परमाणु की संरचना
(Structure of Atom)

- **हाइजेनबर्ग का अनिश्चितता सिद्धांत**

द्रव्य और विकिरण के दोहरे व्यवहार के फलस्वरूप एक जर्मन भौतिक वैज्ञानिक वर्नर हाइजेनबर्ग ने सन् 1927 में अनिश्चितता का सिद्धांत दिया। इसके अनुसार, किसी इलेक्ट्रॉन की सही स्थिति और सही वेका निर्धारण एक साथ करना असभंव है।

हाइजेनबर्ग अनिश्चितता सिद्धांत का प्रभाव केवल सूक्ष्म पिंडों की गति के लिए है, स्थूल पिंडों के लिए यह प्रभाव अतिन्यून होता है।

- **परमाणु का क्वांटम यांत्रिकीय मॉडल**

जैसा पूर्व खंड में बतलाया गया है, न्यूटन के 'गति के नियमों' के आधार पर विकसित चिरसम्मत यांत्रिकी द्वारा स्थूल पदार्थों जिनका व्यवहार कण जैसा होता है, की गति का सफलतापूर्वक वर्णन किया जा सकता है, किंतु जब इसे अति सूक्ष्म कणों पर लागू किया जाता है, तो यह विफल हो जाता है।

द्रव्य के दोहरे व्यवहार को ध्यान में रखकर विकसित विज्ञान को क्वांटम यांत्रिकी (quantum machanics) कहते हैं।

क्वांटम यांत्रिकी एक सैद्धांतिक विज्ञान है, जिसमें उन अति सूक्ष्म वस्तुओं की गतियों का अध्ययन किया जाता है, जो तरंग और कण दोनों के गुण दर्शाती हैं।

- **कक्षक और क्वांटम संख्या**

किसी परमाणु में कई कक्षक संभव होते हैं। गुणात्मक रूप में इन कक्षकों में उनके आकार, आकृति और अभिविन्यास के आधार पर अंतर किया जा सकता है। छोटे आकर के कक्षक का अर्थ यह है कि नाभिक के पास इलेक्ट्रॉन के पाए जाने की प्रायिकता अधिक है। इसी प्रकार, आकृति और अभिविन्यास यह बताते हैं कि इलेक्ट्रॉन पाए जाने की प्रायिकता किसी दूसरी दिशा की अपेक्षा एक दिशा में अधिक है। क्वांटम संख्याओं द्वारा परमाणु कक्षकों में अंतर किया जा सकता है। प्रत्येक कक्षक को तीन क्वांटम संख्याओं n, l और m1 द्वारा दर्शाया जाता है।

मुख्य क्वांटम संख्या 'n' एक धनात्मक पूर्णांक होती है। इसका मान 1,2,3..... आदि हो सकता है। मुख्य क्वांटम संख्या से कक्षक के आकार और काफी हद तक उसकी ऊर्जा के बारे में पता चलता है। हाइड्रोजन और उस जैसे निकायों (He^+, Li^{2+} आदि) के लिए यह अकेले ही कक्षक के आकार तथा ऊर्जा को निर्धारित करता है। मुख्य क्वांटम संख्या से कोश (shell) का भी पता चलता है। n का मान बढ़ने के साथ अनुमत कक्षकों की संख्या भी बढ़ती है। इसे 'n^2' द्वारा दिया जाता है। n के निश्चित दिए गए मान के लिए सभी कक्षक परमाणु का एक कोश बनाते हैं। उन्हें निम्नलिखित अक्षरों द्वारा दर्शाया जाता है–

n	= 1	2	3	4	.....
कोश	= K	L	M	N	.....

मुख्य क्वांटम संख्या भी बढ़ने के साथ कक्षा का आकार बढ़ता है। दूसरे शब्दों में, इलेक्ट्रॉन नाभिक से दूर स्थित होते हैं। चूँकि एक ऋणावेशित इलेक्ट्रॉन को धनावेशित नाभिक से दूर होने के लिए ऊर्जा की आवश्यकता होती हैं, अतः n के बढ़ने से कक्षक की ऊर्जा बढ़ेगी।

दिगंशीय क्वांटम संख्या को 'l' को कक्षक क्वांटम संख्या, कक्षक कोणीय संवेग (orbital angular momentum) सर भौम क्वांटम संख्या (subsidiary quantum number) भी कहते हैं। यह कक्षक के त्रिविमीय आकार को परिभाषित करती है। n के दिए गए मान के लिए l के 0 से n- 1 तक n मान हो सकते हैं। अर्थात् n के दिए गए मान के लिए l के मान 0,1, 2.....(n –1) हो सकते हैं।

उदाहरणार्थ– जब n=1 होता है, तो l का केवल एक मान 0 होता है, n=2 के लिए l के संभव मान 0 तथा 1 हो सकते हैं n=2 के लिए l के संभव मान 0,1 और 2 होंगे।

प्रत्येक कोश में एक या अधिक उपकोश (sub-shells) या उप–स्तर (sub-levels) होते हैं। किसी मुख्य कोश में उपकोशों की संख्या n के बराबर होती है। उदाहरणार्थ– पहले कोश (n=1) में केवल एक उप कोश होता है, जो 1=0 के संगत होता हैं। इसी प्रकार (n=2) कोश में दो उप–कोश (1=0,1) n=3 में तीन तीन उप–कोश (1=0, 1, 2) होते हैं। n के अन्य मानों के लिए भी ऐसा लिखा जा सकता हैं। किसी कोश के उप–कोशों को दिगंशीय क्वांटम संख्या (l) द्वारा प्रदर्शित करते हैं। l के विभिन्न मानों के संगत उप–कोशों को निम्नलिखित चिन्हों द्वारा दर्शाया जाता है–

l के मान : 0 1 2 3 4 5 .....

उप–कोश के लिए

संकेतन (notation) s p d f g h .....

सारणी में दी गई मुख्य क्वांटम संख्या के लिए l के संभव मान और संगत उप–कोशों के संकेतन दिए गए हैं।

चुंबकीय कक्षक क्वांटम संख्या (magnetic or-bital quantum number) 'm1' समन्वय अक्ष के संगत कक्षकों के त्रिविम अभिविन्यास के बारे में जानकारी देती है। किसी उप–कोश के लिए m1 के 2l + 1 मान संभव हैं। इन मानों को इस प्रकार दिया जाता है–

M1 = -l, -(l-1), -(l-2) .....0, 1.... (l-2), (l-1) l

अतः l=0 के लिए M_1 का एक ही स्वीकृत मान 0 होता है, अर्थात् 2(0)+1 = 1, एक S कक्षक होता है। l = 1 के लिए 1=-1, 0, +1 हो सकता है l [2[1]+1=3p कक्षक] l=2 के लिए m1=-2, -1, 0, +1 एवं +2 (पाँच d कक्षक) हो सकता है। स्मरणीय है कि m_1 के मान l से और l के मान n से प्राप्त होते हैं।

सारणी उप–कोश संकेतन

n	l	Subshell notation
1	0	1s
2	0	2s
2	1	2p
3	0	3s
3	1	3p
3	2	3d
4	0	4s
4	1	4p
4	2	4d
4	3	4f

किसी परमाणु में प्रत्येक कक्षक n,l और m_1 मानों के समुच्चय द्वारा परिभाषित किया जाता हैं। अतः क्वांटम संख्याओं n_1=2, l=1, m_1=0 द्वारा वर्णित कक्षक ऐसा कक्षक होता है, जो दूसरे कोश के p उपकोश में होता है। यहाँ दी जा रही तालिका में उप–कोश और उससे संबंधित कक्षकों की संख्या का संबंध दिया गया है–

Value of l	0	1	2	3	4	5
Sub-shell notation	s	p	d	f	g	h
Number of orbitals	1	3	5	7	9	11

इलेक्ट्रॉन प्रचक्रण 's' : किसी परमाणु कक्षक के लिए चिन्हित तीनों क्वांटम संख्याओं को उसकी ऊर्जा, आकार ओर अभिविन्यास को परिभाषित करने में प्रयुक्त किया जा सकता है, लेकिन बहु–इलेक्ट्रॉन परमाणुओं में देखे गए रेखा–स्पेक्ट्रा की व्याख्या करने में ये क्वांटम संख्याएँ पर्याप्त नहीं हैं। इनमें कुछ रेखाएँ द्विक (दो रेखाएँ पास–पास) तथा कुछ रेखाएँ त्रिक (तीन रेखाएँ पास–पास) होती हैं। तीनों क्वांटम संख्याओं द्वारा अनुमानित ऊर्जा के अलावा यह कुछ और ऊर्जा–स्तरों की उपस्थिति का संकेत करता है।

सन् 1925 में जॉर्ज उहलेनबैक (George Uhlenback) और सैमुअल गाउटस्मिट (Samuel Goudsmit) ने एक चौथी क्वांटम संख्या की उपस्थिति प्रतिपादित की, जो 'इलेक्ट्रॉन–प्रचक्रण क्वांटम संख्या' (m_s) कहलाती है। एक इलेक्ट्रान अपने अक्ष पर ठीक वैसे ही प्रचक्रण करता है, जैसे सूर्य के चारों ओर चक्कर काटते समय पृथ्वी अपने अक्ष पर प्रचक्रण करती है। दूसरे शब्दों में– इलेक्ट्रॉन में आवेश और द्रव्यमान के अतिरिक्त नैज (intrinsic) प्रचक्रण कोणीय संवेग होता है। इलेक्ट्रॉन का कोणीय संवेग एक सदिश (vector) राशि है। इसके किसी चुने हुए अक्ष के सापेक्ष दो अभिविन्यास हो सकते हैं, जिन में प्रचक्रण क्वांटम संख्या m_s के द्वारा भेद किया जा सकता है। m_s का मान $+1/2$ या $1/2$ हो सकता है। इन्हें इलेक्ट्रॉन की दो प्रचक्रण अवस्थाएं (spin states) भी कहते हैं। आम तौर पर वे तीरों ↑ (ऊपरी प्रचक्रण, spin up) और ↓ (निचला प्रकरण spin down) द्वारा दर्शाए जाते हैं। विभिन्न मान वाले दो इलेक्ट्रॉन (एक $+ 1/2$ ओर दूसरा $-1/2$) विपरीत प्रचक्रण वाले कहलाते हैं। किसी कक्षक में दो से अधिक इलेक्ट्रॉन नहीं हो सकते हैं, इन दोनों इलेक्ट्रॉनों का विपरीत प्रचक्रण होना चाहिए।

संक्षेप में हम यह कह सकते हैं कि चारों क्वांटम संख्याए निम्नलिखित जानकारियाँ देती हैं–

(i) n से कोश को बोध होता है। यह कक्षक का आकार और काफी हद तक ऊर्जा निर्धारित करता है।

(ii) n^{th} कोश में n उप–कोश होते हैं। l, कक्षक की आकृति बताता है। प्रत्येक प्रकार के उप–कोश में (2l+1) कक्षक होते हैं, अर्थात् प्रत्येक उप–कोश में एक s कक्षक (l=0), तीन p कक्षक (l=1) और 5d कक्षक (l=2) हो सकते हैं। l कुछ हद तक बहु–इलेक्ट्रॉन परमाणु के कक्षक की ऊर्जा का भी निर्धारण करता है।

(iii) m_1 कक्षक के अभिविन्यास को प्रदर्शित करता है। l के दिए गए किसी मान के लिए m_1 के (2l+1) मान होते हैं। इतनी ही संख्या प्रत्येक उप–कोश में कक्षकों की होती है। इसका अर्थ यह है कि कक्षकों की संख्या उनके अभिविन्यासों के तरीकों के बराबर होती है।

(iv) इलेक्ट्रॉन के प्रचक्रण के अभिविन्यास को M_s बताता है।

(n+1) का मान जितना निम्न होगा कक्षक की ऊर्जा भी उतनी ही कम होगी। यदि दो कक्षकों के लिए (n+1) का मान समान हो, तो निम्न n के मान वाले कक्षक की ऊर्जा निम्न होगी।

- **परमाणु में कक्षकों का भरा जाना**

विभिन्न परमाणुओं के कक्षकों में इलेक्ट्रॉन ऑफबाऊ नियम के अनुसार भरे जाते हैं।

ऑफबाऊ नियम

'परमाणुओं की तलस्थ अवस्था में, कक्षकों को उनकी ऊर्जा के बढ़ते क्रम में भरा जाता है।

सारणी (n+l) नियम के आधार पर बढ़ती ऊर्जा के साथ कक्षकों की व्यवस्था

Orbital	Value of n	Value of l	Value of (n + l)	
1s	1	0	1 + 0 = 1	
2s	2	0	2 + 0 = 2	
2p	2	1	2 + 1 = 3	2p (n=2) has lower energy than
3s	3	0	3 + 0 = 3	3s (n=3)
3p	3	1	3 + 1 = 4	3p (n =3) has lower energy than
4s	4	0	4 + 0 = 4	4s (n =4)
3d	3	2	3 + 2 = 5	3d (n =3) has lower energy than
4p	4	1	4 + 1 =5	4p (n =4)

इलेक्ट्रॉन पहले सबसे कम ऊर्जा वाले उपलब्ध कक्षक में जाते हैं और उनको भरने के बाद उच्च ऊर्जा वाले कक्षकों को भरते हैं।

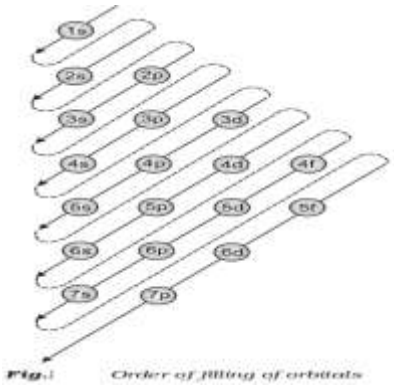


Fig.1 Order of filling of orbitals

पाउली अपवर्जन सिद्धांत

किसी परमाणु में उपस्थित दो इलेक्ट्रॉनों की चारों क्वांटम संख्याएँ एक समान नहीं हो सकती।

''केवल दो इलेक्ट्रॉन एक कक्षक में रह सकते हैं। इन इलेक्ट्रॉनों के प्रचक्रण विपरीत होने चाहिए।''

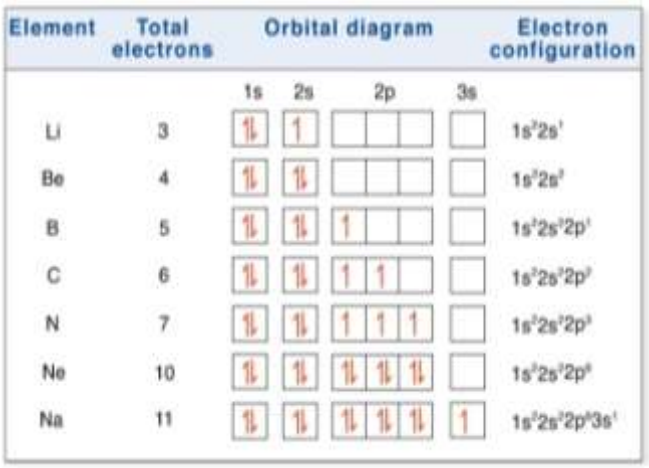
मुख्य क्वांटम संख्या वाले कोश में इलेक्ट्रॉनों की संख्या $2n^2$ के बराबर होती है।

हुंड का अधिकतम बहुकता का नियम

एक ही उप–कोश के कक्षकों में इलेक्ट्रॉनों का युग्मन तब तक नहीं होता है, जब तक उस उप–कोश के सभी कक्षकों में एक–एक इलेक्ट्रॉन न आ जाए।

- **परमाणुओं का इलेक्ट्रॉनिक विन्यास**

परमाणुओं के कक्षकों में इलेक्ट्रॉनों के वितरण को उनका इलेक्ट्रॉनिक विन्यास (electronic configuration) कहा जाता है।



वे इलेक्ट्रॉन, जो उच्चतम मुख्य क्वांटम संख्या के इलेक्ट्रॉनिक कोश में भरे जाते हैं, संयोजकता इलेक्ट्रॉन कहलाते हैं।