


உதாரணம் 2.2:

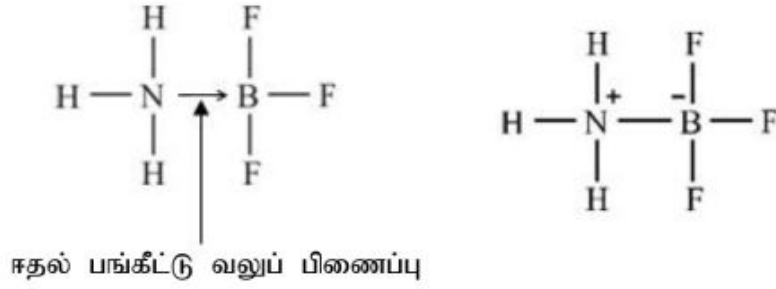
ClO_2 விற்கு லூயிசின் புள்ளி வடிவங்களையும் லூயிசின் கட்டமைப்பையும் வரைக.

விடை:

தனி இலத்திரனைக் கொண்ட மாதிரிக்கு இது ஓர் உதாரணம் ClO_2 க்கு மொத்த வலுவளவு இலத்திரன் எண்ணிக்கை $(7e + 2(6e) = 19e)$ பின்வருவன ஆரம்ப இலத்திரன் பகிர்வையும் இறுதியான லூயிசின் புள்ளி வடிவத்தையும் லூயிசின் கட்டமைப்பையும் ClO_2 ற்கு தருகின்றது.

**2.2 ஈதற் பங்கீட்டுப் பிணைப்புகள்**

ஓர் அணுவின் வெற்று ஒபிற்றல் ஒன்று தனிச்சோடி இலத்திரனைக் கொண்ட அணுவின் ஒபிற்றலுடன் இடைத்தாக்கமடைவதால் ஈதற் பிணைப்பு மூலக்கூறுகளில் / அயன்களில் உருவாகின்றன. சில நிலைகளில் சந்தர்ப்பங்களில் சுயாதீன மூலகம் நான்குக்கு குறைந்த வலுவளவு இலத்திரன்களைக் (Be, B) கொண்டிருக்கும் பொழுது அவ் அணுக்களை நான்கிற்குக் குறைந்த பங்கீட்டுப்பிணைப்புகளையே ஏற்படுத்தமுடியும். இதன் விளைவாக முற்றுப்பெறாத அட்டக நிலை உருவாவதால் உறுதித்தன்மை குறைந்த நிலை உருவாகும். இதனால் இலத்திரன் பற்றாக்குறைவுடைய மைய அணு தனிச்சோடி இலத்திரனை வழங்கக்கூடிய மூலகங்களுடன் தாக்கமடைந்து அட்டக அமைப்பை அடைய எத்தனிக்கும். BH_3 , CO உடனான தாக்கத்தின்போது போரன்காபனைல் (Boron carbonyl) உருவாகின்றது. அத்துடன் CN^- உடனான தாக்கம் சயனோபோரனை உருவாக்குகின்றது. இவை ஈதற்பிணைப்பையுடைய சேர்வைகளுக்கு உதாரணமாக அமையும். மேலும் NH_3 , BF_3 உடனான தாக்கத்தின்போது B - N க்குமிடையில் ஈதற்பங்கீட்டுப் பிணைப்பு உருவாகின்றமையும் உதாரணமாகும். B யின் வெற்று ஒபிற்றல் நைதரசன் அணுவின் தனிச்சோடி இலத்திரனைக் கொண்ட ஒபிற்றலின் மேற் படிவதால் ஈதற்பங்கீட்டுப் பிணைப்பு உருவாகின்றது. எவ்வாறாயினும் அம்மாதிரியில் எது மைய அணுவென்று கூறமுடியாது. நைதரசன் அணு தனது தனிச்சோடி இலத்திரனைப் பிணைப்பிற்காக B இற்கு வழங்குகின்றது. இப்பிணைப்பை ஓர் அம்புக்குறியால் குறிக்கலாம். அம்புக்குறியின் தலை இலத்திரன் பற்றாக்குறையுடைய அணுவை நோக்கியுள்ளது. இதனைக் கீழே காட்டியவாறு முறைமையான ஏற்றத்தைப் (Formal charge) பயன்படுத்தி எடுத்துக் கூறலாம்.

உரு 2.6 ஈதற்பங்கீட்டுப்பிணைப்பு ($\text{H}_3\text{N} - \text{BF}_3$)

உலோக அணு / உலோக அயன்கள் H_2O , NH_3 , CO CN^- அயன்களுடன் தாக்கமடைந்து சிக்கல்களை உருவாக்கும்போது ஈதற்பங்கீட்டுப்பிணைப்பு உருவாகின்றது. கீழே Cu^{2+} அயன் நான்கு NH_3 மூலக்கூறுகளுடன் தாக்கமடைந்து ஈதற் பங்கீட்டுப் பிணைப்புக்களை உருவாக்கிச் சிக்கல் அயன் உருவாவதைக் காட்டுகின்றது.

உரு 2.7 Cu^{2+} - அமோனியா சிக்கலில் ஈதற்பங்கீட்டுப்பிணைப்பு $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$ சிக்கல்

2.3 வலுவளவு ஓட்டு இலத்திரன் சோடித் தள்ளுகைக் கொள்கை (VSEPR - கொள்கை)

Ronald Gillespie யும் Ronald Sydney Nyholm உம் (suggested) ஒரு மூலக்கூறு அல்லது அயனின் மையஅணுவைச் சூழ்ந்து உள்ள இலத்திரன் சோடிகள் ஒன்றிலிருந்து ஒன்று அதிகூடிய தூரத்தில் ஒழுங்காக்கப்படும் என்று குறிப்பாகச் சொன்னார்கள். Gillespie பிரதான கூட்ட (main group) மூலகங்களை மைய அணுவாகக் கொண்ட மூலக்கூறுகளின் வடிவங்களை விளக்கினார். அதேசமயம் Nyholm தாண்டல் மூலகங்களை மைய அணுவாகக் கொண்ட மூலக்கூறுகளின் வடிவங்கள் பற்றிக் கலந்துரையாடினர். 1963ம் ஆண்டில் Gillespie மூலக்கூறு களினதும் அயன்களினதும் வடிவத்தைக் காணுவதற்கு VSEPR கொள்கையை அறிமுகப் படுத்தினார்.

பிரதானமாக இருவகையான இலத்திரன் சோடிகள் மைய அணுவைச் சூழ்ந்து காணப்படுகின்றன. முதலாவது வகை பங்கீட்டுச்சோடி இலத்திரன்கள் இரு கருக்களுக்கிடையில் கவர்ச்சி விசையினால் பிணைக்கப்பட்டுள்ளது. இரண்டாவது வகை பிணைப்பில் ஈடுபடாத சோடி இலத்திரன்கள் தனிச்சோடி இலத்திரன்கள் என அழைக்கப்படும். தனிச்சோடி இலத்திரன்களை ஒரு கருவின் செல்வாக்கின் கீழ் (influence) இருப்பதனால் இலத்திரன் முகில் பெரிய இடத்தை அடைக்கும். பிணைப்புச்சோடி, தனிச்சோடி இலத்திரன்கள் இருக்கும்பொழுது அவை தள்ளுகை அலகுகளாகத் தொழிற்பட்டு ஒன்றிலிருந்து ஒன்று தள்ளிச் செல்லும். பன்மைப் பிணைப்புகள் (இரட்டை, மும்மைப் பிணைப்புகள்) அணுக்களுக்கிடையில் காணப்படும்பொழுது ஒவ்வொரு பன்மைப் பிணைப்பும் ஒரு தள்ளுகை அலகாகவே கருதப்படும்.

மைய அணுவிற்கும் அதைச்சூழ்ந்துள்ள அணுக்களுக்குமிடையிலான பங்கீட்டுப் பிணைப்புகளின் எண்ணிக்கையைக் கருதும்பொழுது மூன்று வகையான பிணைப்புக்களாகக் கருதப்படும். அவை ஒற்றைப் பிணைப்பு, இரட்டைப்பிணைப்பு, மும்மைப்பிணைப்பு என அழைக்கப்படும். இரட்டைப் பிணைப்பும் மும்மைப்பிணைப்பும் பன்மைப் பிணைப்புகளாகக் கருதப்படும். உதாரணமாக CO_2 மூலக்கூறில் இரட்டைப் பிணைப்புக்கள் மையஅணுவிற்கும் அதைச்சூழ உள்ள ஒட்சிசன் அணுக்களுக்குமிடையில் உள்ளது. HCN மூலக்கூறில் C அணுவிற்கும் N அணுவிற்குமிடையில் மும்மைப்பிணைப்பு கீழே காட்டியவாறு காணப்படுகின்றது. ஒவ்வொரு ஒற்றை, இரட்டை, மும்மைப்பிணைப்பும் ஒரு தள்ளுகை அலகாகவே கருதப்படுகின்றது. அல்லது ஒரு VSEPR அலகாகக் கருதப்படும்.



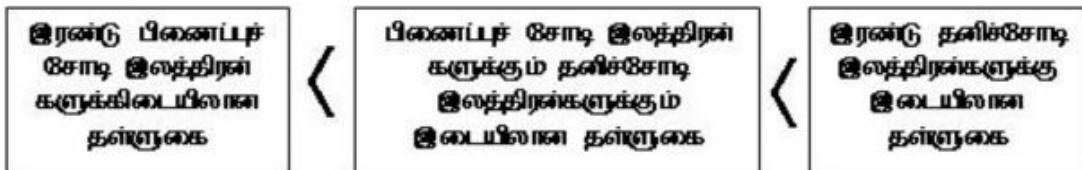
HCN மூலக்கூறில் மும்மைப்பிணைப்பிலுள்ள மூன்று சோடி இலத்திரன்களும் ஒரு தனித் தள்ளுகை அலகாகக் கருதப்படும். இது ஏனெனில் மூன்று சோடி இலத்திரன்களும் C இனதும் N இனதும் கருவிற்கிடையில் ஒன்றிலிருந்து ஒன்று விலகமுடியாமல் நிலைப்படுத்தப்பட்டு இருப்பதால் அவை ஒரு அலகாகக் கருதப்படும்.

மைய அணுவைச் சூழ்ந்து காணப்படும் தள்ளுகை அலகுகளின் எண்ணிக்கையை லூயிசின் கட்டமைப்பைப் பயன்படுத்தி இனம் காணமுடியும். கீழ்காணும் அட்டவணை 2.2 எவ்வாறு மையஅணுவைச் சூழ்ந்துள்ள இலத்திரன் சோடிகளின் எண்ணிக்கையையும் மையஅணுவைச் சூழ்ந்துள்ள VSEPR அலகுகளையும் இனம் காணலாம் என்பதற்கான உதாரணங்களைத் தருகின்றது.

அட்டவணை 2.2 தேர்ந்தெடுக்கப்பட்ட மூலக்கூறுகளின் / அயன்களின் லூயிசின் புள்ளிக் கோடு கட்டமைப்பும், மையஅணுவைச் சூழ உள்ள இலத்திரன் சோடிகளையும், VSEPR அலகுகளையும் தருகின்றது.

லூயிசின் கட்டமைப்பு	மைய அணுவைச் சூழ உள்ள இலத்திரன் சோடிகள்	மைய அணுவைச் சூழ உள்ள தள்ளுகை (VSEPR) அலகுகள்
$\ddot{\text{O}}=\ddot{\text{S}}=\ddot{\text{O}}$	5	3
$\begin{array}{c} \text{:}\ddot{\text{Cl}}\text{:} \\ \text{:}\ddot{\text{Cl}}\text{:} \end{array} \text{S}=\ddot{\text{O}}$	5	4
$\begin{array}{c} \ddot{\text{O}}=\text{S}=\ddot{\text{O}} \\ \parallel \\ \text{:}\ddot{\text{O}}\text{:} \end{array}$	6	3
$\text{H}-\text{C}\equiv\text{N:}$	4	2
$\ddot{\text{O}}=\text{N}^+=\ddot{\text{O}}$	4	2

VSEPR கொள்கைக்கு ஏற்பத் தள்ளுகை அலகுகளுக்கிடையில் அதிகூடிய தூரத்தைப் பேணுவதால் மூலக்கூறுகள் / அயன்கள் உறுதித்தன்மையைப் பெறுகின்றன. ஒரு தனிச்சோடி இலத்திரன்கள் பங்கீட்டுச்சோடி இலத்திரன்களிலும் பார்க்க ஒப்பீட்டளவில் பெரிய இடத்தை அடைக்கின்றன. அத்துடன் தனிச்சோடி இலத்திரன்களுக்கிடையிலான தள்ளுகை (தனிச்சோடி ↔ தனிச்சோடி) இரு பிணைப்புச்சோடி இலத்திரன்களுக்கிடையிலான (பிணைப்புச்சோடி ↔ பிணைப்புச்சோடி) தள்ளுகையிலும் பார்க்க உயர்வானது. இதன் விளைவாகத் தனிச்சோடி - பிணைப்புச்சோடி இலத்திரன் இடைத்தாக்கத் தள்ளுகை விசை இடைப்பட்டதாக அமைகின்றது.



உரு 2.8 பிணைப்புச்சோடி தனிச்சோடி இலத்திரன்களுக்கிடையிலான தள்ளுகையை ஒப்பிடுதல்.

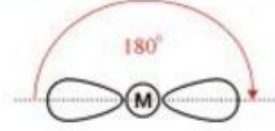
பிணைப்புச்சோடி தனிச்சோடி என்று வேறு பிரிக்காது மையஅணுவைச் சுற்றி உள்ள வெளியில் தள்ளுகை அலகுகள் பகிர்வு அமையும் (பரம்பலடையும்) விதம் இலத்திரன் சோடிக் கேத்திரகணிதம் என அழைக்கப்படும். ஒரு மூலக்கூறு அல்லது அயனின் கேத்திரகணித வடிவத்தைக் கூறும்பொழுது பிணைப்புக் கோணங்களையும் எடுத்துரைத்தல் வேண்டும். பின்வரும் அட்டவணை 2.3 சுருக்கமாக இலத்திரன் சோடிக் கேத்திரகணிதம் எவ்வாறு 3D வெளியில் தள்ளுகை அலகுகளின் பகிர்வில்/ பரம்பலில் தங்கியுள்ளது என்பதைத் தருகின்றது. ஒரு மூலக்கூறு / அயனின் வடிவத்தை தெரிவிக்கும் பொழுது பிணைப்புக் கோணம் கூறத் தேவையில்லை. ஆனால் ஒரு மூலக்கூறு / அயனின் கேத்திரகணிதம் தெரிவிக்கப்படும் பொழுது பிணைப்புக் கோணம் கூறப்படல் வேண்டும். ஆகவே இலத்திரன் சோடிக் கேத்திரகணிதம், வடிவம், மூலக்கூறின் கேத்திரகணிதம் ஆகியவை மூன்று தனியான (independent) வழியலகுகளாகக் கருதப்படுகின்றது. ஒரு மூலக்கூறின் கேத்திர கணிதம் அதன் வடிவத்தையும் கோணத்தையும் காவிச் செல்கின்றது.

அட்டவணை 2.3 தள்ளுக்கை அலகுகளின் கேத்திரகணிதம்.

தள்ளுக்கை
அலகுகள்

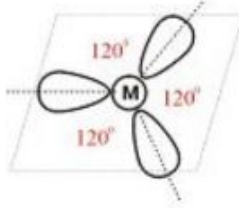
இலத்திரன் சோடிக்கேத்திர கணிதம்

2



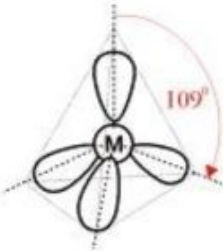
நேர்கோடு

3



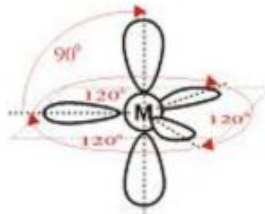
தள முக்கோணம்

4



நான்முகி

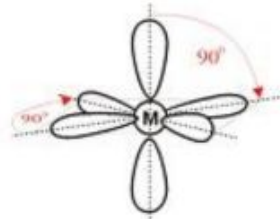
5



முக்கோண இருபக்கக் கூம்பகம்

மூன்று தள்ளுக்கை அலகுகள் ஒன்றுக்கொன்று 120° கோணத்துடன் ஒரே தளத்தில் உள்ளன. மற்றைய இரு தள்ளுக்கை அலகுகள் இத்தளத்திற்குச் செங்குத்தாக 180° கோணத்தில் உள்ளன.

6



எண்முகி

நான்கு தள்ளுக்கை அலகுகள் ஒரே தளத்தில் உள்ளன. அவற்றிற் கிடையேயான கோணம் 90° மற்றைய இரு அலகுகளும் இத்தளத்திற்குச் செங்குத்தாக உள்ளன. அத்துடன் அவற்றிற்கிடையிலான கோணம் 180° .

நேர்கோட்டு இலத்திரன் சோடிக் கேத்திரகணிதம்

மையஅணுவைச் சூழ இரு தள்ளுகை VSEPR அலகுகள் உண்டு இங்கு நாம் இரு வேறு அணுக்களுடன் மையஅணு பிணைப்பில் இருக்கும் நிலையைக் கருதுவோம். அவ்வகையின் வடிவம் நேர்கோடு. அட்டவணை 2.4 மேலும் பல நேர்கோட்டு மூலக்கூறுகளுக்கு உதாரணங்களைக் கொடுக்கும்.

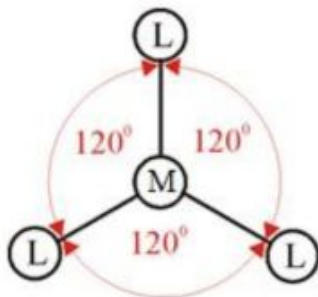
அட்டவணை 2.4 இரண்டு தள்ளுகை அலகைக் கொண்ட மூலக்கூறுகளும் அயன்களும்

சூத்திரம்	லூயிசின் கட்டமைப்பு / வடிவம்	வடிவம்
CO_2	$\text{O}=\text{C}=\text{O}$	நேர்கோடு
HCN	$\text{H}-\text{C}\equiv\text{N}:$	நேர்கோடு
NO_2^+	$\text{O}=\text{N}^+=\text{O}$	நேர்கோடு

தளமுக்கோண இலத்திரன் சோடிகளின் கேத்திரகணித வடிவம்

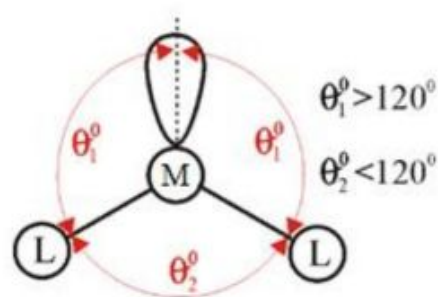
பிரதானமாக இருவகை இலத்திரன் சோடிக் கேத்திரகணிதம் பிணைப்பு, தனிச்சோடி என பிரிக்கப்பட்டுள்ளது.

- மூன்று தள்ளுகை (VSEPR) அலகுகளும் பிணைப்புச்சோடி
- இரண்டு தள்ளுகை (VSEPR) அலகுகள் பிணைப்புச்சோடி மற்றையது தனிச்சோடி



(a)

மூன்று தள்ளுகை அலகுகளும் பிணைப்பிலுள்ளன.



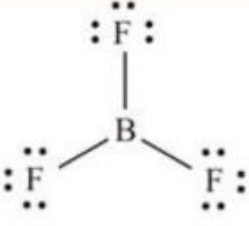
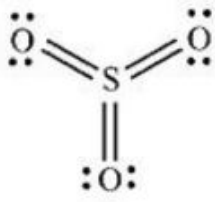
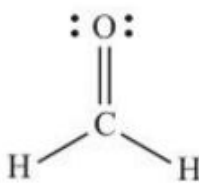
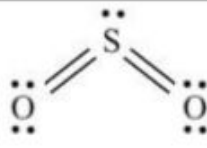
(b)

இரண்டு தள்ளுகை அலகுகள் பிணைப்பிலுள்ளன. மற்றையது தனிச்சோடி

உரு 2.9 தளமுக்கோண இலத்திரன்சோடி கேத்திரகணிதம்

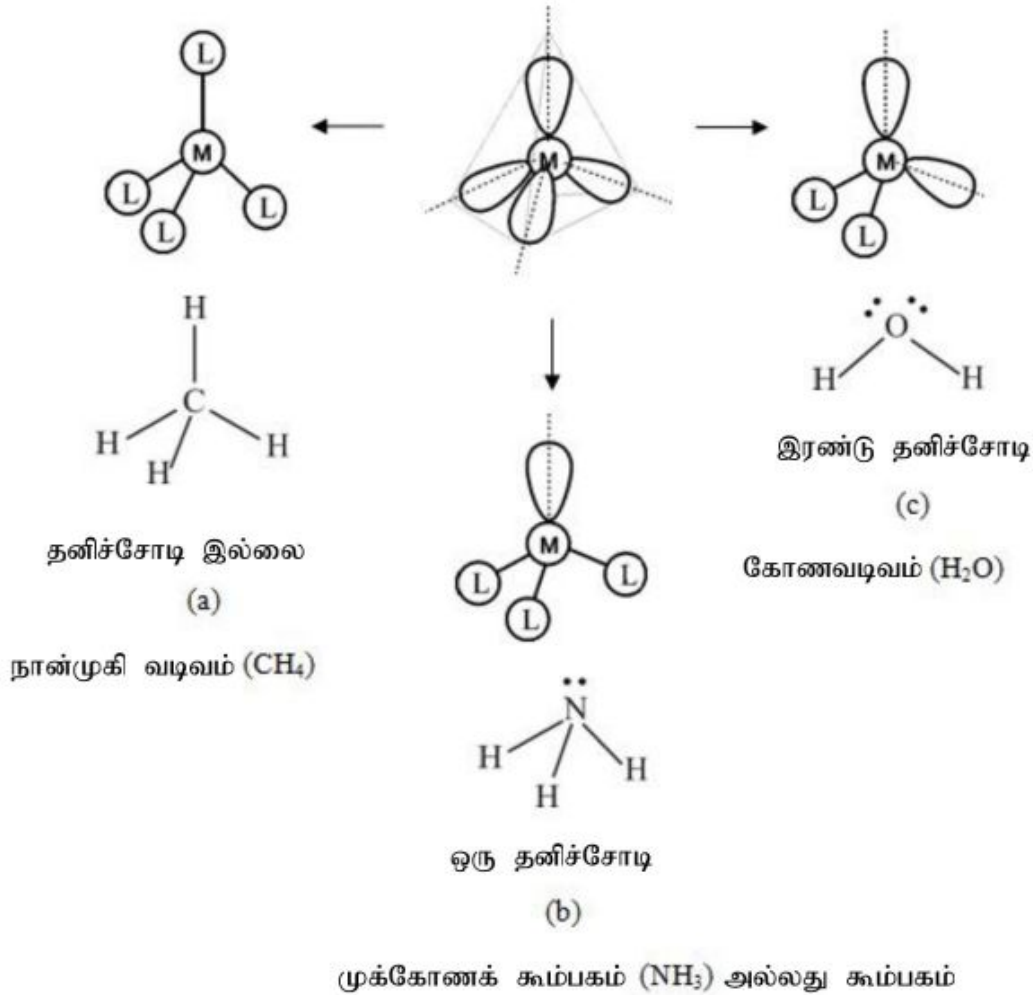
பின்வரும் அட்டவணை 2.5 இல் மையஅணு BF_3 , SO_3 , H_2CO இன் மையஅணுவில் தனிச்சோடி இலத்திரன்கள் இல்லை. எனவே தளமுகக்கோண வடிவம். எனினும் SO_2 இல் S இல் தனிச்சோடி இலத்திரன் இருப்பதால் கோணவடிவத்தைப் பெறுகின்றது.

அட்டவணை 2.5 மூலக்கூறுகள் / அயன்கள் மூன்று தள்ளுகை அலகுகளுடன்

இரசாயனச் சூத்திரம்	வடிவத்தைக் காட்டும் லூயிசின் புள்ளிக்கோட்டு கட்டமைப்பு	வடிவம்
BF_3		தள முக்கோணம்
SO_3		தள முக்கோணம்
HCHO		தள முக்கோணம்
SO_2		கோண வடிவம்

நான்முகி இலத்திரன் சோடிக் கேத்திரகணிதம்

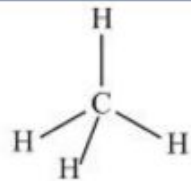
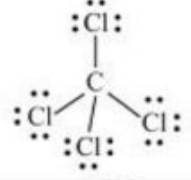
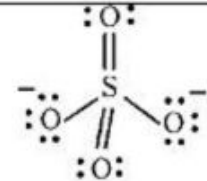
நான்கு தள்ளுகையலகுகளைப் பிணைப்புத் தனிச்சோடி என வெவ்வேறாகப் பிரித்துப் பார்க்கும்பொழுது மூன்று வகைகள் சாத்தியமாகின்றது. பின்வரும் உருக்கள் 2.1 இதனைச் சுருக்கமாக எடுத்துக் காட்டுகின்றது.



உரு 2.10 நான்முகி இலத்திரன் சோடிகளின் கேத்திரகணிதம்

பின்வரும் அட்டவணை 2.6 நான்முகி வடிவக் கேத்திரகணிதத்தை உடைய மூலக்கூறுகளிற்கு மேலதிக உதாரணங்களைத் தருகின்றது.

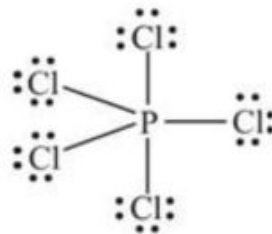
அட்டவணை 2.6 நான்முகி வடிவான மூலக்கூறுகள் / அயன்கள்

இரசாயனச் சூத்திரம்	லூயிசின் புள்ளிக் கோட்டு கட்டமைப்பு	வடிவம்
CH ₄	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$	
CCl ₄	$\begin{array}{c} :\ddot{\text{Cl}}: \\ \\ :\ddot{\text{Cl}}-\text{C}-\ddot{\text{Cl}}: \\ \\ :\ddot{\text{Cl}}: \end{array}$	
SO ₄ ²⁻	$\begin{array}{c} :\ddot{\text{O}}: \\ \\ :\ddot{\text{O}}-\text{S}-\ddot{\text{O}}: \\ \\ :\ddot{\text{O}}: \end{array}$	

முக்கோண இருகூம்பகத்தின் இலத்திரன் சோடிக் கேத்திரகணிதம்

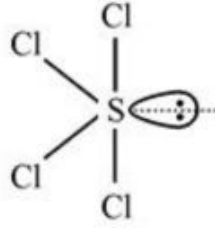
மையஅணுவைச்சூழ்ந்து 5 தள்ளுகை (VSEPR) அலகுகள் உள்ளன. அவற்றைப் பிணைப்புச் சோடியாகவும் தனிச்சோடியாகவும் கருதும்பொழுது நான்கு வெவ்வேறு வகைகளாக ஒழுங்கு படுத்தப்படலாம்

- மையஅணுவைச் சூழவுள்ள ஐந்து தள்ளுகை அலகுகளும் பிணைப்புச் சோடிகள் உதாரணம்: PCl₅ வடிவம் கீழே தரப்பட்டுள்ளது.

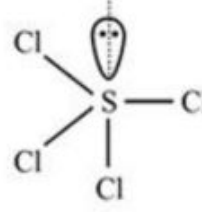


உரு 2.11 இலத்திரன் சோடிக் கேத்திரகணிதம் PCl₅

- நான்கு தள்ளுகை அலகுகள் பிணைப்புச்சோடி மற்றைய ஒரு தனிச்சோடி இலத்திரன்கள் உதாரணம்: SCl_4

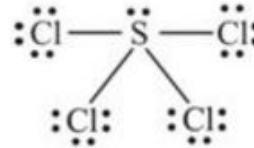
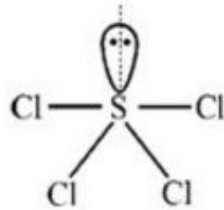


(a)



(b)

கொள்கை ரீதியாக நான்கு பிணைப்புச்சோடியையும் ஒரு தனிச்சோடியையும் கொண்ட மூலக்கூறின் வடிவம் உருக்குலைந்த அதாவது ஒழுங்கற்ற நிறுத்தாடுவளை வடிவம் see-saw. தனிச்சோடிக்கான கற்பனை அச்சம் மற்றும் இரு S - Cl பிணைப்பும் ஒரு தளத்தில் இருக்கும். மிகுதி S - Cl பிணைப்புகள் இத்தளத்திற்குச் செங்குத்தாக அமையும்.



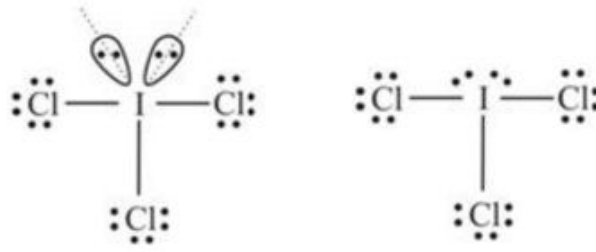
உரு 2.12 SCl_4 இற்கான இலத்திரன் சோடிக் கேத்திரகணிதம்

எவ்வாறாயினும் தனிச்சோடி இலத்திரன்களின் விளைவால் ஒழுங்கற்ற நிறுத்தாடுவளை உருவாகின்றது. இதனால் திரிந்த நான்முகியுரு உருவாகும். எனவே SCl இன் வடிவம் திரிந்த அல்லது உருக்குலைந்த நான்முகி / திரிந்த நிறுத்தாடுவளை / ஒழுங்கற்ற நிறுத்தாடுவளை

- மூன்று தள்ளுகை அலகுகள் பிணைப்புச் சோடி இலத்திரன்கள் மற்றைய இரு தள்ளுகை அலகுகள் தனிச்சோடி இலத்திரன்கள்.

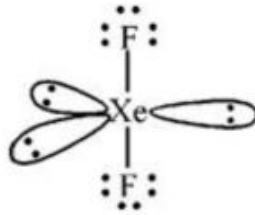
உதாரணம்: ICl_3

VSEPR அலகுகளுக்கிடையிலான அதிகுறைந்த தள்ளுகை விசைகளையுடைய, உறுதி கூடிய அமைப்புக் கீழே தரப்பட்டுள்ளது. இவ்வரிவடிவத்தை அச்சைச் சுற்றிச் சுழற்றும்போது I ஐ சூழ உள்ள Cl அணுக்களைக் கருதும்போது T வடிவம் உண்டாகின்றது. எனவே மூலக்கூறின் வடிவம் T. இங்கு இரண்டு தனிச்சோடிகளும் ஒரு I - Cl பிணைப்பும் ஒரே தளத்தில் உள்ளது. மிகுதி I-Cl பிணைப்புகள் இரண்டும் இத்தளத்திற்குச் செங்குத்தாக உள்ளது.

உரு 2.13 இலத்திரன் சோடிக் கேத்திரகணிதம் ICl_3

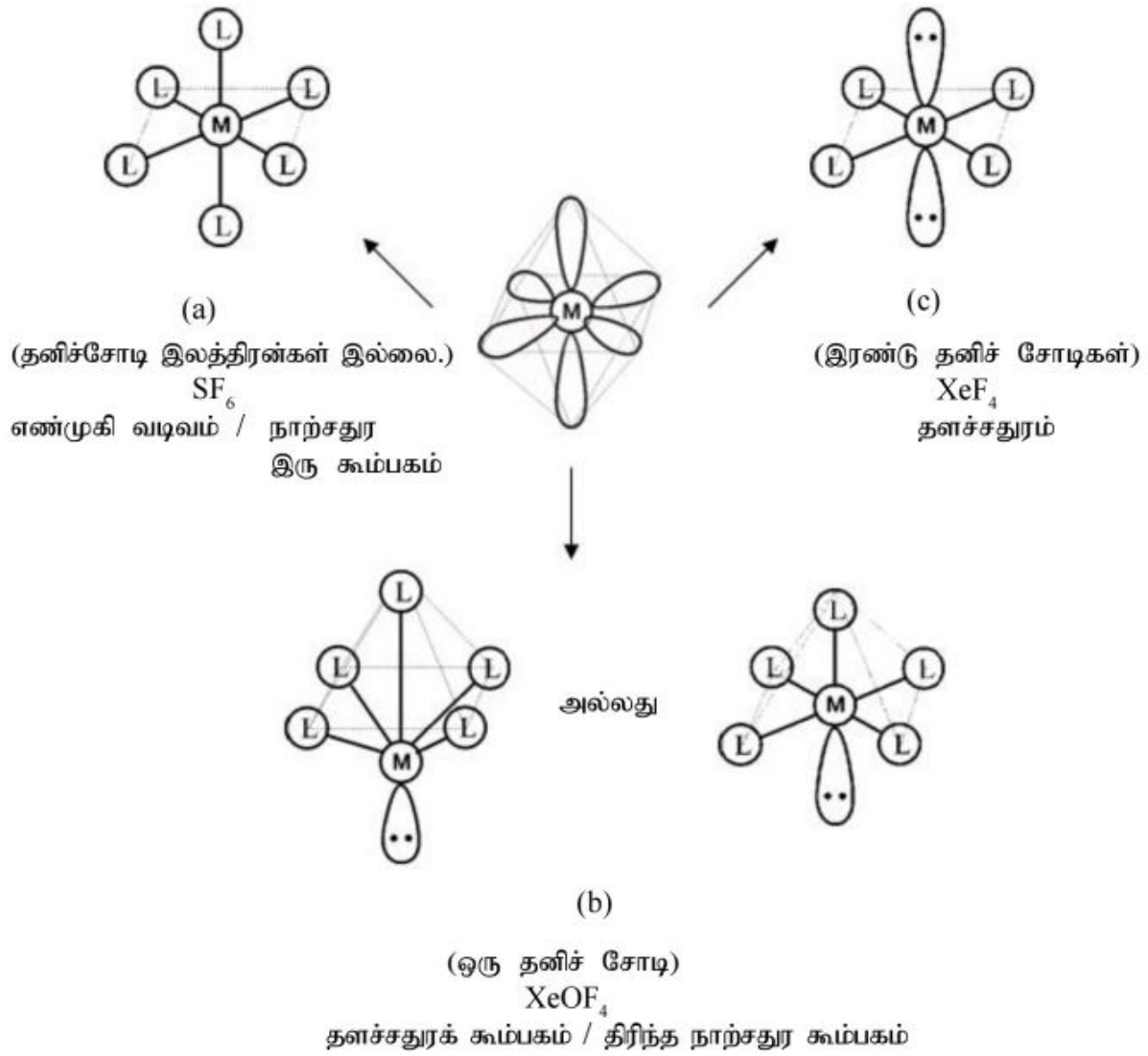
- இரு தள்ளுகை அலகுகள் பிணைப்புச் சோடிகள் மிகுதி மூன்று அலகுகள் தனிச்சோடி இலத்திரன்கள்
உதாரணம்: XeF_2

இவ்வகையில் எல்லா அணுக்களும் ஒரே கோட்டில் உள்ளமையால் மூலக்கூறு நேர்கோட்டு வடிவத்தைப் பெறும். பின்வரும் லூயியின் கட்டமைப்பு XeF_2 மூலக்கூறின் நேர்கோட்டு வடிவத்தை எடுத்துக் காட்டுகின்றது. மூன்று தனிச்சோடிகளும் ஒரே தளத்தில் உள்ளன. இவை $\text{F} - \text{Xe} - \text{F}$ அச்சிற்குச் செங்குத்தாக உள்ளன.

உரு 2.14 இலத்திரன் சோடிக் கேத்திரகணிதம் XeF_2

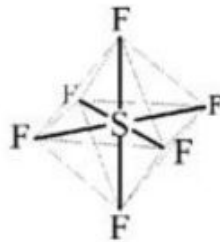
எண்முகி இலத்திரன் சோடிக் கேத்திரகணிதம்

இங்கு ஒவ்வொரு சோடி இலத்திரன்களும் ஒன்றுக்கொன்று 90° இல் உள்ளன. பின்வரும் உரு அவ்வகையான மூலக்கூறுகளின் இலத்திரன் சோடிகளின் கேத்திரகணிதத்தை தருகின்றது. நான்கு தள்ளுகை அலகுகள் ஒரு தளத்திலும் மற்றைய இரு அலகுகள் இத்தளத்திற்குச் செங்குத்தாகவும் உள்ளது



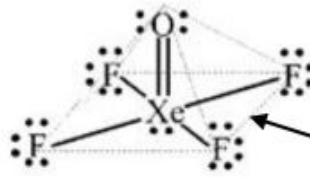
உரு 2.15 எண்முகி இலத்திரன் சோடிக் கேத்திரகணிதம்

முதலில் எல்லாத் தள்ளுகை அலகுகளும் பிணைப்பாக உள்ளதைக் கருதுக. (உதாரணம் SF_6) மைய அணுவைச் சூழ உள்ள அணுக்களின் மையத்தைக் கற்பனைப் புள்ளிக்கோடுகளால் இணைக்க. எட்டுத் தளங்களுடனான எண்முகி உருவாகும். எனவே அம்மூலக்கூறு எண்முகிவடிவம் எனப்படும்.



உரு 2.16 இலத்திரன் சோடிக் கேத்திரகணிதம் SF_6

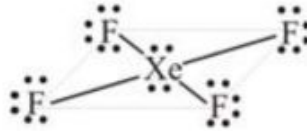
பின்னர் ஐந்து (ஒருஇரட்டைப் பிணைப்பும் நான்கு ஒற்றைப் பிணைப்புகளும்) பிணைப்புச் சோடிகளுடன் ஒரு தனிச்சோடி இலத்திரன்களைக் கொண்ட மூலக்கூறாகக் கருதுக. இலத்திரன் சோடிக் கேத்திரகணிதம் ஒழுங்கு4 இற்கு எண்முகி. சூழ உள்ள அணுக்களைக் கற்பனைப் புள்ளிக்கோடுகளால் இணைக்கும்போது கூம்பகம் சதுர வடிவஅடியுடன் உருவாகும். ஆகவே மூலக்கூறின் வடிவம் சதுரகூம்பக வடிவம். Xe-F பிணைப்புகளின் மீது தனிச்சோடி இலத்திரன்களால் ஏற்படுத்தப்படும் தள்ளுகை விசையினால் மூலக்கூறின் வடிவம் ஒழுங்கற்ற எண்முகி வடிவத்தை XeOF_4 பெறுகின்றது.



நான்கு F அணுக்கள் அமைந்துள்ள இடம் கற்பனைத் தளமாகும்.

உரு 2.17 இலத்திரன் சோடிக் கேத்திரகணிதம் XeOF_4

மூலக்கூறு நான்கு பிணைப்புச் சோடி இலத்திரன்களையும் இரு தனிச்சோடி இலத்திரன்களையும் கொண்டிருக்கும் போது வடிவம் தளசதுரம் / சதுரத்தளம். இது XeF_4 மூலக்கூறினால் எடுத்துக் காட்டப்படுகின்றது.



உரு 2.18 இலத்திரன் சோடிக் கேத்திரகணிதம் - XeF_4

உதாரணம் 2.3:

(i) பின்வரும் மூலக்கூறுகளின் லூயியின் புள்ளிக்கோட்டுக் கட்டமைப்பை வரைந்து வடிவத்தை உய்த்தறிக.

(a) SO_3

(b) CH_2Cl_2

விடை:

(a) SO_3

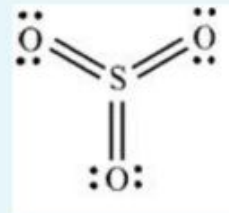
S அணுவிலிருந்து வலுவளவு இலத்திரன்கள் = 6e

3 O அணுவிலிருந்தும் வலுவளவு இலத்திரன்கள் $3(6e)=18e$

மொத்த அணுக்களிலிருந்து இலத்திரன்கள் 24e

மைய அணுவைச் சூழ உள்ள தள்ளுகை அலகுகள் = 3

வடிவம் - தள முக்கோணம்



லூயியின் புள்ளிக்கோட்டு கட்டமைப்பு

(b) CH_2Cl_2

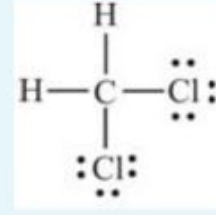
C அணுவிலிருந்து வலுவளவு இலத்திரன்கள் = 4e

2 H அணுவிலிருந்தும் வலுவளவு இலத்திரன்கள் $2(1e) = 2e$ 2 Cl அணுக்களிலிருந்து வலுவளவு இலத்திரன்கள் $2(7e) = 14e$

மொத்த இலத்திரன்கள் 20e

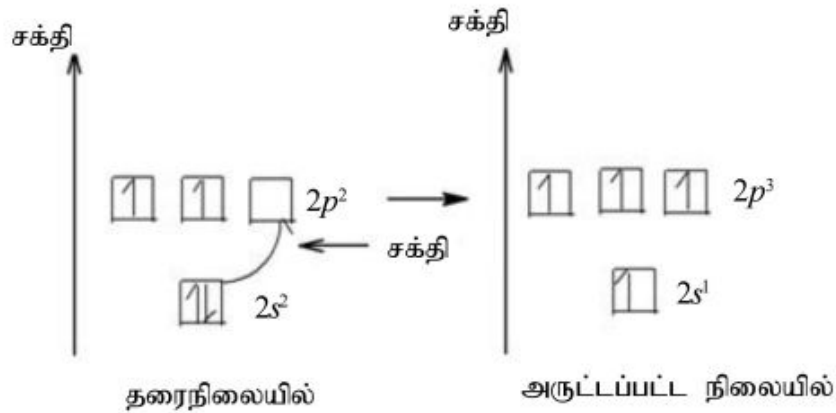
மைய அணுவைச் சூழ உள்ள தள்ளுகை அலகுகள் = 4

வடிவம் - நான்முகி

லூயிசின் புள்ளிக்கோட்டு
கட்டமைப்பு

2.3.1 அணு ஒபிற்றல்களின் கலப்பாக்கம்

கலப்பாக்க எண்ணக்கருவை, காபன் அணுவை உபயோகித்துப் பண்பறிதீயாக விளக்கலாம். காபன் அணுவின் வலுவளவு ஒரு தரைநிலையில் ஒரு சோடி இலத்திரன்களையும், சோடியாக்கப்படாத இரு இலத்திரனையும் கொண்டுள்ளது ($ns^2 np^2$) or $2s^2 2p^2$ எவ்வாறாயினும் நான்கு பங்கீட்டுப் பிணைப்புகளை உருவாக்குவதற்குச் சோடியாக்கப்படாத இலத்திரன்களைக் கொண்ட நான்கு ஒபிற்றல்கள் அவசியம். ஆகவே தரைநிலையில் உள்ள இலத்திரன்கள் அருட்டப்பட்டு மீள்ஒழுங்காக்கப்பட்டு நான்கு சோடியாக்கப்படாத இலத்திரன்களைக் கொண்ட நிலை உருவாக்கப்படுகின்றது.



உரு 2.19 காபன் அணு ஒன்றின் சக்தி மட்ட வரிப்படம்

இங்கு காபனின் வலுவளவு ஓட்டில் உள்ள $2s$ இலத்திரன் ஒன்று சக்தியை உறிஞ்சி வெற்று $2p$ ஒபிற்றல் ஒன்றினுள் மேலே உள்ள உருவில் காட்டியவாறு செல்கின்றது. $2s, 2p$ ஒபிற்றல் களுக்கிடையிலான சக்திவேறுபாடு குறைவாக உள்ளதால் இலத்திரன் இடமாற்றம் / தாண்டல் சாத்தியமாகின்றது. அருட்டப்பட்ட நிலையில் உள்ள அணு சோடியாக்கப்படாத இலத்திரன்களை $2s, 2p$ மட்டங்களில் மேலே குறித்துக் காட்டியவாறு கொண்டுள்ளது. நான்கு சோடியாக்கப்படாத இலத்திரன்கள் உள்ளபோதும் இலத்திரன்கள் இரண்டு வேறுபட்ட சக்தி மட்டங்களில் இருக்கின்றன. அத்துடன் இரு வேறுபட்ட வடிவத்தையுடைய அணு ஒபிற்றல்களில் இருக்கின்றன. (கோளவடிவம் s ஒபிற்றல், டம்பெல் வடிவம் p ஒபிற்றல்) இந்நிலையில் CH_4 மூலக்கூறில் காணப்படும் பிணைப்பு C - H வகை ஒன்று காபனின் s ஒபிற்றலுக்கும், ஐதரசனின் s ஒபிற்றலுக்கும் இடையில்

உண்டாகும் மற்றையவை ஒவ்வொன்றும் C அணுவின் P ஓபிற்றல் ஐதரசனின் s ஓபிற்றலுடன் மேற்பொருந்துவதால் உருவாகும். அப்பொழுது CH_4 மூலக்கூறு இரு வேறு வகையான பிணைப்புகளை இருவகை பிணைப்புக் கோணங்களுடன் கொண்டிருக்கும் என எதிர்பார்க்கப்படுகின்றது.

எவ்வாறாயினும் CH_4 இல் உள்ள நான்கு C - H பிணைப்புகளும் எல்லா வகையிலும் ஒத்தவை. ஆகவே உகந்த எடுகோள், பிணைப்பு உண்டாவதற்கு முன்னர் 2s, 2p ஓபிற்றல்கள் கலப்படைந்து சமசக்தி, ஒரே வடிவம் ஒரே பருமன் உள்ள நான்கு அணு ஓபிற்றல்களை உருவாக்குகின்றன என்பதே. இவ்எண்ணக்கரு ஓபிற்றல்களின் “கலப்பாக்கம்” என அழைக்கப்படும். கலப்பாக்கம் என்ற எண்ணக்கரு இன்றி CH_4 மூலக்கூறு தகுந்த கட்டமைப்பைக் கொடுப்பது சாத்தியமன்று. C-H பிணைப்பு 2s ஓபிற்றலைப் பயன்படுத்தியும் 2p ஓபிற்றலைப் பயன்படுத்தும்போது உருவாகும் சார் நிலைகளைக் கருதி CH_4 கட்டமைப்பை விளக்குவது சாத்தியமற்றது.

பின்வரும் காரணிகள் அணு ஓபிற்றல்களின் கலப்பாக்கத்திற்கு முக்கியமானவை.

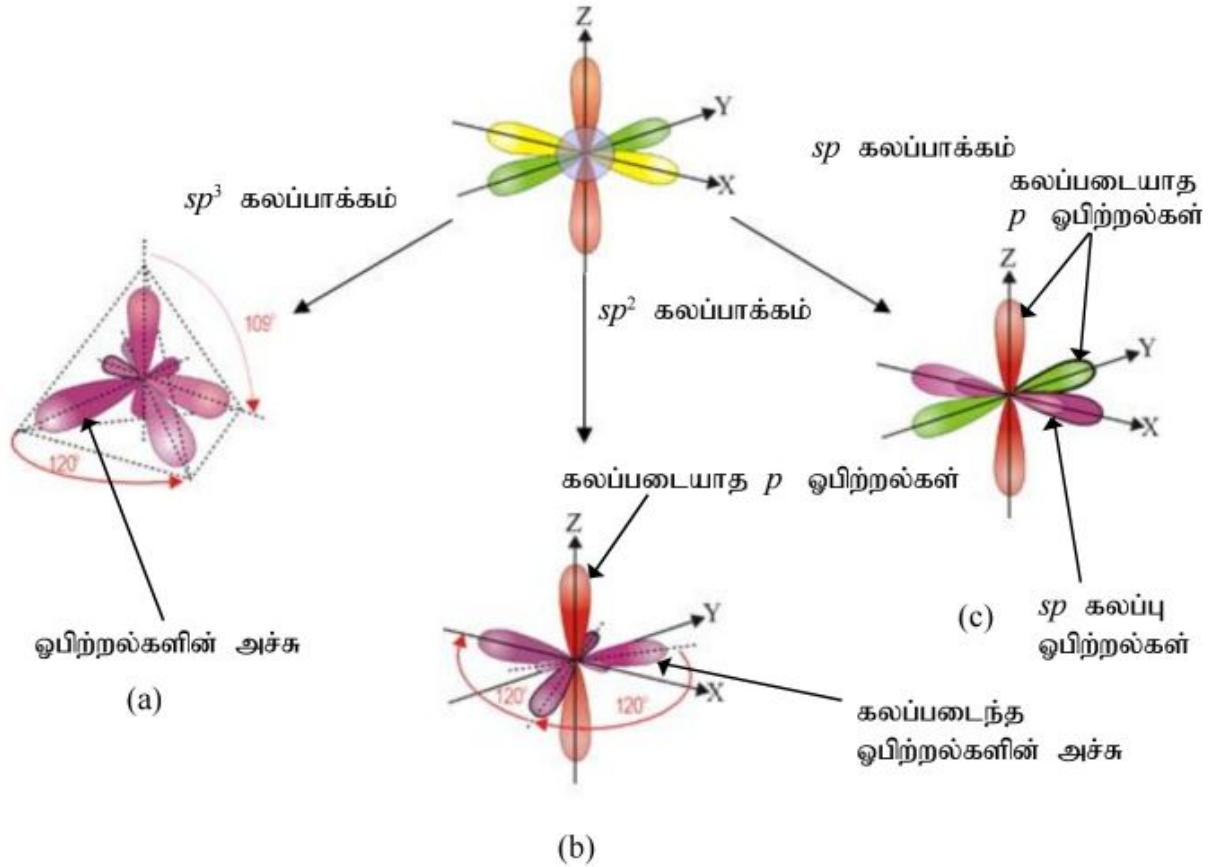
1. கலப்பாக்கம் என்ற எண்ணக்கரு தனி ஒரு அணுவிற்கு மாத்திரம் பயன்படுத்த முடியாது ஆனால் ஒரு மூலக்கூறில் குறித்த ஓர் அணுவினால் உருவாக்கப்படும் பிணைப்பை விபரிப்பதற்குப் பயன்படுத்தப்படும்.
2. ஆகக்குறைந்தது இரு வேறுபட்ட வடிவமும் சக்தியையும் உடைய இரு அணுஓபிற்றல்கள் கலப்புக்குட்பட்டுக் கலப்பு ஓபிற்றல்களை உருவாக்குகின்றன.

உதாரணம்: s ஓபிற்றல் ஒன்று அல்லது ஒன்றுக்கு மேற்பட்ட p ஓபிற்றல்களுடன் கலப்படைய முடியும். இக்கலப்புகளில் ஈடுபடும் ஓபிற்றல்கள் ஒரே தன்மையைக் கொண்டிருக்கமாட்டாது. எனவே அவற்றின் வடிவம் ஆரம்ப s, p ஓபிற்றல்களின் வடிவத்திலிருந்து வேறுபடும்.

3. உருவாகும் கலப்பு ஓபிற்றல்களின் எண்ணிக்கை கலப்பில் ஈடுபட்ட அணு ஓபிற்றல்களின் எண்ணிக்கைக்குச் சமனாகும். வேறுபட்ட சக்தி மட்டங்களில் உள்ள ஓபிற்றல்கள் கலப்படைந்திருப்பினும் விளைவு கலப்புபிறப்பு ஓபிற்றல்கள் எல்லாம் சமசக்தி கொண்டவையாகக் காணப்படும். இக்கலப்பு ஓபிற்றல்கள் முப்பரிமாண வெளியில் அவற்றின் திசைகோளில் (orientation) மட்டும் வேறுபடும். சக்தி, வடிவம், பருமன் ஆகியவற்றில் ஒன்றையொன்று ஒத்திருக்கும்.
4. ஒரு குறித்த அணுவிலுள்ள கலப்பு பிறப்பு ஓபிற்றல் வேறு ஒரு அணுவின் கலப்புபிறப்பு ஓபிற்றலுடன் அல்லது கலப்படையாத அணு ஓபிற்றலுடன் மேற்பொருந்தி σ பிணைப்புகளை உருவாக்கலாம்.

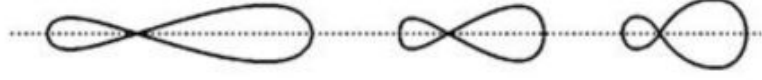
கலப்பாக்கம் உண்மையான பெளதிக செயன்முறையன்று. ஆயினும் இக் கற்பனை செயன்முறை ஒரு எண்ணக்கருவாகத் தரப்பட்டுள்ளது. இவ் எண்ணக்கருவின்படி மூன்று வகையான கலப்பாக்கம் காபன் அணுவின் அருட்டப்பட்ட நிலையில் சாத்தியமானது. அதன் சுருக்கம் கீழே தரப்பட்டுள்ளது.

1. s ஒபிற்றலும் மூன்று p ஒபிற்றல்களும் கலப்படைந்து நான்கு sp^3 கலப்புபிணைப்பு ஒபிற்றல்களை உருவாக்கல் (நான்முகி கேத்திர கணிதம்)
2. s ஒபிற்றல் இரு p ஒபிற்றல்களுடன் கலப்படைந்து மூன்று sp^2 கலப்பு பிறப்பு ஒபிற்றல்களை உருவாக்கல் (தளமுகக்கோண கேத்திரகணிதம்)
3. s ஒபிற்றல் ஒரு p ஒபிற்றலுடன் கலப்படைந்து இரு sp கலப்பு பிறப்பு ஒபிற்றலை உருவாக்குதல் (நேர்கோட்டு கேத்திரகணிதம்)



உரு 2.20 sp^3 , sp^2 , sp கலப்பு பிறப்பாக்கம்

பின்வரும் வரைபடம் sp^3 , sp^2 , sp கலப்பு ஒபிற்றல்களின் வடிவம் s அல்லது p இன் சதவீத இயல்பு ஆகியவற்றை ஒப்பிடுகின்றது.



	sp^3 கலப்பாக்கம்	sp^2 கலப்பாக்கம்	sp கலப்பாக்கம்
s இயல்பு	25%	33.3%	50%
p இயல்பு	75%	66.6%	50%

உரு 2.21 sp^3 , sp^2 , sp கலப்பு ஒபிற்றல்களை ஒப்பிடல்

- (a) முப்பரிமாண வெளியில் sp^3 கலப்பு ஒபிற்றல்களின் திசைகோள்/ ஒழுங்கமைப்பு (orientation)

ஒரு நான்முகியினுள் ஒபிற்றல்கள் அமைத்து அதன் உச்சியை நோக்கிய வண்ணம் உள்ளன. ஒபிற்றல்களுக்கிடையிட்ட கோணம் $109^\circ 28'$ ஆகும்

- (b) sp^2 கலப்பு ஒபிற்றல்களின் திசைகோள் (orientation)

மூன்று கலப்பு பிறப்பு ஒபிற்றல்களினதும் அச்சுகள் ஒரே தளத்தில் அமைந்துள்ளது. கலப்பு பிறப்பு ஒபிற்றல்களுக்கிடையிட்ட கோணம் 120° கலப்பில் ஈடுபடாத p ஒபிற்றல்கள் கலப்பு ஒபிற்றல்களின் தளத்திற்குச் செங்குத்தாக அமைந்துள்ளது.

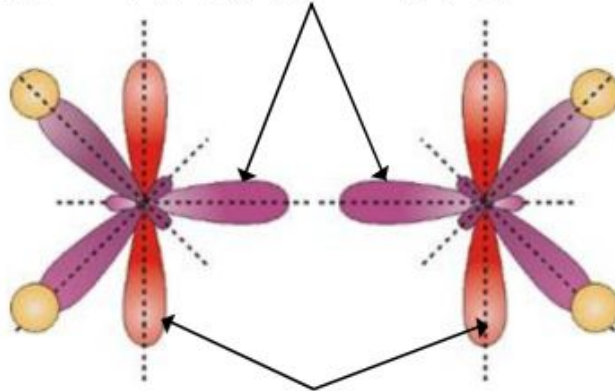
- (c) sp கலப்பு ஒபிற்றல்களின் திசைகோள் / ஒழுங்கமைப்பு (orientation)

கலப்பு ஒபிற்றல்களுக்கிடையிலான கோணம் 180° , எனவே இரு அச்சுகளும் நேர்கோட்டில் அமையும். கலப்புப் பிறப்பாக்கத்தில் ஈடுபடாத இரு p ஒபிற்றல்கள் ஒன்றிற்கொன்று செங்குத்தாக அமையும்.

2.3.2 இரட்டை மற்றும் மும்மைப் பிணைப்பு உருவாதல்

இரு அணுக்களுக்கிடையில் இரு பிணைப்புகள் காணப்படும்பொழுது ஒன்று σ பிணைப்பு மற்றையது π பிணைப்பு. எதின் மூலக்கூறில் இரு காபன் அணுக்களுக்குமிடையில் (CH_2CH_2) இரட்டைப் பிணைப்பு உருவாதலைக் கருதுக. இரு கலப்பு ஒபிற்றல்களுக்கிடையில் மேற் பொருந்துகை நடைபெறும்பொழுது σ பிணைப்பு உருவாகின்றது. π ஒபிற்றல்களின் பக்கவாட்டு மேற்பொருந்துகையினால் π பிணைப்பு உருவாகின்றது.

இரு கலப்புபிறப்பு ஒபிற்றல்கள் ஒரே அச்சில் உள்ளது.

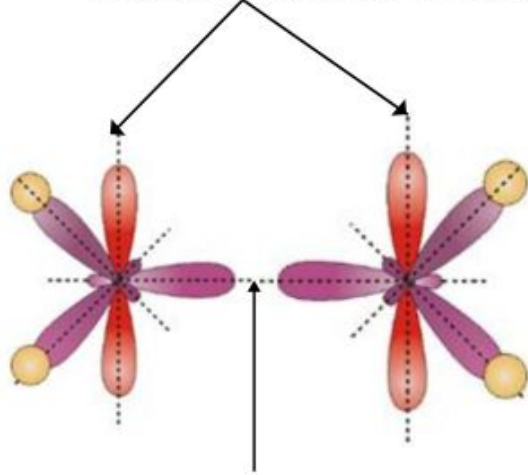


p ஒபிற்றல்களின் அச்சுக்கள் ஒன்றுக்கொன்று சமாந்தரமானது

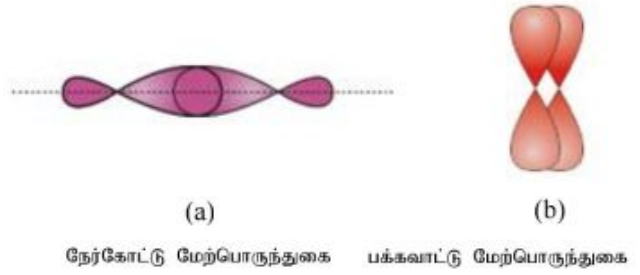
உரு 2.22 sp^2 கலப்புபிறப்பு ஒபிற்றல்கள் அத்துடன் p ஒபிற்றலின் திசைகோள்

இரு p ஒபிற்றல்களின் அச்சுகளும் ஒன்றுக்கொன்று சமாந்தரமாக உள்ளதால். இவ் dumbbell வடிவமான ஒபிற்றல்களுக்கிடையில் பக்கவாட்டு மேற்பொருந்துகை ஏற்படுகின்றது. p ஒபிற்றல்களின் அச்சுகள் ஒன்றுக்கொன்று சமாந்தரமாக இல்லாதபொழுது ஒபிற்றல்களின் மேற்பொருந்துகைக்கான சாத்தியம் குறைவு. மேலே உள்ள வரைபடத்தில் இரு கலப்பு ஒபிற்றல்கள் நேர்கோட்டில் அமைந்துள்ளன. எனவே இவற்றிற்கிடையிலான மேற்பொருந்துகை நேர்கோட்டுப் மேற்பொருந்துகை யாகக் கருதப்படும்.

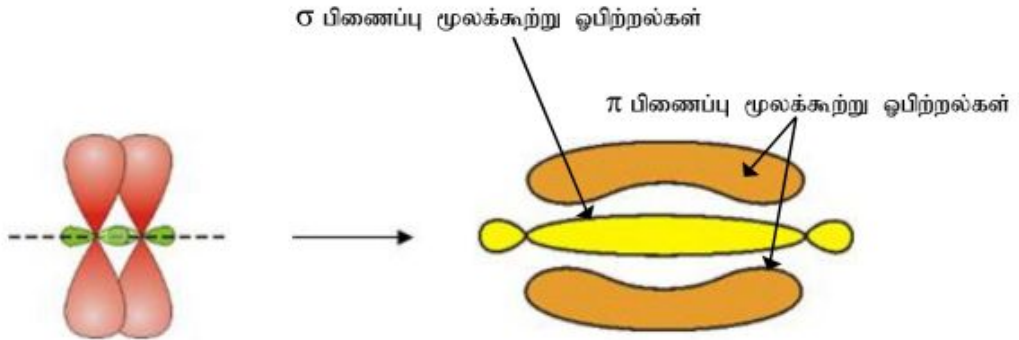
P ஒபிற்றல்கள் - இவற்றின் அச்சுக்கள் ஒன்றுக்கொன்று சமாந்தரமானவை. பக்கவாட்டு மேற்பொருந்துகைக்கு உட்படுகின்றன.



கலப்பு ஒபிற்றல்களின் அச்சுகள் ஒரே நேர்கோட்டில் உள்ளதால் நேர்கோட்டுப் மேற்பொருந்துகை



உரு 2.23 ஒபிற்றல்களின் நேர்கோட்டு, பக்கவாட்டு மேற்பொருந்துகைகள்



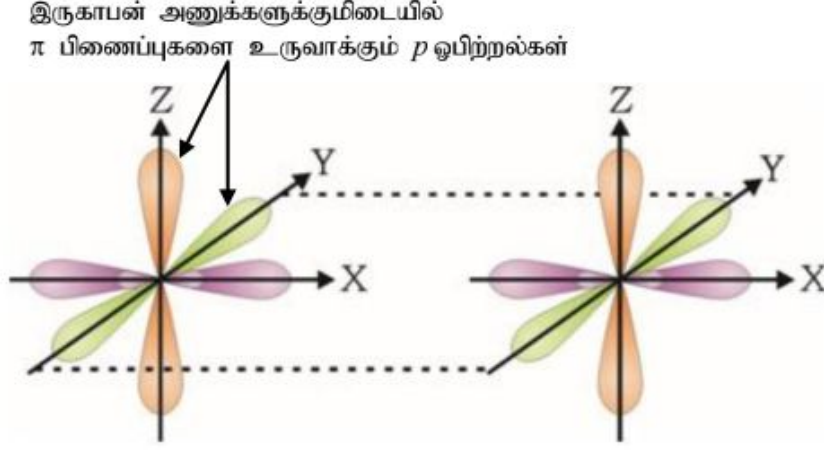
p ஒபிற்றல்களுக்கிடையிலான பக்கவாட்டு மேற்பொருந்துகை

உரு 2.24 σ பிணைப்பும் π பிணைப்பும்

எவ்வாறு மும்மைப் பிணைப்பு உருவாகின்றது என்பதை கற்பதற்கு எதைனில் (C_2H_2) இரு காபன் அணுக்களுக்கிடையில் உள்ள மும்மைப்பிணைப்பைப் பயன்படுத்தலாம். மும்மைப்பிணைப்பு ஒரு σ பிணைப்பையும் இரு π பிணைப்புக்களையும் இரு காபன்களுக்குமிடையில் கொண்டுள்ளது. எதைனின் லூயியின் கட்டமைப்புக் கீழே காட்டப்பட்டுள்ளது.



எதையினில் உள்ள ஒவ்வொரு காபன் அணுவும் இரு σ பிணைப்புக்களை உருவாக்குகின்றது. ஆகவே இக்காபன் அணுக்களும் sp கலப்புடையன. மிகுதி இரு p ஒபிற்றல்களினதும் அச்சுக்கள் ஒன்றுக்கொன்று சமாந்தரமாக உள்ளன. அவை பின்வரும் உருக்களில் தெளிவாகக் குறித்துக் காட்டப்பட்டுள்ளது.



- p_y ஒபிற்றல்களின் அச்சுக்கள் ஒன்றுக்கொன்று சமாந்தரமானவை.
- p_z ஒபிற்றல்களின் அச்சுக்கள் ஒன்றுக்கொன்று சமாந்தரமானவை.
- இரண்டு sp கலப்பு ஒபிற்றல்கள் x அச்சில் ஒன்றையொன்று நோக்கியுள்ளன. இவை இரண்டு காபன் அணுக்களிடையே σ பிணைப்பை உருவாக்கும்.

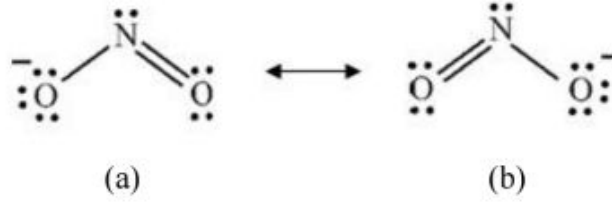
உரு 2.25 எதானில் sp கலப்பு ஒபிற்றல்களினதும் p ஒபிற்றல்களினதும் மேற்பொருந்துகை

ஒரு குறித்த π பிணைப்பை உருவாக்கும் p ஒபிற்றல்களின் அச்சுக்கள் ஒன்றுக்கொன்று சமாந்தரமாகவுள்ளது. மற்றைய π பிணைப்பை உருவாக்கும் மிகுதி p ஒபிற்றல்கள் முதல் π பிணைப்பை உருவாக்கிய ஒபிற்றல்களுக்குச் செங்குத்தானவை. ஒரு மும்மைப் பிணைப்பில் π பிணைப்பு இலத்திரன் முகிலின் கற்பனை அச்சுகள் ஒன்றுக்கொன்று செங்குத்தாக உள்ளன.

2.2.3 பரிவுக் கட்டமைப்புகள்

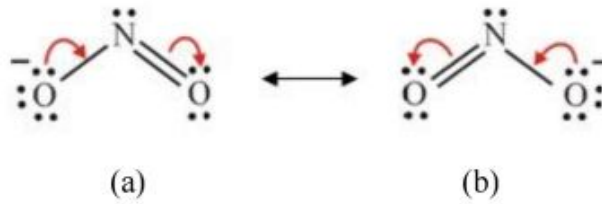
தரப்பட்ட ஒரு மூலக்கூறு அல்லது அயனுக்கு ஒன்றுக்கு மேற்பட்ட லூயிசின் கட்டமைப்புக்களை எழுதுவது சாத்தியமானது. அவ்லூயிசின் கட்டமைப்புகள் பரிவுக் கட்டமைப்புக்கள் எனப்படும். அதற்கான காரணமெனின் பன்மைப் பிணைப்புக்கள் (இரட்டை அல்லது மும்மைப் பிணைப்புக்கள்) இருக்கும்பொழுது அணுக்களின் ஒழுங்கமைப்பில் (மூலக்கூறின் வன்கூடு) மாற்றம் ஏற்படாமல் π பிணைப்பு இலத்திரன் முகில்களின் நிலை மாற்றமடையலாம்.

பின்வருவன NO_2^- அயனின் இருபரிவு அமைப்புக்கள்.



உரு 2.26 NO_2^- அயனின் பரிவு கட்டமைப்புகள்

NO_2^- அயனில் தனிச்சோடி இலத்திரனினதும் (எதிர் ஏற்றத்தையும்) π பிணைப்பு இலத்திரன்களினதும் நிலையை மாற்றி (மறைஏற்றத்தின் நிலையை மாற்றி) இரு பரிவுக் கட்டமைப்புக்கள் A யையும் B யையும் வரையலாம். இரு கட்டமைப்புக்கள் A யும் B யும் ஒத்தவையாக இருப்பதால் அவற்றை ஒன்றிலிருந்து ஒன்றை வேறு பிரித்தறிய முடியாது. பின்வரும் உருக்கள் தெளிவாக வளைந்த அம்புக்குறியினால் எவ்வாறு ஒரு அமைப்பு மற்ற அமைப்பாக மாறுகின்றது என்பதை விளக்குகின்றன. பொதுவாகத் தனிச்சோடி இலத்திரன்களின் அல்லது π இலத்திரன்களின் அசைவைக் காட்டுவதற்கு வளைந்த அம்புக்குறி பயன்படுத்தப்படுகின்றது. அம்புக்குறியின் தலைப்பகுதி இலத்திரன்கள் அசையும் இடத்தைக் குறிக்கும்.



உரு 2.27 NO_2^- அயனிக்கு பரிவு அமைப்பு ஒன்று மற்றையதாக மாறுவதைக் காட்டுகின்றது.

பரிவின் சிறப்பியல்புகள்

- (1) பங்கு கொள்ளும் கட்டமைப்புகள் உண்மையாக இருப்பதில்லை. வசதிக்காக வரையப்பட்ட கற்பனைக் கட்டமைப்புகள் ஆகும். பரிவுக் கலப்பு மட்டுமே உண்மையான மூலக்கூறு அல்லது அயனாகும்.
- (2) சமமான பரிவுக் கட்டமைப்புகளின் பரிவின் விளைவினால் பரிவு அலகுகளின் பிணைப்பு நீளங்கள் சமமாகின்றது. (உதாரணம் O_3 . இங்கே O - O பிணைப்புகள் சமமானவை) அத்துடன் எல்லா அணுக்களும் பரிவுக்கு உட்படும் அலகுகளிற்கு உரியவை.
- (3) பரிவுக்கலப்பு தாழ்சக்தியுடையது. அதனால் பரிவில் பங்குகொள்ளும் கட்டமைப்புகள் யாவற்றிலும் உறுதி கூடியது.
- (4) சமமான பரிவுக் கட்டமைப்புகள், பரிவுக் கலப்பிற்குச் சமமாகப் பங்களிக்கும்.
- (5) சமமற்ற பரிவுக் கட்டமைப்புகள் சமமற்றதாகவும் அத்துடன் உறுதிகூடிய கட்டமைப்புக் கூடுதலாகவும் பங்களிப்புச் செய்யும்.

முறைமையான ஏற்றங்கள் (Formal charges)

ஒரு மூலக்கூறிலுள்ள அல்லது பல் அணு அயனிலுள்ள அணுவின் கருதுகோள் ரீதியான ஏற்றம் முறைமையான ஏற்றமாகும். ஒரு மூலக்கூறு அல்லது அயனின் லூயிசின் கட்டமைப்பில் உள்ள ஒவ்வொரு அணுவின் முறைமையான ஏற்றம் பூச்சியமாக அல்லது பூச்சியத்தை அண்மித்திருக்கும் போது அக்கட்டமைப்புச் சக்திரீதியாக உகந்த கட்டமைப்பாக அமையும்.

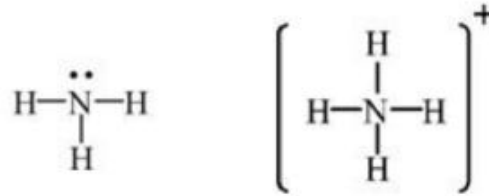
பின்வரும் படிகள் முறைமையான ஏற்றத்தைக் (FC) கணிப்பிடுவதற்கு உதவும்.

1. $FC = (\text{கூட்டஎண்}) - (\text{பிணைப்புக்களின் எண்ணிக்கை}) + [(\text{பிணைப்பில் ஈடுபடாத இலத்திரன்களின் எண்ணிக்கை} e^-)]$

அயன்களின் உண்மையான ஏற்றத்திலிருந்து அவற்றைப் பிரித்தறிவதற்கு முறைமையான ஏற்றங்கள் + அல்லது - இனால் பிரதிநிதித்துவப்படுத்தப்படும்.

2. லூயிசின் குத்திரத்தில், ஓர் அணு ஆவர்த்தனக் கூட்டெண்ணுக்குச் சமமான பிணைப்புகளைக் கொண்டிருக்கும்பொழுது முறைமையான ஏற்றம் பூச்சியமாக இருக்கும்.
3. I. ஒரு மூலக்கூறில் முறைமையான ஏற்றங்களின் கூட்டுத்தொகை பூச்சியம்.
II. பல்அணு அயனில் முறைமையான ஏற்றங்களின் கூட்டுத்தொகை அயனின் ஏற்றத்திற்குச் சமம்.

உதாரணம்:



NH_3 இல் N அணு 3 பிணைப்புகளை உடையது. அத்துடன் 2 பிணைப்பில் ஈடுபடாத இலத்திரன்களையும் கொண்டுள்ளது.

NH_3 இல் உள்ள N க்கு,

$$\begin{aligned} FC &= (\text{கூட்டஎண்}) - (\text{பிணைப்புக்களின் எண்ணிக்கை}) + [(\text{பிணைப்பில் ஈடுபடாத இலத்திரன்களின் எண்ணிக்கை})] \\ &= 5 - (3 + 2) = 0 \end{aligned}$$

அமோனியாவிலுள்ள N இன் மீது முறைமையான ஏற்றம் 0.

NH_3 இல் உள்ள H க்கு,

$$\begin{aligned} FC &= (\text{கூட்டஎண்}) - (\text{பிணைப்புக்களின் எண்ணிக்கை}) + [(\text{பிணைப்பில் ஈடுபடாத இலத்திரன்களின் எண்ணிக்கை})] \\ &= 1 - (1 + 0) = 0 \end{aligned}$$

அமோனியாவிலுள்ள H அணுவின் முறைமையான ஏற்றம் 0.

N இனதும் H இனதும் முறைமையான ஏற்றம் அமோனியாவில் பூச்சியம்.

எனவே முறைமையான ஏற்றங்களின் கூட்டத்தொகை பூச்சியம்.

அமோனியம் அயனில் N அணுவின் முறைமையான ஏற்றம் $(\text{NH}_4)^+$

$(\text{NH}_4)^+$ அயனில் N அணு 4 பிணைப்புடையது. பிணைப்பில் ஈடுபடாத இலத்திரன்கள் இல்லை.

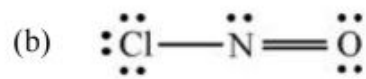
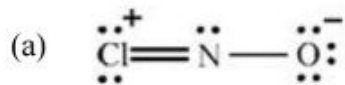
$(\text{NH}_4)^+$ அயனில் N அணுவின் முறைமையான ஏற்றம்.

$$\begin{aligned} \text{FC} &= (\text{கூட்டஎண்}) - (\text{பிணைப்புக்களின் எண்ணிக்கை}) + [(\text{பிணைப்பில் ஈடுபடாத இலத்திரன்களின் எண்ணிக்கை})] \\ &= 5 - (4 + 0) = +1 \end{aligned}$$

முன்னர் காட்டியவாறு H அணுவின் முறைமையான ஏற்றத்தைக் கணிக்கும்போது பூச்சியமாக அமையும். எனவே முறைமையான ஏற்றங்களின் கூட்டுத்தொகை $(\text{NH}_4)^+$ அயனுக்கு 1.

- (1) ஒரு மூலக்கூறிற்கு அல்லது அயனிற்கு மிகவும் பொருத்தமான சூத்திரத்தில் ஒவ்வொரு அணுவிலும் உள்ள முறைமையான ஏற்றம் பூச்சியமாக அல்லது பூச்சியத்தை அண்மித்ததாக விருக்கும்.
- (2) முறைமையான மறையேற்றம் மின்னெதிர்த்தன்மை கூடிய அணுக்களில் காணப்படுவது மிகவும் ஏற்றுக்கொள்ளத்தக்கது.
- (3) லூயிசின் கட்டமைப்பில் உள்ள அடுத்தடுத்துள்ள அணுக்கள் ஒரே குறியீடுள்ள முறைமையான ஏற்றம் இருக்குமாயின் அது திருத்தமான பிரதிநிதித்துவம் அன்று. (அருகருகே ஏற்ற விதி)

இப்போது நாம் லூயிசின் கட்டமைப்புகளை எழுதுவோம். நைத்திரோசைல்குளோரைட்டில் (NOCl) உள்ள அணுக்களுக்கு முறைமையான ஏற்றத்தைக் குறிக்கவும். (NOCl) - சேதனத் தொகுப்புகளில் அடிக்கடி பயன்படுத்தப்படும் பதார்த்தம்) இங்கு குளோரின் அணுவும் ஒட்சிசன் அணுவும் N அணுவுடன் பிணைந்துள்ளது. இது லூயிசின் கட்டமைப்பு அட்டமவிதியைப் பூர்த்தி செய்கிறது.



Cl க்கு $\text{FC} = 7 - (2 + 4) = +1$

Cl க்கு $\text{FC} = 7 - (1 + 6) = 0$

N க்கு $\text{FC} = 5 - (3 + 2) = 0$

N க்கு $\text{FC} = 5 - (3 + 2) = 0$

O க்கு $\text{FC} = 6 - (1 + 6) = -1$

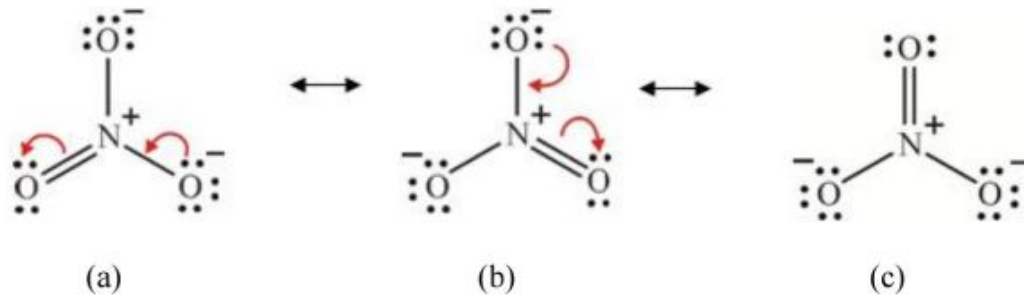
O க்கு $\text{FC} = 6 - (2 + 4) = 0$

லூயிசின் சூத்திரம் (b) விரும்பத்தக்கது.

பரிவுகட்டமைப்புகளின் உறுதித்தன்மையை மதிப்பிடுவதற்கான விதி

- (1) அதிகூடிய உறுதித்தன்மையுடைய பரிவுக் கட்டமைப்பு மிகக் குறைந்த முறைமையான ஏற்றத்தையும் கூடிய எண்ணிக்கையான பங்கீட்டுப் பிணைப்பையும் கொண்டிருக்கும். பரிவுக்கலப்பு கட்டமைப்புக்கு அது கூடிய பங்களிப்புச் செய்யும். பிணைப்புகளின் உச்ச எண்ணிக்கையும் அட்டம விதியைப் பூர்த்தி செய்தலும் ஒன்றுடன் ஒன்று நெருங்கிச் செல்லும்.
- (2) அடுத்தடுத்த அணுக்களின் ஒரே முறைமையான ஏற்றத்தைக் கொண்ட கட்டமைப்பு உறுதியற்றது.
- (3) எதிர்தன்மையான முறைமையான ஏற்றம் அணுக்களில் இடப்படும்பொழுது நேர் ஏற்றம் மின்னேர்த்தன்மையுடைய மூலகத்திலும் எதிர் ஏற்றம் மின்னெதிர்த்தன்மையுடைய மூலகத்திலும் இடப்படும்.
- (4) மின்னெதிர் இயல்பு கூடிய அணுக்களான F மற்றும் O இல் நேர்ஏற்றம் இடப்படின் அக்கட்டமைப்பு உறுதியற்றது.

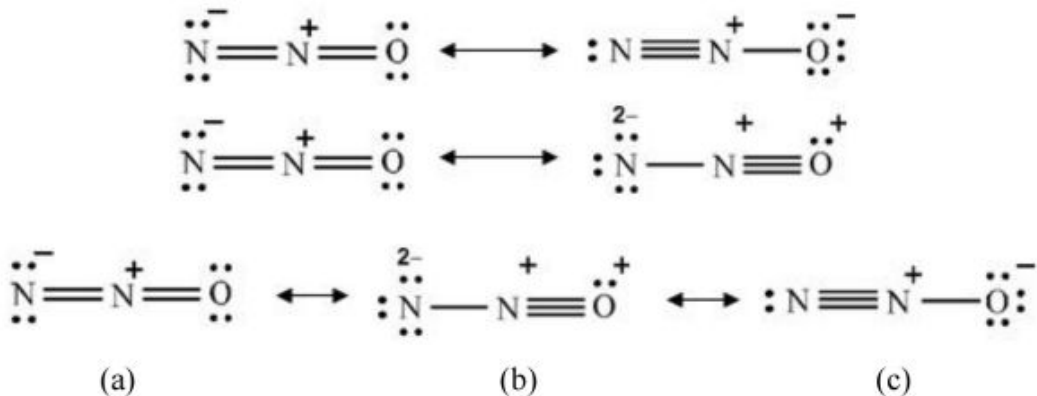
உரு 2.28 இல் நைத்திரேற்று அயனின் (NO_3^-) பரிவுக் கட்டமைப்புகளின் உருவாக்கம் காட்டப்பட்டுள்ளது.



உரு: 2.28 NO_3^- அயனின் பரிவு அமைப்புகள் ஒன்றிலிருந்து மற்றையதாக மாற்றமடைதல்

எல்லாப் பரிவுக் கட்டமைப்புகளும் சமமானவை. அதனால் அவற்றின் உறுதித் தன்மை சமமானவை. இவை பரிவுக் கலப்புக் கட்டமைப்பிற்கு சமமான பங்களிப்பை வழங்கும்.

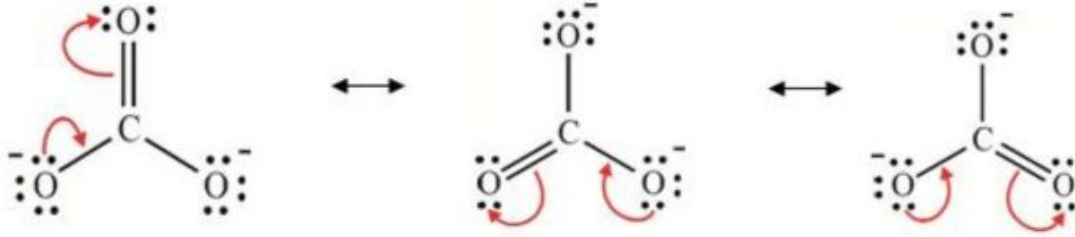
N_2O இன் பரிவுக் கட்டமைப்புகள் பின்வருமாறு தரப்பட்டுள்ளது. இப்பரிவுக் கட்டமைப்புகள் அட்டம விதியைத் திருப்திப்படுத்துகின்றன.



உரு 2.29 N_2O ன் பரிவு கட்டமைப்புகள்

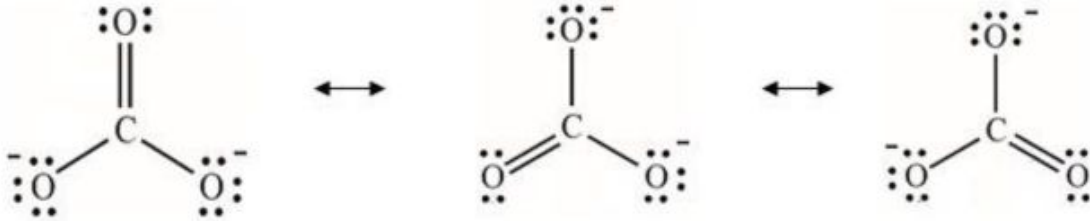
எவ்வாறாயினும் முறைமையான ஏற்றங்களின் அடிப்படையில், இப்பரிவுக் கட்டமைப்புக்களின் உறுதி சமமானவை அன்று. விதி (3) இன்படி கட்டமைப்பு (b) பரிவுக் கலப்புக் கட்டமைப்பிற்கு குறைவான பங்களிப்பை வழங்குகின்றது. (a) மற்றும் (c) கட்டமைப்புக்கள், கட்டமைப்பு (b) உடன் ஒப்பிடும்போது உறுதியானவை. ஆதலால் (a) மற்றும் (b) கட்டமைப்புக்கள் பரிவுக் கலப்புக் கட்டமைப்பிற்கு பிரதான பங்களிப்பை வழங்குகின்றன.

காபனேற்று அயன் இன் பரிவுக் கட்டமைப்புகள் (CO_3^{2-}) உரு 2.30 இல் கீழே தரப்பட்டுள்ளது.



உரு 2.30 CO_3^{2-} ன் ஒரு பரிவுக் கட்டமைப்பு மற்றதாக மாற்றமுறுதல்

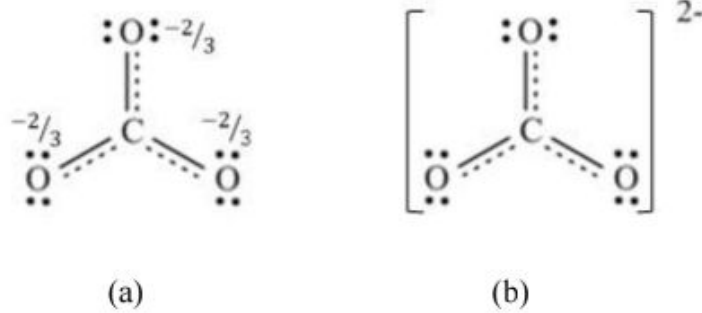
காபனேற்று அயனுக்கான நேரொத்த பரிவுக் கட்டமைப்புகள் பின்வருமாறு:



உரு 2.31 CO_3^{2-} அயனின் பரிவு கட்டமைப்பு

பரிவு கலப்பு அமைப்பை விளக்குவதற்கு காபனேற்று அயனின் பரிவு அமைப்புகளைப் பயன்படுத்தலாம். காபனேற்று அயன்களின் பரிவு அமைப்புக்களைக் கருதும்பொழுது ஒவ்வொரு ஒட்சிசன் அணுவையும் சூழ்ந்து ஆகக்குறைந்தது இரு தனிச்சோடி இலத்திரன்கள் உண்டு. பரிவு அமைப்புக்கள் உருவாகும் பொழுது π பிணைப்பின் நிலை மாறும்பொழுது மூன்றாவது தனிச்சோடி இலத்திரன் ஒட்சிசன் அணுக்களில் இருக்கலாம் அல்லது இல்லாது இருக்கலாம். π இலத்திரன் முகிலின் நிலை மாற்றமடைவதால் C - O பிணைப்பின் இலத்திரன் முகில் மூன்று C - O பிணைப்புகளுக்கும் ஓரிடப்படாதுள்ளது. CO_3^{2-} இன் பரிவுக்கலப்புக் கட்டமைப்புக் கீழே தரப்பட்டுள்ளது. ஓரிடப்படாத இலத்திரன் முகில் C - O பிணைப்பில் புள்ளி - ஒற்றைப்பிணைப்பால் குறிப்பிடப்பட்டுள்ளது.

மூன்று பரிவுக்கட்டமைப்புக்களின் விளைவை இவ்வரைபடம் மூலம் எடுத்துக் காட்டலாம். பிணைப்பு வரிசை CO_3^{2-} இல் $1\frac{1}{2}$ ($2/3$).



உரு 2.32 (a) CO_3^{2-} அயனின் பரிவு கலப்புக்கட்டமைப்பு ஏற்றங்கள் உடன்
(b) CO_3^{2-} இன் பரிவுக் கலப்புக் கட்டமைப்பு முடிவு அணுக்களில்

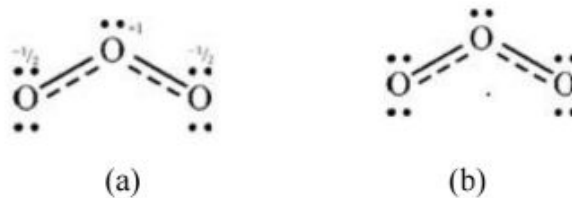
கலப்புக் கட்டமைப்பு வரைவதற்கு சமமான பரிவுக் கட்டமைப்புகள் பயன்படுத்தி இருக்கும்போது மட்டும் மேலுள்ள பரிவுக் கட்டமைப்புகளில் தனித்தனி அணுக்களில் உள்ள ஏற்றங்கள் ஏற்புடையதாகக் காணப்படும். (உதாரணம்:- O_3 , NO_3^- , CO_3^{2-} , NO_2^-) எவ்வாறாயினும் சமச்சீரற்ற மூலக்கூறுகள் / அயன்களுக்கு (உதாரணம்:- N_2O , $\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$) இது ஏற்புடையது அல்ல.

ஒசோன் மூலக்கூறின் இரு பரிவு அமைப்புகளையும் கீழே காட்டியவாறு எடுத்துக் கூறலாம்.



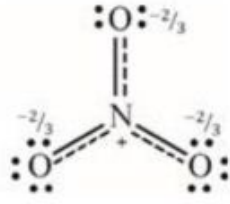
உரு 2.33 ஒசோனின் பரிவுக் கட்டமைப்புகள்

ஒசோனிலுள்ள இரு பிணைப்பு நீளங்களும் சமம். எனவே ஒசோனின் கட்டமைப்பு இருபரிவு அமைப்புகளினதும் இணைக்கப்பட்ட அமைப்பு எனக் கருதலாம். அவ்வமைப்புக் கீழே எடுத்துக் காட்டப்பட்டுள்ளது.

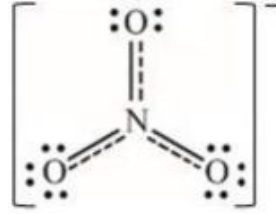


உரு 2.34 (a) O_3 இன் பரிவுக் கலப்புக் கட்டமைப்பு ஏற்றத்துடன்
(b) O_3 இன் பரிவுக் கலப்புக் கட்டமைப்பு முடிவிட / மைய அணுக்களில் ஏற்றம் இல்லாதவாறு

மற்றும் என்பனவற்றின் பரிவுக் கலப்புக் கட்டமைப்புகளும் மேலுள்ளவற்றை ஒத்தவை. இவை கீழே உரு 2.35 மற்றும் 2.36 இல் முறைப்படி தரப்பட்டுள்ளது.



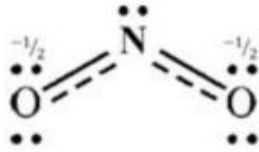
(a)



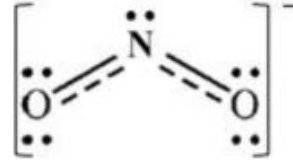
(b)

உரு 2.35 (a) NO_3^- இன் பரிவுக் கலப்புக் கட்டமைப்பு ஏற்றத்துடன்

(b) NO_3^- இன் பரிவுக் கலப்புக் கட்டமைப்பு முடிவிட / மைய அணுக்களில் ஏற்றம் இல்லாதவாறு



(a)



(b)

உரு 2.36 (a) NO_2^- இன் பரிவுக் கலப்புக் கட்டமைப்பு ஏற்றத்துடன்

(b) NO_2^- இன் பரிவுக் கலப்புக் கட்டமைப்பு முடிவிட / மைய அணுக்களில் ஏற்றம் இல்லாதவாறு

2.3.4 மூலக்கூறுகளின் முனைவுத் தன்மையில் மின்னெதிர்த் தன்மையினதும் கேத்திர கணித ஒழுங்கமைப்பினதும் தாக்கம்.

இரசாயனப் பங்கீட்டுப் பிணைப்பை உருவாக்கும் அணுக்களுக்கிடையிலான மின்னெதிர்த்தன்மை வேறுபாடு உயர்வாக இருப்பின் இலத்திரன் முகில் முனைவாக்கம் அடையும் எனக் கருதப் படுகின்றது. முனைவாக்கம் அடைந்த பங்கீட்டுப் பிணைப்பு இலத்திரன்கள் மின்னெதிர்த்தன்மை கூடிய மூலகத்திற்கு அண்மையில் காணப்படுவதற்கான நிகழ்தகவு உயர்வு ஆகும். மின்னெதிர்த்தன்மை வேறுபாடு பிணைப்பின் முனைவுத் தன்மையைத் தீர்மானிப்பதில் இன்றியமையாத பங்கு வகிக்கின்றது. ஆகவே உயர்ந்த மின்னெதிர்த்தன்மை வேறுபாடு உயர்ந்த முனைவுத்தன்மை. எவ்வாறாயினும் ஒரு முழு மூலக்கூறின் முனைவுத்தன்மையைக் கருதும்பொழுது மூலக்கூறின் வடிவமும் முக்கியத்துவம் பெறுகின்றது. உதாரணமாக $\text{C}=\text{O}$ பிணைப்பு முனைவானது, எனினும் CO_2 மூலக்கூறு முனைவற்றது. CO_2 மூலக்கூறின் நேர்கோட்டு வடிவமே இதற்குக் காரணமாக அமைகின்றது. அதேபோன்று $\text{C}-\text{Cl}$ பிணைப்பு முனைவுத்தன்மையுடையது. ஆனால் CCl_4 மூலக்கூறு முனைவற்றது, ஏனெனில் சமச்சீரான நான்முகி வடிவத்தை மூலக்கூறு கொண்டிருப்பதால் ஆகும். ஒரு மூலக்கூறில் பிணைப்புக்கள் முனைவுற்று இருப்பினும், மூலக்கூறு சமச்சீராக இருக்கும்பொழுது, அதன் இரு முனைவுத் திருப்புத்திறன் பூச்சியம் ஆகும்.

முனைவற்ற மூலக்கூறுகளுக்கு ஒரு மூலகத்தின் ஈரணு மூலக்கூறுகள் (Cl_2 , O_2 , N_2 , F_2 , etc) உதாரணமாகும். இம்மூலக்கூறுகளின் பிணைப்புக்கள் முனைவற்ற பங்கீட்டுப் பிணைப்புகளுக்கு உதாரணங்களாக அமையும்.



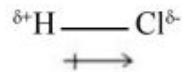
உரு 2.37 CCl_4 , CO_2 இன் மூலக்கூறுகள்

2.3.5 இருமுனைவுத் திருப்புத்திறன்

ஒற்றைப் பிணைப்பைக் கொண்டுள்ள HCl மூலக்கூறைக் கருதும்பொழுது இவ்வுணைக்கரு தெளிவாகின்றது. முனைவுத்தன்மையுடைய மூலக்கூறில், மூலக்கூறின் ஒரு முனைவில் மறை முனைவு உருவாகின்றது. நேர்முனைவு மூலக்கூறின் மற்ற முனைவில் உருவாகின்றது. அதன்படி HCl மூலக்கூறின் எதிர்முனைவு Cl அணுவிலும், நேர்முனைவு H அணுவிலும் உள்ளது. முனைவு பிணைப்புகளைக் குறிப்பதற்கான முறை கீழே தரப்பட்டுள்ளது.



இருமுனைவானது ' $\longleftrightarrow$ ' இவ்வாறு குறிக்கப்படும். அம்புக்குறியின் தலை மூலக்கூறின் எதிர் முனைவை நோக்கியுள்ளது.



உதாரணம்:



ஒரு மூலக்கூறில் நிலையான இருமுனைவு இருப்பின் ஒவ்வொரு முனைவிலும் காணப்படும் முனைவாக்கத்தின் பருமன் சமனாக இருப்பதால் மின்சார்பாக நடுநிலையான மூலக்கூறு உருவாகின்றது. இருமுனைவுத் திருப்புத்திறன் முனைவின் ஏற்றத்தின் பருமனை (ஏற்றப் பிரிப்பை) இருஅணுக்களுக்கிடையிலான தூரத்தாற் பெருக்குவதன் மூலம் கணிக்கப்படுகின்றது. HCl மூலக்கூறைக் கருதும்பொழுது சமச்சீரற்ற இலத்திரன் முகில் காணப்படுவதால் ஒரு முனைவு H அணுவிலும் மற்ற முனைவு Cl அணுவிலும் அமைந்துள்ளது. HCl அணுவின் இரு முனைவுத் திருப்புத்திறனைப் பின்வருமாறு கணிப்பிடலாம்.

$$\text{இருமுனைவுத் திருப்புத்திறன் } (\mu) = \text{முனைவின் ஏற்றம் } (\delta) \times \text{பிணைப்பு நீளம் } (r)$$

மேலுள்ள சமன்பாட்டில் δ கள் அலகு கூலோம் (C) மற்றும் r இன் அலகு மீற்றர் (m). ஆகவே இருமுனைவுத் திருப்பத்தின் அலகு Cm ஆகும்.

மூலக்கூறுகளின் இருமுனைவுத்திறன் / இருமுனைவுத் திருப்பம் (இது ஒரு காவிக் கணியமாகும். இது பருமன், திசை இரண்டையும் கொண்டவை.) வழமையாக டெபை (debye) (D) எனும் அலகில் குறிப்பிடப்படும். 1 D ஆனது 3.34×10^{-30} Cm இற்குச் சமமானது.

$$1 \text{ D} = 3.34 \times 10^{-30} \text{ Cm}$$

2.3.6 மின்னெதிர் தன்மையின் பருமனில் தாக்கத்தை ஏற்படுத்தும் காரணிகள்

மூலகமொன்றின் மின்னெதிர் இயல்பு, மூலகம் உள்ள சூழலினால் சிறிதளவு மாற்றமடையக் கூடியவாறு தங்கியுள்ளது. இருப்பினும் வழமை போன்று இம்மாற்றம் ஒரு மாறிலியாக எடுத்துக் கொள்ளப்படும். மின்னெதிர் இயல்பின் ஆதிக்கம் செலுத்தும் நான்கு முக்கிய காரணிகள் கீழே தரப்பட்டுள்ளன.

- **கலப்பு:**

- s பண்பு கூடும்போது மின்னெதிர் இயல்பு கூடும்.
- C இன் மின்னெதிர் இயல்பு: $C(sp^3) < C(sp^2) < C(sp) < C$
- எனவே $\text{CH}_4, \text{C}_2\text{H}_4$ மற்றும் C_2H_2 இல் C அணுக்களின் மின்னெதிர் இயல்பு அதிகரிக்கும் ஒழுங்கு $\text{CH}_4 < \text{C}_2\text{H}_4 < \text{C}_2\text{H}_2$ ஆகும்.

- **ஏற்றம்:**

உதாரணம்:- N இன் மின்னெதிர் இயல்பு: $\text{NH}_2^- < \text{NH}_3 < \text{NH}_4^+$

இங்கு எல்லா N அணுக்களும் sp^3 கலப்புடையன. மின்னெதிர் இயல்பு $\text{N}^- < \text{N} < \text{CN}^+$; உயர் நேர் ஏற்றத்தைக் கொண்ட அணு, நடுநிலை அணுவைக் காட்டிலும் கூடிய மின்னெதிர் இயல்பைக் கொண்டிருக்கும். நடுநிலை அணுவானது, மறை ஏற்றம் கொண்ட அசைவை மின்னெதிர் இயல்பைக் கொண்டிருக்கும்.

- **ஒட்சியேற்ற எண்:**

$\text{H}_2\text{S}, \text{SO}_3^{2-}$ மற்றும் SO_4^{2-} இல் S அணுக்கள் யாவற்றினதும் கலப்பு sp^3 மற்றும் S அணுக்களில் உள்ள மின்னெற்றம் பூச்சியமாகும். S இன் கலப்பு மற்றும் ஏற்றம் என்பன மேற்கூறப்பட்ட எல்லா இனங்களிலும் சமமானவை. எனவே S இன் மின்னெதிர் இயல்பு மேலுள்ள இனங்களில் ஒட்சியேற்ற எண்ணினால் தீர்மானிக்கப்படும். $\text{H}_2\text{S}, \text{SO}_3^{2-}$ மற்றும் SO_4^{2-} இல் S இன் ஒட்சியேற்ற எண்கள் முறையே -2, +4 மற்றும் +6 ஆகும். நடுநிலை அசைவுடன் ஒப்பிடும் போது உயர் நேர் ஏற்றம் கொண்ட அணு கூடிய மின்னெதிர் இயல்பைக் கொண்டிருக்கும். எனவே S இன் மின்னெதிர் இயல்பு $\text{H}_2\text{S} < \text{SO}_3^{2-} < \text{SO}_4^{2-}$ ஆகக் காணப்படும்.

- மூலக்கூறில் கருதப்படும் அணுவுடன் இணைக்கப்பட்டுள்ள ஏனைய அணுக்களின் இயல்புகள்

உதாரணம்:-

C இன் மின்னெதிர் இயல்பு CF_4 இல் உயர்வாகக் காணப்படும். CCl_4 உடன் ஒப்பிடும்போது உயர் மின்னெதிர் இயல்புள்ள புளோரின் அணு நான்கு புளோரின் அணுக்கள், நான்கு குளோரின் அணுக்கள் இணைந்துள்ள காபன் அணுவைக் காட்டிலும் கூடியளவு நேர் ஏற்றம் கொண்டதாக மாற்றும். இதனால் புளோரின் அணுக்கள் இணைந்துள்ள காபன் அணுவின் மின்னெதிர் இயல்பு உயர்த்தப்படும்.

ஒத்த மூலகத்தின் ஒரு அணு, வேறுபட்ட மூலக்கூறில் காணப்படும்போது, அவ்வணுவிற்கு மேற்படி விதிமுறைகளைப் பிரயோகிக்கும்போது அணுவின் ஏற்றத்தைக் காட்டிலும், அதன் கலப்பிற்கு முன்னுரிமை வழங்கப்படல் வேண்டும். அணுக்களின் கலப்பு வகை சமமானவை எனில் ஏற்றத்தின் அடிப்படையில் முன்னுரிமை வழங்கப்படல் வேண்டும். உதாரணமாக NH_3 , NH_4^+ என்பனவற்றில் நைதரசன் அணுவின் கலப்பு ஒத்தவை. எனவே நைதரசன் அணுவின் மின்னெதிர் இயல்பு ஏற்றத்தின் அடிப்படையில் தீர்மானிக்கப்படல் வேண்டும். NH_3 இல் நைதரசன் அணு நடுநிலை (ஏற்றம்)யானது. NH_4^+ கள் நைதரசன் அணு நேர் ஏற்றம் கொண்டது. மின்னெதிர் இயல்பு கொண்டதாகக் காணப்படும்.

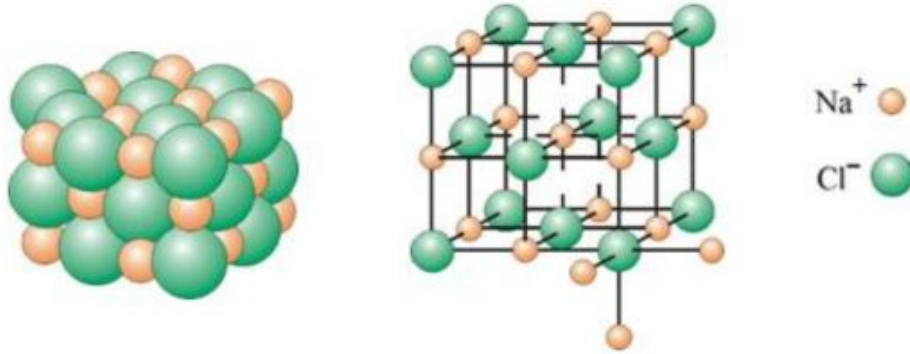
இதனைப் போன்று ஒரு அணுவின் கலப்பு மற்றும் ஏற்றம் என்பன சமமானவை எனின், அடுத்த ஒட்சியேற்ற எண்ணைக் கருத முடியும். உதாரணமாக CH_3F மற்றும் CH_4 என்பனவற்றில் கலப்பு மின்னேற்றங்கள் என்பன சமமானவை. CH_3F , CH_4 இல் காபனின் ஒட்சியேற்ற எண்கள் முறையே -2 உம் -4 உம் ஆகும். எனவே C அணுவின் மின்னெதிர் இயல்பு ஒட்சியேற்ற எண்ணை அடிப்படையாகக் கொண்டு ஒப்பிட முடியும். எனவே CH_3F இல் உள்ள காபன் அணுவின் மின்னெதிர் இயல்பு (கூடிய ஒட்சியேற்ற எண்ணைக் கொண்டது). CH_4 இல் உள்ள காபன் அணுவின் மின்னெதிர் இயல்பிலும் (குறைந்த ஒட்சியேற்ற எண்ணைக் கொண்டது) உயர்வாகக் காணப்படும்.

கலப்பு ஏற்றம் மற்றும் ஒட்சியேற்ற எண் சமமாகவுள்ளபோது மற்றைய அணுக்களின் விளைவைக் கருத முடியும். உதாரணமாக $CHCl_3$, CHF_3 என்பனவற்றில் காபன் அணுவின் மின்னெதிர் இயல்பை அவற்றுடன் இணைந்துள்ள மற்றைய அணுக்கள் சார்பாகத் தீர்மானிக்க முடியும். (கலப்பு ஏற்றம், ஒட்சியேற்ற எண் இவ்விரு காபன் அணுக்களுக்கும் சமமானவை.) எனவே இங்கு CHF_3 இல் உள்ள காபன் அணு $CHCl_3$ இல் உள்ள காபன் அணுவிலும் கூடிய மின்னெதிர் இயல்பு கொண்டது.

2.4 அயன் பிணைப்பு / அயன் இடைத்தாக்கம்

நேர் அயன்களுக்கும் மறை அயன்களுக்குமிடையில் ஏற்படும் நிலைமின்னியற் கவர்ச்சியினால் அயன் பிணைப்பு உருவாகின்றது. இங்கு நேர் அயன்களும் எதிர் அயன்களும் நிலையான குறித்த ஒழுங்கமைப்பில் அடுக்கப்பட்டு திண்ம நிலையில் 'சாலக கட்டமைப்பு' என்று அழைக்கப்படும் அமைப்பை உருவாக்கும். இங்கு ஒவ்வொரு நேரயனும் குறித்த எண்ணிக்கையான

எதிர் ஏற்றம் கொண்ட அயன்களால் சூழப்பட்டிருக்கும். அத்துடன் மறுதலையாகவும் காணப்படும். NaCl சாலகத்தில் ஒவ்வொரு Na^+ அயனும் 6 Cl^- அயன்களாலும் ஒவ்வொரு Cl^- அயனும் 6 Na^+ அயன்களாலும் சூழப்பட்டிருக்கும்.



உரு 2.38 NaCl சாலக கட்டமைப்பு

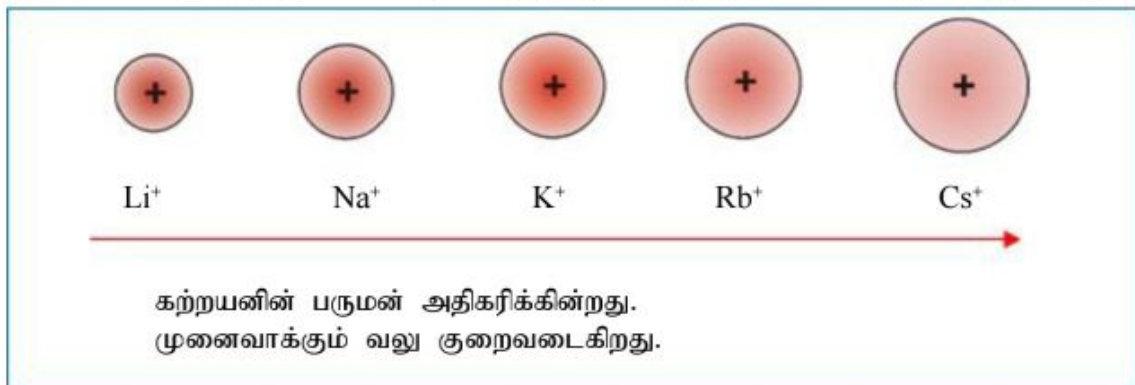
அயன் சாலகத்தில் கற்றயன்கள் தான் சிறியவையாக இருப்பதால் அவற்றின் இலத்திரன் முகில் கருவோடு வன்மையாக இணைக்கப்பட்டுள்ளது. அயன் சாலகத்தில் அனயன்கள் பெரிதாக இருப்பதால் அவற்றின் வெளியோட்டு இலத்திரன்கள் கற்றயனுடன் ஒப்பிடும்போது தளர்வாகப் பிணைக்கப்பட்டுள்ளது. வெளி மின்புலங்களால் அன்னயன்களின் இலத்திரன் முகிலின் வடிவம் இலகுவாக மாற்றப்படக்கூடியது. நேர் மின்புலம் செல்வாக்குச் செலுத்தும்போது பெரிய அன்னயன்களின் இலத்திரன் முகிலின் வடிவம் இலகுவாகப் பாதிக்கப்படும். ஒரு கற்றயன் மின்புலத்தின் வலிமையினால் அன்னயன் ஒன்றின் இலத்திரன் முகிலைத் தன்னை நோக்கி இழுக்கும் ஆற்றல் உடையது. இவ் ஆற்றல் முனைவாக்கும் வலு என அழைக்கப்படும். ஒரு அன்னயனை நோக்கி கற்றயன் செல்லும்போது அதன் நேர் மின்புலத்தினால் கோளவடிவமான அன்னயனின் இலத்திரன் முகில் முட்டை வடிவமாக மாற்றமடையும் திறன் முனைவாகும் திறன் எனப்படும்.

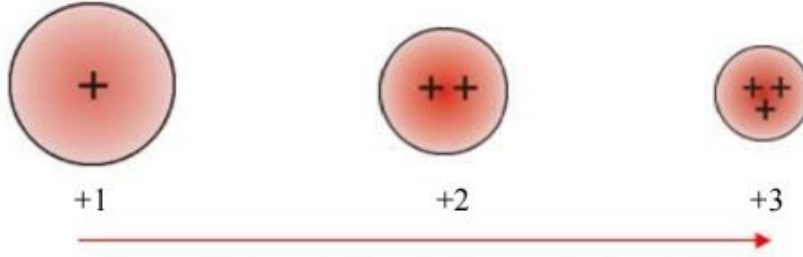


முனைவாக்கம் அற்ற நிலை
இலட்சிய நிலை

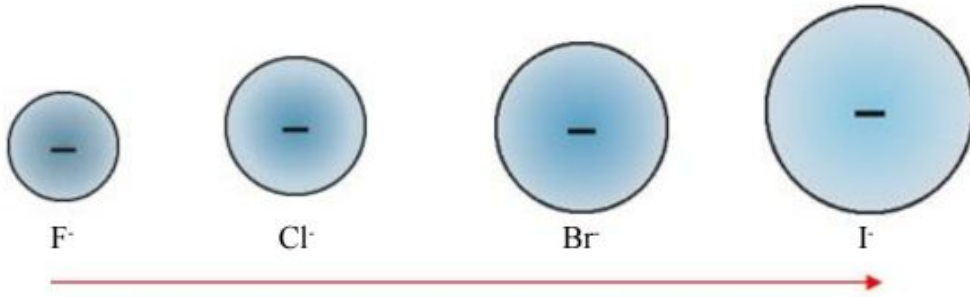
முனைவாக்கப்பட்ட நிலை

கற்றயனின் முனைவாக்கும் வலு, அன்னயனை முனைவாக்கப் போதுமானதன்று கற்றயன் சிறிதாகவும் உயர் ஏற்றமும் உள்ளதாக இருக்கும்பொழுது முனைவாக்கும் வலு உயர்வு.

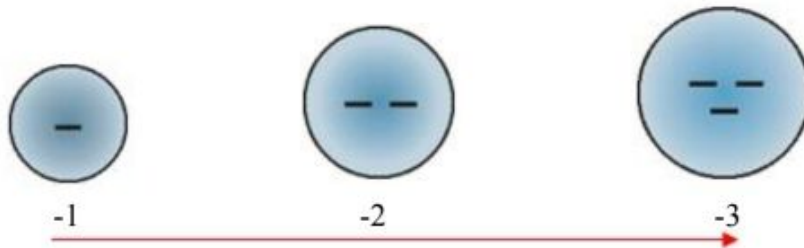




கற்றயனின் ஏற்றம் அதிகரிக்கின்றது.
 கற்றயனின் பருமன் குறைகின்றது.
 ஏற்ற அடர்த்தி அதிகரிக்கின்றது.
 முனைவாக்கும் வலு அதிகரிக்கின்றது.



அன்னயனின் பருமன் அதிகரிக்கின்றது.
 முனைவாக்கும் திறன் அதிகரிக்கின்றது.

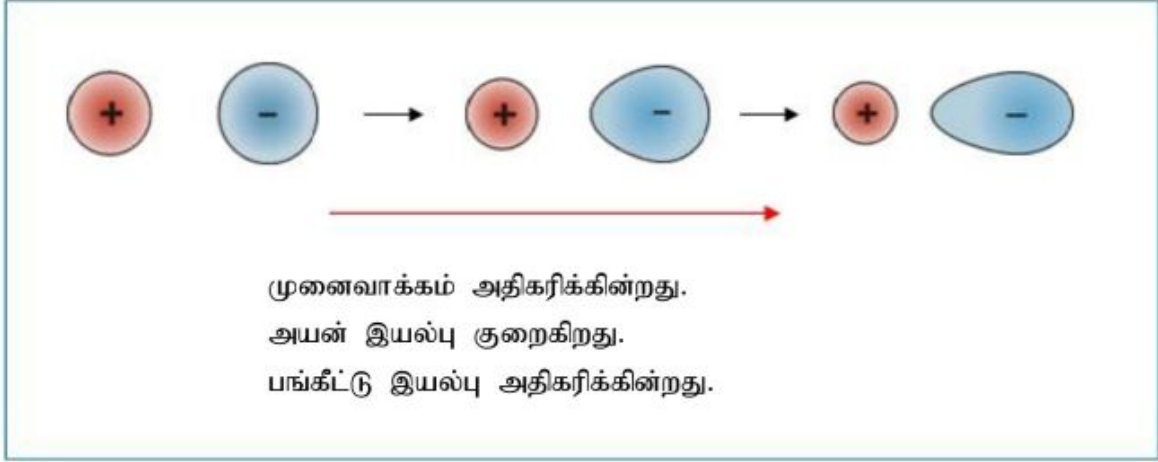


அன்னயனின் ஏற்றம் அதிகரிக்கின்றது.
 அன்னயனின் பருமன் அதிகரிக்கின்றது.
 முனைவாகும் வலு அதிகரிக்கின்றது.

அயன் இயல்பளவு, பங்கீட்டு இயல்பளவு ஆகியன முனைவாக்கத்தில் தங்கியுள்ளது. (முனைவாக்கும் திறனிலும் முனைவாகும் திறனிலும்)

முனைவாக்கம் பின்வருவனவற்றால் அதிகரிக்கும்.

1. கற்றயனின் உயர் ஏற்றமும் சிறிய பருமனும்
2. அன்னயனின் உயர் ஏற்றமும் பெரிய பருமனும்



2.5 உலோகப் பிணைப்புகள்

பொதுவாக எளிய பங்கீட்டுப் பிணைப்பைக் கொண்ட சிறிய மூலக்கூறுகள் அயன் சேர்வைகளுடன் ஒப்பிடும்பொழுது தாழ் கொதிநிலையுடையவை. அயன் திண்மங்கள் மின்னைத் திண்ம நிலையில் மின்கடத்தும் திறன் அற்றவை. ஆனால் திரவநிலையில் மின்னைக் கடத்துபவை. வெவ்வேறு உலோகங்களின் உருகுநிலை விஸ்தாரமாகப் பரவியுள்ளன. உலோகங்கள் திண்மம், திரவம் என்ற நிலையுடன் சம்பந்தப்படாத நன்மின்கடத்திகள். உதாரணமாக இரசத்தின் (Hg) உருகுநிலை தாழ்வானது. (-39°C). தங்குதனின் உருகுநிலை 3410°C . எல்லாக் கருத்தாக்கங்களிலும் திரவசோடியம் அதன் உயர் வெப்பக் கடத்தும் கொள்ளளவு காரணமாகக் குளிரூட்டியாகப் பயன்படுகிறது. உலோகங்களுக்கிடையில் காணப்படும் இவ்வேறுபாட்டைப் பங்கீட்டு, அயன் பிணைப்புகளின் மாதிரியுருக்களைக் கொண்டு விளக்கமுடியாது.

உலோகப்பிணைப்பின் மாதிரியுரு Paul Kart Ludwig Drude னாலும் Hendrik Lorentz னாலும் வாயுக்களின் நடத்தையின் இயக்க மாதிரியுருவை அடிப்படையாகக் கொண்டு பிரேரிக்கப்பட்டது. இம்மாதிரியுருவின்படி உலோக அணுக்கள் வலுவளவு ஓட்டு இலத்திரன்களை உலோகப் பிணைப்பை உருவாக்குவதற்கு இழப்பதால் நேர் ஏற்றமுள்ள அயன்களை உருவாக்குகின்றன. ஆகவே பெரும் எண்ணிக்கையான அணுக்களால் விடுவிக்கப்படும் வலுவளவு ஓட்டு இலத்திரன்களால் மாபெரும் இலத்திரன் முகில் உருவாக்கப்படுகின்றது. இவ்விலத்திரன் முகில்நேர் அயன்களுக்கிடையில் உருவாகும் தள்ளுகை விசையைச் சமாளித்து உலோக அயன்களைச் சாலக அமைப்பில் வைத்திருக்கின்றது. நேர் அயன்களால் ஆன சாலகத்தை நிலையாக்குவதற்காக இலத்திரன்கள் தொடர்ந்து சாலக கட்டமைப்பில் அசைந்த வண்ணம் இருக்கும். நேர்அயன்களுக்கும்

இலத்திரன் முகிலிற்கும் இடையிலான நிலைமின் கவர்ச்சி விசை உலோகப் பிணைப்பு எனப்படும். உலோகப் பிணைப்பின் பலம் முதன்மையாக மூன்று முக்கிய காரணிகளில் தங்கியுள்ளது.

- உலோகப் பிணைப்பை ஏற்படுத்துவதற்கு அணுக்களால் வழங்கப்படும் இலத்திரன்களின் எண்ணிக்கை.

உதாரணமாகச் சோடியம் அணு வலுவளவு ஒட்டில் ஒரு இலத்திரனை மட்டும் கொண்டிருப்பதால் ஒரு இலத்திரனை மட்டும் உலோகப் பிணைப்பிற்கு வழங்கக்கூடியதாக உள்ளது. ஆனால் மகனீசியம் இரு இலத்திரன்களை உலோகப்பிணைப்பிற்கு வழங்குகின்றது. அணுவினால் உலோகப் பிணைப்பிற்கு வழங்கப்படும் இலத்திரன்களின் எண்ணிக்கை அதிகரிக்க உலோகப் பிணைப்பின் வன்மை அதிகரிக்கின்றது.

- அயன்ஆரை

கற்றயன் ஆரை அதிகரிக்க இலத்திரன் முகிலின் இலத்திரன் அடர்த்தி குறைகின்றமையால் உலோகப் பிணைப்பு நலிவடைகின்றது

- அயன் தன்மை

இது எந்தளவிற்கு வலுவளவு ஒட்டு இலத்திரனை ஒரு உலோகப் பிணைப்பிற்கு இலத்திரனை வழங்குகின்றது என்பதைக் கருதுகின்றது. உதாரணமாகச் சோடியம் வலுவளவு ஒட்டில் உள்ள இலத்திரனை முற்றாக உலோகப் பிணைப்பிற்கு வழங்குகின்றது. எவ்வாறாயினும் அயனாக்கற் சக்தி அதிகரிக்க உலோகப் பிணைப்பை உருவாக்க இலத்திரனை விடுவிக்கும் நிகழ்தகவு குறைகின்றது. இக்காரணி கார உலோகங்கள், காரமண் உலோகங்களைப் பாதிப்பதில்லை. ஆனால் தாண்டல் உலோகங்களைக் கருதும்போது இது முக்கியத்துவம் வகிக்கின்றது.

2.6 துணை இடைத்தாக்கங்கள் / துணை இடைக் கவர்ச்சிகள்

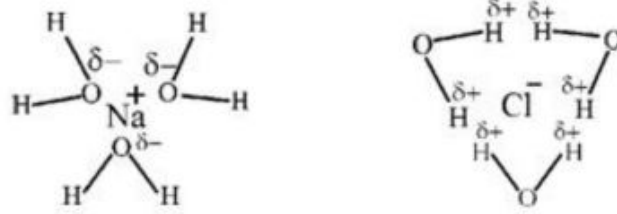
ஒரு மூலக்கூறில் உள்ள அணுக்கள் ஒரு குலைபோன்று வன்மையான பங்கீட்டுப்பிணைப்பால் பிணைக்கப்பட்டுள்ளன. ஆனால் சில சமயங்களில் மூலக்கூறுகள் நலிந்த துணை இடைத் தாக்கத்தால் ஒன்றாகப் பிணைக்கப்பட்டுள்ளன. அவைகள் பொதுவாக மூலக்கூற்றிடைக் கவர்ச்சி விசை அல்லது மூலக்கூற்றிடைப் பிணைப்பாகக் காணப்படும்.

- அயன் இருமுனைவு இடைத்தாக்கங்கள்
- இருமுனைவு - இருமுனைவு இடைத்தாக்கங்களும் , ஐதரசன் பிணைப்பும்
- அயன் - தூண்டப்பட்ட இருமுனைவு இடைத்தாக்கங்கள்
- இருமுனைவு - தூண்டப்பட்ட இருமுனைவு இடைத்தாக்கங்கள்.
- கலவை இடைக் கவர்ச்சி (இலண்டன் விசைகள்)

வண்டர் வாலிசுவின் கவர்ச்சி விசைகள் மூலக்கூற்றுத் துணிக்கைகள் அல்லது ஒரே மூலக்கூற்றுத் துணிக்கைகளைக் கொண்ட கூட்டங்களுக்கிடையிலான கவர்ச்சி அல்லது தள்ளுதலை விசைகளாகும். இது இருமுனைவு-இருமுனைவு இடைத்தாக்கம் இருமுனைவு-தூண்டப்பட்ட இருமுனைவு இடைத்தாக்கம், லண்டன் (தற்காலிக தூண்டப்பட்ட இருமுனைவு-தூண்டப்பட்ட இருமுனைவு) இடைத்தாக்க விசைகளை உள்ளடக்கும்.

அயன் இருமுனைவு இடைத்தாக்கங்கள்

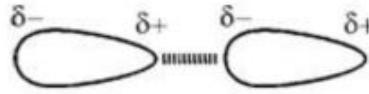
NaCl போன்ற அயன் சேர்வைகள் நீரில் Na^+ அயன்களுக்கும் Cl^- அயன்களுக்கும் நீர் மூலக்கூறுகளுக்கும் இடையில் ஏற்படும் துணை இடைத்தாக்கத்தினால் கரைகின்றது. ஒரு அயன் சேர்வையில் உள்ள கற்றயன் (உதாரணம்: NaCl இல் Na^+) நீரின் பகுதி எதிர் முனைவாக்கமுடைய அணுவுடன் (நீரில் உள்ள O) இடைத்தாக்கமடைகின்றது. அத்துடன் மறுதலையாக அன்னயனும் அயன் இருமுனைவுத்தாக்கத்தை ஏற்படுத்தும். ஆகவே NaCl நீர்க்கரைசலில் உள்ள கற்றயன் Na^+ உம் (Cl^-) அன்னயனும் நீர் மூலக்கூறுகளால் சூழப்படுவதால் ஏற்படும் அயன் - இருமுனைவு இடைத்தாக்கத்தினால் கரைக்கப்படுகின்றது.



உரு 2.39 அயன் இருமுனைவு இடைத்தாக்கம் நீருக்கும் NaCl இன் அயன்களுக்கும்

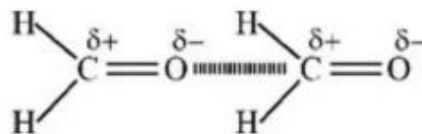
இருமுனைவு - இருமுனைவு இடைத்தாக்கங்கள்

நிலையான இருமுனைவுடைய மூலக்கூறுகளுக்கிடையேயான இடைத்தாக்கங்கள் இருமுனைவு-இருமுனைவு இடைத்தாக்கங்கள் என அழைக்கப்படும். இது தெளிவாகப் பின்வரும் உருவில் எடுத்துக் காட்டப்பட்டுள்ளது. இவ்வகைக் கவர்ச்சி விசையின் பருமன் 0.5 - 15 kJ/mol மேலும் இவ்விசையின் பருமன் ஐதரசன் பிணைப்பின் வன்மையை விடத் தாழ்வானது.



உரு 2.40 இருமுனைவு - இருமுனைவு இடைத்தாக்கம்

δ^+ ஏற்றமுள்ள முனைவிற்கும் δ^- ஏற்றமுள்ள முனைவிற்குமிடையேயுள்ள கவர்ச்சி விசை குறிப்பாக இருமுனைவு - இருமுனைவு இடைத்தாக்கம் எனப்படும். இரு மெதனால் (போமல்டிகைட்டு) மூலக்கூறுகளுக்கிடையேயான இடைத்தாக்கம் இருமுனைவு - இருமுனைவு இடைத்தாக்கமாகக் கருதலாம்.

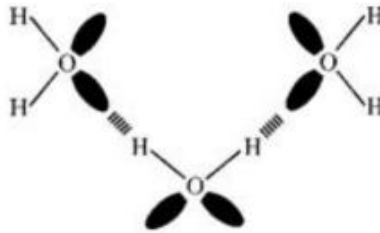


உரு 2.41 மெதனலில் இருமுனைவு - இருமுனைவு இடைத்தாக்கம்

ஐதரசன் பிணைப்புகள்

இது ஒரு வகையான இருமுனைவு - இருமுனைவுக் கவர்ச்சி இடைத்தாக்கம், அத்துடன் மற்ற வகையான இருமுனைவு இருமுனைவு இடைத்தாக்கங்களிலும் வன்மையானது. பொதுவாக ஐதரசன் பிணைப்பின் பருமன் 4 - 40 kJ/mol வீச்சில் காணப்படும்.

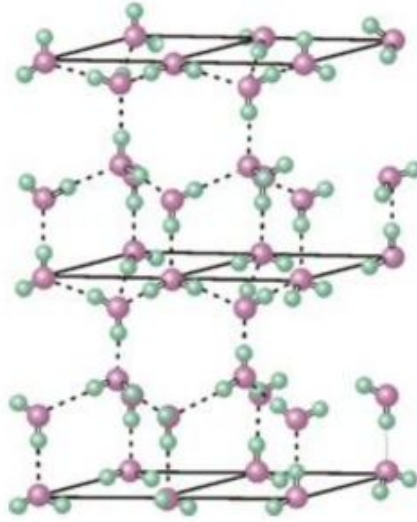
ஐதரசன் அணு ஒன்று N, O அல்லது F அணுவுடன் பிணைப்பில் ஈடுபட்டிருக்கும் பொழுது ஐதரசன் அணுவின் பகுதி ஏற்றம் (δ^+) வேறொரு மூலகத்துடன் பிணைப்பில் ஈடுபட்டிருக்கும் பொழுது பெறும் பகுதி ஏற்றத்துடன் ஒப்பிடும் பொழுது மிகவும் உயர்வானதாகவிருக்கும். இங்கு H உயர் பகுதியேற்றத்தை அடைவதற்கான காரணம் ஐதரசனுக்கும் மின்னெதிர்த்தன்மை கூடிய (N, O, F) ஆகிய அணுக்களுக்கிடையிலான மின்னெதிர்த்தன்மை வேறுபாடு உயர்வாக இருத்தல் அத்துடன் ஐதரசன் அணு மிகச் சிறிய அணுவாக இருப்பதால் வன்மையான நிலைமின்புலம் உருவாக்கப்படும். (δ^+) பகுதி நேர்ஏற்றத்தையுடைய ஐதரசன் அணுவிற்கும் பகுதி (δ^-) ஏற்றத்தையுடைய மின்னெதிர்த்தன்மை உயர்வான (N, O, F) அணுக்களின் தனிச்சோடி இலத்திரன்களுக்குமிடையிலான இடைத்தாக்கம் ஐதரசன் பிணைப்பு எனப்படும். (δ^-) பகுதி ஏற்றமுடைய மின்னெதிரான அணு ஐதரசன் அணுவுடன் பிணைப்பில் ஈடுபட்டிருக்கவேண்டும் என்பது கட்டாயமானதன்று எந்த ஒரு மூலகத்துடனும் பிணைப்பில் ஈடுபட்டிருக்கலாம்.



உரு 2.42 நீரில் ஐதரசன் பிணைப்புகள்

மேலே உள்ள உருவில் ஓர் நீர் மூலக்கூறு நான்கு வேறு நீர் மூலக்கூறுகளுடன் ஐதரசன் பிணைப்பில் ஈடுபட்டுள்ளது. ஒரேவகையான மூலக்கூறுகளுக்கிடையிலான ஐதரசன் பிணைப்புக்கு உதாரணம் H_2O , NH_3 , HF .

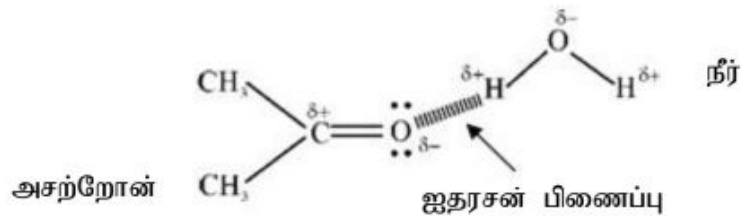
முனைவுத்தன்மையுடைய மாதிரியுரு மூலக்கூற்றுப் பதார்த்தங்களின் இயல்புகளுடனும் நடத்தையுடனும் பொருந்துகிறது. உதாரணம் நீர். பனிக்கட்டி நீரிலும் 9% அடர்த்தி குறைந்ததாக இருப்பதால் நீரில் மிதக்கிறது. நீரைக் குளிரூட்டுவதன் மூலம் வெப்பசக்தியை அகற்றும் பொழுது மூலக்கூறுகளின் இயக்கசக்தி குறைவடைவதன் காரணமாக நீர் 0°C யில் உறைகின்றது. நீர் மூலக்கூறுகளின் இயக்கசக்தி குறைவடைதல் ஒவ்வொரு நீர் மூலக்கூறினையும் சூழ்ந்து ஐதரசன் பிணைப்பு உண்டாவதற்கான மீள்தகவினை அதிகரிக்கின்றது. 0°C க்கு குளிரூட்டி வெப்பசக்தியை அகற்றும்போது நீர் மூலக்கூறுகள் நெருக்கமாக வருவதால் ஐதரசன் பிணைப்பு வன்மையடைகிறது. ஓர் நீர் மூலக்கூறைச் சூழ உள்ள ஐதரசன் பிணைப்புகள் அதிகரிக்கின்றது.



உரு 2.43 பனிக்கட்டியில் நீர்மூலக்கூறுகளின் ஒழுங்காக்கம்

ஒவ்வொரு நீர் மூலக்கூறும் இரு ஐதரசன் அணுக்களை உபயோகித்து இரு ஐதரசன் பிணைப்பை உருவாக்குவதுடன் ஒட்சிசன் அணுவில் உள்ள இரு தனிச்சோடி இலத்திரன்களால் அருகேயுள்ள இரு நீர் மூலக்கூறுகளின் இரு ஐதரசன் அணுக்களைக் கவர்ந்து மேலும் இரு ஐதரசன் பிணைப்பை உருவாக்கும். ஒவ்வொரு நீர் மூலக்கூறையும் சூழ உள்ள நான்கு ஐதரசன் பிணைப்பும் நான்முகி வடிவில் நெருக்கமடையச் செய்கிறது. ஓர் ஒழுங்கு முறையில் நீர் மூலக்கூறுகள் பனிக்கட்டிகள் ஒழுங்குபடுத்தப்படும் போது திரவ நீரில் உள்ள சுயாதீன வெளியிலும் கூடிய அளவு சுயாதீன வெளியை (free space) அடைப்பதால் பனிக்கட்டி 9% வெளியை எடுக்கின்றது. பல எண்ணிக்கையான பளிங்குரு அமைப்புகள் பனிக்கட்டிக்கு இருப்பதுடன் பளிங்குரு கட்டமைப்பின் தன்மை அதன் சூழ்நிலையில் தங்கியுள்ளது.

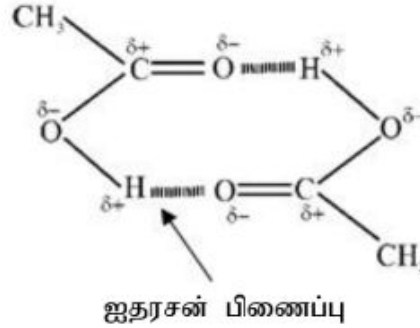
எவ்வாறாயினும் வேறுபட்ட மூலக்கூறுகளுக்கிடையிலான இடைத்தாக்கத்தின் போதும் ஐதரசன் பிணைப்பு உருவாகலாம். அசற்றோன், நீர் கலவையில் ஐதரசன் பிணைப்புக் காணப்படும். இது கீழே குறித்துக் காட்டப்பட்டுள்ளது.



உரு 2.44 அசற்றோன் / நீர் கலவையில் ஐதரசன் பிணைப்பு

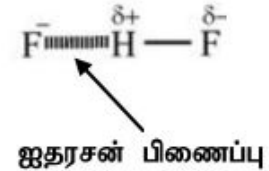
கீழே குறித்துக் காட்டியது போன்று காபொட்சிலிக்கமிலத்தில் காபொட்சிலிக் கூட்டத்தின் ஐதரசன் அணுவிற்கும் வேறொரு காபொட்சிலிக் அமிலத்தில் உள்ள காபைனைல் கூட்டத்தில் (C=O) உள்ள ஒட்சிசன் அணுவிற்குமிடையே ஐதரசன் பிணைப்பு உருவாதல் சாத்தியம். (δ^-) ஏற்றத்தையுடைய உயர்மின்னெதிர்த்தன்மையுடைய மூலக அணு H அணுவுடன் பிணைப்பில்

ஈடுபட்டிருத்தல் அவசியமன்று. ஆனால் (δ^-) பகுதி எதிர் ஏற்றம் ஓட்சிசன் அணு காபன் அணுவுடன் பிணைப்பில் ஈடுபட்டிருக்கும்பொழுதும் பெறப்படும். உதாரணம்: அதாவது அசற்றிக்கமில்லம் போன்றவற்றில் பெறப்படும்.



உரு 2.45 அசற்றிக்கமில்லத்தில் ஐதரசன் பிணைப்புக்கள்

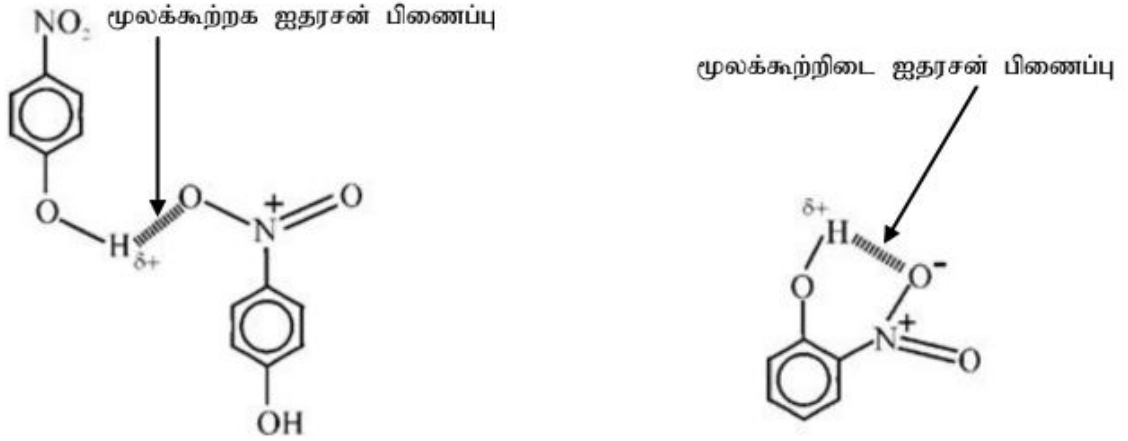
தூய HF இலும் ஐதரசன் பிணைப்பு காணப்படும். HF இல் பகுதி எதிர் ஏற்றத்தையுடைய அயன் $F^{\delta-}$ க்கும் பகுதி நேர் ஏற்றமுடைய ஐதரசன் புளோரைட்டு மூலக்கூறின் நேர் ஏற்றத்திற்கு மிடையில் $H^{\delta+}$ ற்குமிடையில் ஐதரசன் பிணைப்பு உருவாகும். ஐதரசன் பிணைப்பு தூய HF இல் மூன்று பௌதிக நிலைகளிலும் பெறப்படும். கீழே உள்ள உரு தூய HF இல் மூலக்கூற்று ஒழுங்கமைப்பைக் காட்டுகின்றது.



உரு 2.46 (a) HF இல் ஐதரசன் பிணைப்புக்கள்

(b) NaF, HF கலவையில் ஐதரசன் பிணைப்பு

இரு மூலக்கூறுகளுக்கிடையில் ஐதரசன் பிணைப்பு உருவாகும்பொழுது அது மூலக்கூற்றிடை ஐதரசன் பிணைப்பு எனப்படும். ஒரு மூலக்கூறில் உள்ள ஐதரசனுக்கும் அதே மூலக்கூறில் உள்ள மின் எதிரான அணுவிற்குமிடையில் ஐதரசன் பிணைப்பு உருவாகும்பொழுது அது மூலக்கூற்றாக ஐதரசன் பிணைப்பு எனப்படும். ஒதோ-நைத்திரோ பீனோதலிலும் பரா நைத்திரோ பீனோலிலும் காணப்படும் ஐதரசன் பிணைப்பு கீழே குறித்துக் காட்டப்பட்டுள்ளது. இது மூலக்கூற்றிடை ஐதரசன் பிணைப்பிற்கும் மூலக்கூற்றாக ஐதரசன் பிணைப்பிற்கும் இடையிலான வேறுபாட்டை எடுத்துக் காட்டுகின்றது.



உரு 2.47 O நைத்திரோ பீனோலிலும் P - நைத்திரோ பீனோலிலும் H - பிணைப்புக்கள்

சிலவற்றில் மின் எதிரான மூலகமாகக் காணப்படும் பொழுது ஐதரசன் பிணைப்பின் வன்மை தாழ்வாக உள்ளது. ஆகவே வேறொரு விதியில் Cl உம் உள்வாங்கப்பட்டுள்ளது. அது FONCl விதி எனப்படும். பொதுவாக வன்மையான ஐதரசன் பிணைப்பு முனைவாக்கப்பட்ட ஐதரசன் அணு δ^+ க்கும் முனைவாக்கப்பட்ட F, O அல்லது N அணுவிற்குமிடையில் அவதானிக்கப்பட்டது.

அயன் - தூண்டப்பட்ட இருமுனைவு இடைத்தாக்கங்கள்

(I_2) அயனின் முனைவற்ற மூலக்கூறு நீரில் கரையமாட்டாது. எவ்வாறாயினும் I_2 , KI கரைசலில் கரைகின்றது. இவ்வவதானத்தை அயன் - தூண்டப்பட்ட இருமுனைவு இடைத்தாக்கத்தினால் மாத்திரம் விளக்கமுடியும். இம்மாதிரியில் அயடைட்டு அயனுக்கும் (I^-) அயனின் மூலக்கூறுடன் இடைத்தாக்கமுற்று I_2 மூலக்கூறில் இருமுனைவைத் தூண்டுகின்றது. தூண்டப்பட்ட இரு முனைவுக்கும் இடைத்தாக்கம் உருவாகின்றது. இவ்விடைத்தாக்கம் I^- அயன் I_2 மூலக்கூறுடன் இணைந்து I_3^- அயன் உருவாவதற்கு உதவுகின்றது.



அயன் - தூண்டப்பட்ட இருமுனைவு இடைத்தாக்கம்

உரு 2.48 அயன் - தூண்டப்பட்ட இருமுனைவு இடைத்தாக்கம்

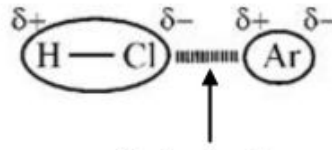
ஆகவே அயன் தூண்டப்பட்ட இருமுனைவு இடைத்தாக்கத்தினால் அயனின் KI நீர்க்கரைசலினால் கரைக்கப்படுகின்றது

இருமுனைவு - தூண்டப்பட்ட இருமுனைவு இடைத்தாக்கம்

இது முனைவுள்ள மூலக்கூறு ஒன்று ஓர் அணுவை அல்லது முனைவற்ற மூலக்கூறினை தூண்டுவதனால் உருவாகும் முனைவிற்குமிடையிலான நலிந்த கவர்ச்சி விசையாகும். இரு முனைவையுடைய மூலக்கூறின் நிலைமின் இயக்கவிசையின் பயனாக அணு அல்லது முனைவற்ற

மூலக்கூறின் வெளி இலத்திரன் முகில் மீள் ஒழுங்காக்கத்திற்கு உட்படுகின்றது. இதன் விளைவாக நிரந்தர இருமுனைவுள்ள மூலக்கூறிற்கும், தூண்டப்பட்ட இருமுனைவுடைய அணு அல்லது மூலக்கூறுக்குமிடையே நிலைமின் கவர்ச்சி உண்டாகின்றது. இவ்விடைத்தாக்க விசை $1/r^6$ க்கு விகித சமமாகும். இங்கு r இருமூலக்கூறுகளுக்குமிடையிலான தூரத்தை (அல்லது ஏற்ற மையத்தை) குறிக்கும். இருமுனைவுத் திருப்புத் திறனின் பெறுமானம் முனைவற்ற மூலக்கூறின் அல்லது அணுவின் முனைவாகும் தன்மையிலும் முனைவு மூலக்கூறின் இருமுனைவுத் திருப்புத் திறனின் பருமனிலும் தங்கியுள்ளது. HCl மூலக்கூறிற்கும் Ar அணுவிற்குமிடையிலான கவர்ச்சி விசை இதற்கு உதாரணமாக அமையும்.

உதாரணம்:



இருமுனைவு - தூண்டப்பட்ட இருமுனைவு இடைத்தாக்கம்

உரு 2.49 இருமுனைவு - தூண்டப்பட்ட இருமுனைவு இடைத்தாக்கம்

லண்டன் இடைத்தாக்கங்கள் அல்லது கலைவு இடைவிசைகள்

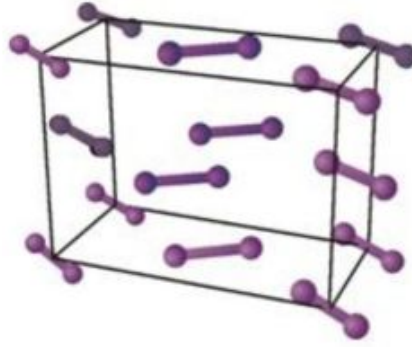
(தற்காலிக (கணநிலை) இருமுனைவு - தூண்டப்பட்ட இருமுனைவு இடைத்தாக்கம்)

முனைவற்ற மூலக்கூறுகள், மூலக்கூறுகளுக்கிடையிலான நலிந்த இடைத்தாக்கத்தினால் ஒன்றாக இணைந்துள்ளன. இவ்விடைத்தாக்கம் வாயுக்களிலும், திண்ம நிலையில் உள்ள சடத்துவ மூலகங்களிலும் காணப்படுகின்றது. இவ்வகையான நலிந்த இடைத்தாக்கங்கள் லண்டன் விசைகள் என அழைக்கப்படும். மூலக்கூறு முனைவற்றதாக இருப்பினும் தொடர்ச்சியான இலத்திரன்களின் அசைவினால் ஒரே நேரத்தில் உயர் இலத்திரன் அடர்த்தியுள்ளதும் தாழ் இலத்திரன் அடர்த்தியுள்ள பிரதேசங்களும் உருவாக்கப்படுகின்றன. எவ்வாறாயினும் இரு முனைவுகளின் பிரதேசமும் (location) அடுத்த கணமே மாற்றமடையும். தற்காலிகமாக கண நிலையில் உருவாகும் முனைவாக்கப்பட்ட மூலக்கூறின் ஒரு முனைவிற்கும், தூண்டப்பட்ட இருமுனைவுடைய ஒவ்வாத ஏற்றம் உடைய இன்னுமோர் மூலக்கூறின் இருமுனைவிற்குமிடையிலான கவர்ச்சி லண்டன் விசை என அழைக்கப்படும். $(\delta^- - \delta^+)$ லண்டன் இடைத்தாக்கம். இது கலைவு இடைவிசைகள் எனவும் அழைக்கப்படும். அத்துடன் முனைவற்ற மூலக்கூறுகள் ஒன்றினால் ஒன்று (பரஸ்பர) முனைவாக்கமடைவதால் உருவாகும் மூலக்கூறுகளுக்கிடையிலான கவர்ச்சி விசையாகும்.

லண்டன் விசைகள் முனைவற்ற, முனைவுள்ள எல்லா அணுக்கள், மூலக்கூறுகளுக்குமிடையில் காணப்படும். பெருமளவு மூலக்கூற்றுத் திணிவு வேறுபாட்டையுடைய பதார்த்தங்களை ஒப்பிடும்பொழுது அவற்றின் பௌதிக இயல்புகளைத் தீர்மானிப்பதில் கலைவு விசைகளே முக்கியத்துவம் பெறுகின்றன.

திண்ம நிலையில் அயடின் மூலக்கூறுகளுக்கிடையிலான பிணைப்பு

அயடின் முனைவற்ற மூலக்கூறு, திண்ம நிலையில் மூலக்கூற்றுப் பளிங்காகக் கருதப்படுகின்றது. அயடின் மூலக்கூறுகள் கனமானவையும் பெரும் பருமனையும் கொண்டவை. திண்ம நிலையில் உள்ள அயடின் மூலக்கூறுகள் அறைவெப்பநிலையில் பெற்றிருக்கும் சக்தி அவை இடம்பெயரப் போதுமானதன்று. திண்மநிலையில் அவை ஒழுங்கான முறையில் ஒழுங்குபடுத்தப்பட்டு லண்டன் விசைகளால் கவரப்பட்டு இணைக்கப்படுகின்றன. I_2 மூலக்கூறுகளின் பெரிய மேற்பரப்பு, அயலில் உள்ள மூலக்கூறுகளுடன் பிணைந்து மூலக்கூற்றுச் சாலகத்தை உருவாக்குவதற்குத் தேவையான லண்டன் விசையைக் கொடுக்கின்றது. I_2 மூலக்கூறுகள் முனைவற்றவையாக இருப்பதால் அவற்றின் கரைதிறன் முனைவு கரைப்பான்களிலும் பார்க்க முனைவற்ற கரைப்பானில் அதிகம்.

**உரு 2.50** அயடின் மூலக்கூற்றுச் சாலகம்

பின்வரும் அட்டவணை சில மாதிரி எளிய மூலக்கூறுகளின் கொதிநிலை வேறுபாடுகளைக் காட்டுகிறது. இக்கொதிநிலை வேறுபாட்டினை இருமுனைவு - இருமுனைவு மூலக்கூற்றிடைக் கவர்ச்சி விசையினை உபயோகித்து விளக்கலாம்.

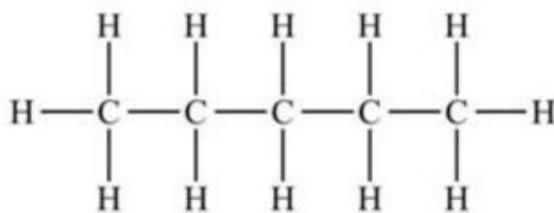
அட்டவணை 2.7 இருமுனைவு திருப்புத்திறனுடையது.

மூலக்கூறு	மூலக்கூற்று திணிவு (g mol^{-1})	இருமுனைவுத் திறன்	கொதிநிலை ($^{\circ}\text{C}$)	மூலக்கூற்றிடைத் தாக்க விசை வகை
O_2	32	0	-183	லண்டன்
NO	30	0.153	-152	இருமுனைவு - இருமுனைவு
Kr	83.8	0	-152	லண்டன்
HBr	81	0.82	-62	இருமுனைவு - இருமுனைவு
Br_2	160	0	59	லண்டன்
ICl	162.5	1.6	97	இருமுனைவு - இருமுனைவு

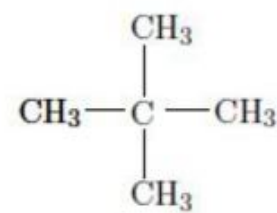
NO வினதும் O_2 இனதும் மூலக்கூற்றுத் திணிவுகள் ஒப்பிடப்படக்கூடியன. ஆயினும் NO இன் மொத்த திணிவு O வை விட உயர்வானது. எனவே NO மூலக்கூறுகளுக்கிடையிலான இடைத்தாக்கு விசையின் வன்மை O_2 மூலக்கூறுகளுக்கிடையிலான இடைத்தாக்க விசையின் வன்மையிலும் உயர்வானது. இவ்வவதானத்தை முனைவுத்தன்மை இருதிருப்புத்திறன் ஆகியவற்றின் அடிப்படையில் விளக்கலாம். மின் எதிர்த்தன்மை வேறுபாடு கொண்ட அணுக்களை யுடைய மூலக்கூறு NO ஆகும். NO இன் பிணைப்பு முனைவுடையதாக இருப்பதால் 0.1553 D இருமுனைவுத் திருப்புத்திறனைக் கொண்டுள்ளது. ஆனால் O_2 முனைவற்ற மூலக்கூறு அதன் இருமுனைவுத் திருப்புத்திறன் பூச்சியம். NO வில் காணப்படும் மூலக்கூற்றிடைக் கவர்ச்சி விசையாகிய இருமுனைவு-இருமுனைவு கவர்ச்சி, O_2 மூலக்கூறுகளுக்கிடையே காணப்படும் லண்டன் விசையிலும் வலிமையானது. இதன் விளைவாக NO இன் கொதிநிலை O_2 வை விட உயர்வு. திரவ நிலையில் மூலக்கூறுகளுக்கிடையிலான இடைத்தாக்கவிசை உண்டாவதற்குத் தேவையான வெப்பம் O_2 வை விட NO விற்கு உயர்வாக உள்ளது.

Br_2 மூலக்கூறும் (ICl) அயனன்ஓர்குளோரைட்டும் சம இலத்திரனுக்குரியன. புரோமின் மூலக்கூறு முனைவற்றது. $59^\circ C$ இல் கொதிக்கின்றது. ICl முனைவுள்ள மூலக்கூறு. $97^\circ C$ யில் கொதிக்கின்றது. $40^\circ C$ உயர்வானது. கொதிநிலை ICl மூலக்கூறுகளுக்கிடையிலான கவர்ச்சி விசை Br_2 மூலக்கூறுகளுக்கிடையிலான கவர்ச்சி விசையைவிட உயர்வானது என எடுத்துக் காட்டுகின்றது. வன்மையான இருமுனைவு - இருமுனைவுக் கவர்ச்சிவிசை கொண்ட எப்பதார்த்தமும் உருகுவதற்கும் கொதிப்பதற்கும் உயர் சக்தியை உறிஞ்சவேண்டும்.

லண்டன் விசைகளின் வன்மை மூலக்கூறுகளின் வடிவத்திலும் தங்கியுள்ளது. அடர்வான சமச்சீரான மூலக்கூறுகளிலிலும் பார்க்க நீளமான (தட்டையான) மூலக்கூறுகளிலுள்ள இலத்திரன்கள் இலகுவாக முனைவுறும் அல்லது இடம்பெயரும் (கலைவடையும்). உதாரணமாக *n*-பென்தேன் $36^\circ C$ (309 K) இல் கொதிக்கின்றது ஆனால் நியோ பென்தேன் $9^\circ C$ (282 K) இல் கொதிக்கின்றது. எனவே *n*-பென்தேனிலுள்ள லண்டன் விசை நியோ-பென்தேனில் உள்ளதிலும் உயர்வானது. ஏனெனில் நியோ-பென்தேன் வடிவத்தில் C - C பிணைப்பிலுள்ள வலுவளவு இலத்திரன்கள் சூழலிலிருந்து திரையிடப்பட்டுள்ளது. ஆனால் *n*-பென்தேனின் வடிவத்தில் C - C பிணைப்பிலுள்ள வலுவளவு இலத்திரன்கள் (more exposed) அத்துடன் மேற்பரப்பிற்கு அண்மையிலுள்ளன. எனவே C - C பிணைப்பு இலத்திரன்களை (involves) லண்டன் விசைகள் நியோ-பென்தேனின் (*neo*-pentane) கூடிய தூரத்தினூடாக தொழிற்பட வேண்டியுள்ளது. இதன் விளைவாக மொத்தக் கவர்ச்சி விசை நலிந்ததாக உள்ளது. லண்டன் விசை எல்லா வகையான மூலக்கூறுகளிற்கிடையிலும் பாகுபாடின்றி அதாவது நடுநிலையான அல்லது ஏற்றமுடைய அல்லது முனைவுள்ள, முனைவற்ற மூலக்கூறுகளுக்கிடையில் காணப்படுகின்றது.



(a)

உரு 2.51 (a) *n*-பென்தேன்

(b)

(b) *neo*-பென்தேன்