

Kishor Arora  
Prof.- Chemistry,  
Govt. Postgraduate College (Auto.); Datia (M.P.) 475 661

# **MOLECULAR ORBITAL THEORY**

## **(B.SC. III YEAR, PAPER -I)**

## FEATURES OF M.O.T.

एम्.ओ. टी की तथ्यात्मक जानकारी

- ✖ The Molecular Orbital Theory, initially developed by Robert S. Mullikan,

यह सिधान्त प्रारंभ में रोबर्ट एस मुलिकन द्वारा प्रस्तुत किया गया !

- ✖ This Theory incorporates the wave like characteristics of electrons in describing bonding behavior.

इस सिधान्त में इलेक्ट्रान का तरंग रूपी व्यवहार को लेते हुए अणुओं में बांध प्रकृति समझाई गई!

## FEATURES OF M.O.T.

### एम्.ओ. टी की तथ्यात्मक जानकारी

- ★ In Molecular Orbital Theory, the bonding between atoms is described as a combination of their atomic orbitals.

इस सिधान्त में परमाणओं के मध्य बंधों को परमणु कक्षकों के युग्मन से बतौया गया है !

- ★ While the Valence Bond Theory and Lewis Structures sufficiently explain simple models, the Molecular Orbital Theory provides answers to more complex questions.

आणविक सिधान्त द्वारा जटिल प्रश्नों के उत्तर स्पष्ट किये गए !

## FEATURES OF M.O.T.

### एम्.ओ. टी की तथ्यात्मक जानकारी

- In the Molecular Orbital Theory, the electrons are delocalized.
- Electrons are considered delocalized when they are not assigned to a particular atom or bond (as in the case with Lewis Structures).

एम्.ओ. टी के अनुसार , इलेक्ट्रान अणु पर delocalized रहते हैं?

ऐसा तभी होता है जब यह किसी एक नियत परमाणु पर या बांध पर नहीं होते !

## FEATURES OF M.O.T.

### एम्.ओ. टी की तथ्यात्मक जानकारी

- Instead, the electrons are “smeared out” across the molecule.

इलेक्ट्रान पुरे अणु पर फेले कहे जा सकते हैं!

- The Molecular Orbital Theory allows one to predict the distribution of electrons in a molecule which in turn can help predict molecular properties such as shape, magnetism, and Bond Order.

एम्.ओ.टी. द्वारा इलेक्ट्रानों का परे अन पर वितरण अणु के कई गणों को समझने में सहायक होता है जैसे अणु का आकार, चुम्बकत्व, बांध कोटि आदि !

## LCAO CONCEPT

### (एल सी ए ओ परिकल्पना )

- Linear combinations of atomic orbitals (LCAO) can be used to estimate the molecular orbitals that are formed upon bonding between the molecule's constituent atoms.

आणुओं में बंध को समझाने के लिए अनु निर्माण में लगे परमाणुओं के मध्य परमाणु केंद्रकों के रेखिल युग्मन से समझा जा सकता है ! इसे एल.सी.ए. ओ परिकल्पना कहते हैं !

## LCAO CONCEPT

(एल सी ए ओ परिकल्पना )

- For simple diatomic molecules, the wave functions obtained are represented mathematically by the equations

$$\Psi = c_a \psi_a + c_b \psi_b$$

$$\Psi^* = c_a \psi_a - c_b \psi_b$$

साधारण द्विपरामान्विय अनु के प्रकरण में  
गणितीय आधार पर तरन फलन उपरोक्त  
समीकरणों से लिखे जा सकते हैं!

## LCAO CONCEPT

(एल सी ए ओ परिकल्पना )

- where and are the molecular wave functions for the bonding and anti bonding molecular orbitals, respectively, and are the atomic wave functions from atoms a and b, respectively, and are adjustable coefficients

यह बंधीय एवं प्रतिबंधीय तरंग फलन है ! और सी'स गुणांक है !

# BONDING M.O. बंधीय एमॉ.

Bonding MOs:

- ✖ Bonding interactions between atomic orbitals are constructive (in-phase) interactions.

परमानो कक्षको के एक ही प्रावस्था में मिलने से बंधीय एमॉ. का निर्माण होता है!

- ✖ Bonding MOs are lower in energy than the atomic orbitals that combine to produce them.

इन्हें बनाने वाले कक्षको से इनकी ऊर्जा कम रहती है !

# ANTIBONDING MOS

## (प्रति बंधीय एम्.ओ.)

- Anti bonding interactions between atomic orbitals are destructive (out-of-phase) interactions, with a nodal plane where the wave function of the anti bonding orbital is zero between the two interacting atoms.

परमानो कक्षको के भिन्न प्रावस्था में मिलने से प्रतिबंधीय एम्.ओ. का निर्माण होता है!

- Anti bonding MOs are higher in energy than the atomic orbitals that combine to produce them.

इन्हें बनाने वाले कक्षको से इनकी ऊर्जा अधिक रहती है !

# NONBONDING MOs

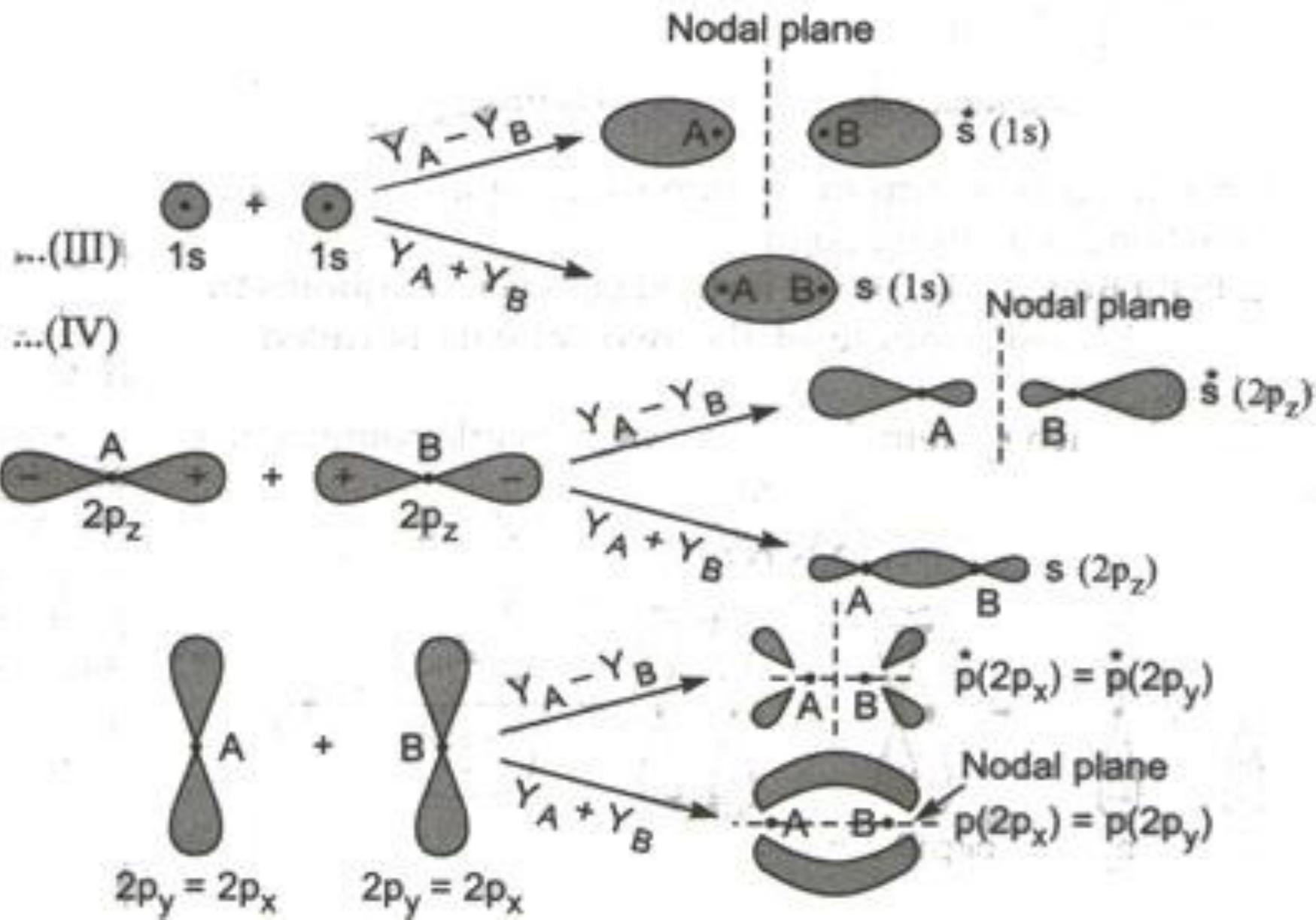
## (अनाबंधीय एम्.ओ)

- Nonbonding MOs are the result of no interaction between atomic orbitals because of lack of compatible symmetries.

यदि परमानन्द कक्षको की सममिति में समानता न होने पर कोई भी interaction न हो तो अनाबंधीय एम्.ओ. बनते हैं !

- Nonbonding MOs will have the same energy as the atomic orbitals of one of the atoms in the molecule.

इन्हें बनाने वाले कक्षको से इनकी ऊर्जा समान रहती है !



## Molecular orbitals from 2p atomic orbitals

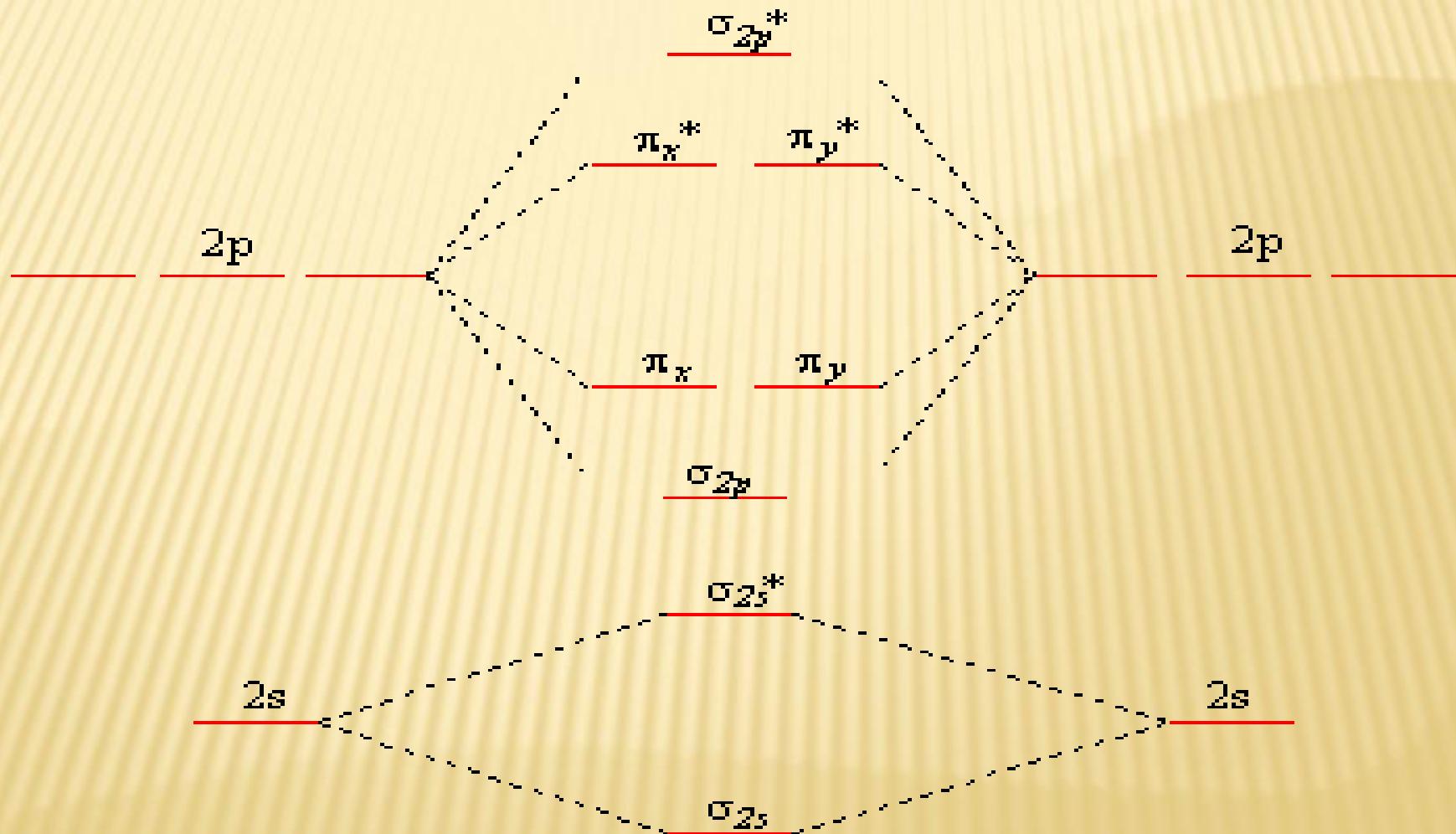
2p atomic orbitals give rise to both  $\sigma$  and  $\pi$  type molecular orbitals. The strongest overlap occurs between the  $2p_z$  orbitals.



atomic orbitals from  
two different nuclei

molecular orbitals

# MO DIAGRAM (एम०ओ० आरेख )



# BOND ORDERS AND STABILITY OF MOLECULES

## (बंध कोटि एवं अणु का स्थायित्व )

- ✖ Bond Order indicates the strength of the bond with the greater the bond order, the stronger the bond.

$$\text{Bond Order} = \frac{1}{2}(a-b)$$

बंध कोटि द्वारा अणुओं में बंध की शक्ति एवं अणु के स्थायित्व का अनुमान लगया जा सकता है ! इसे ज्ञात करने का सूत्र ऊपर दिया गया है !

# BOND ORDERS AND STABILITY OF MOLECULES

(बंध कोटि एवं अणु का स्थायित्व )

a is the number of electrons in bonding molecular orbitals and

b is the number of electrons in antibondng molecular orbitals.

यहाँ a बंधीय एम्.ओ. में इलेक्ट्रानों की संख्या है  
और b प्रतिबंधीय एम्.ओ. में इलेक्ट्रानों की  
संख्या है

# BOND ORDERS AND STABILITY OF MOLECULES

## (बंध कोटि एवं अणु का स्थायित्व )

- >If the bond order is zero, then no bonds are produced and the molecule is not stable (for example He<sub>2</sub>).

यदि बांध कोटि शून्य हो तो अनु के मध्य कोई बांध निर्माण नहीं होता! (उदाहरण के लिए He<sub>2</sub>)

- If the Bond Order is 1, then it is a single covalent bond.

यदि बांध कोटि एक हो तो अनु में एक सहसयोजक बांध होता है!

# BOND ORDERS AND STABILITY OF MOLECULES

## (बंध कोटि एवं अणु का स्थायित्व )

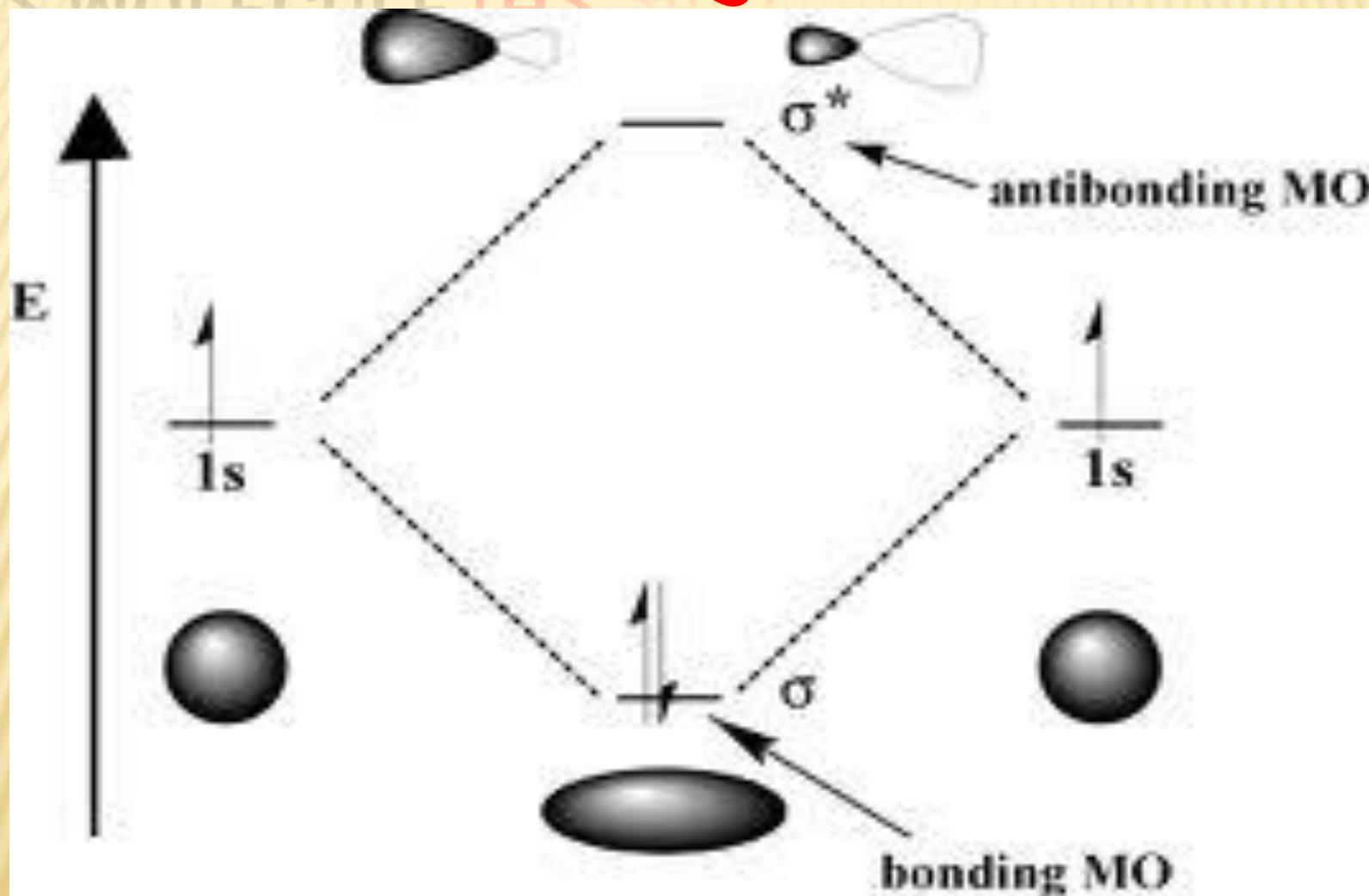
- The higher the Bond Order, the more stable the molecule is.

जितना अधिक बांध कोटि होंगी उतना अधिक अनु का स्थायित्व होगा !

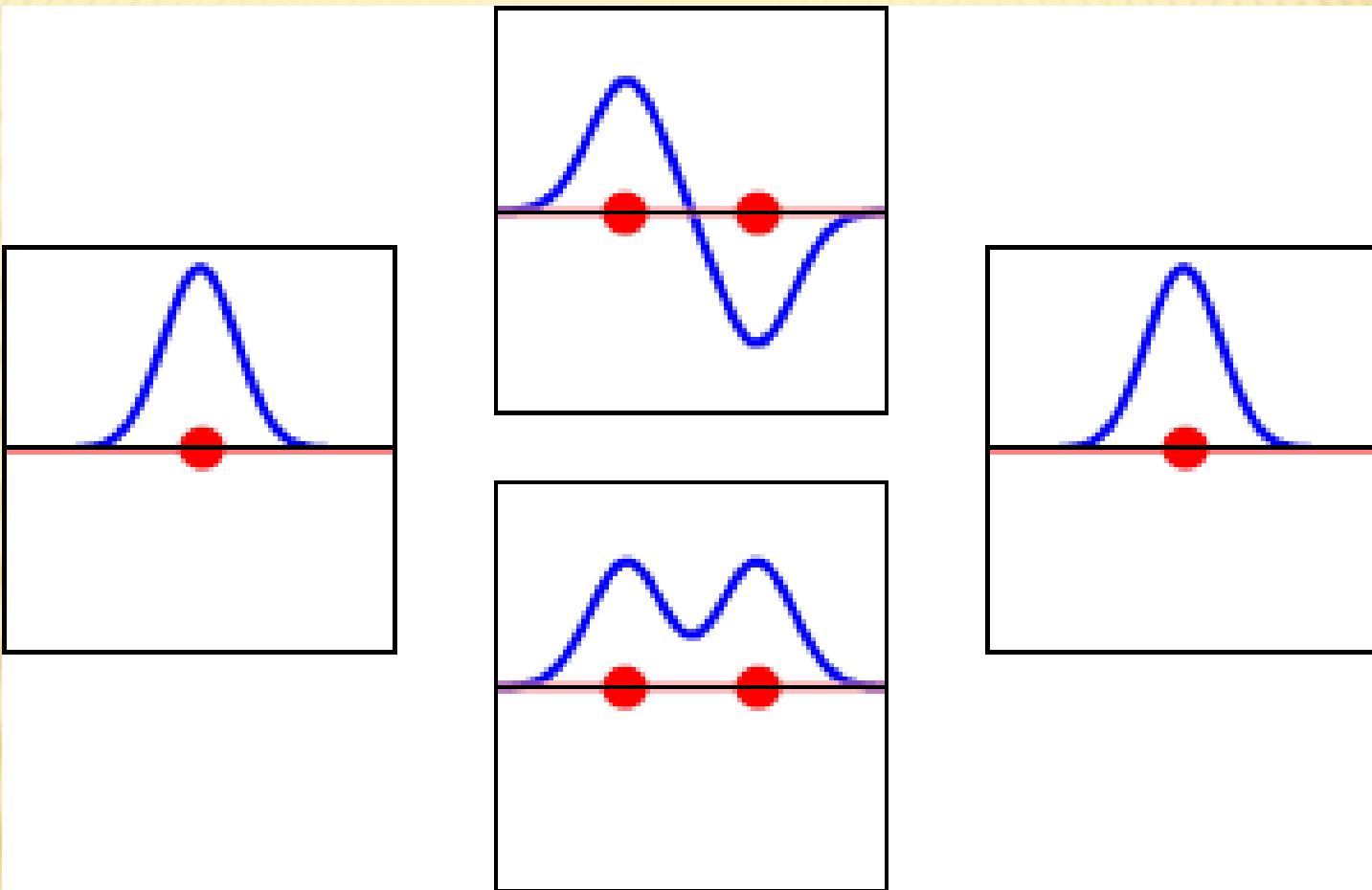
- An advantage of Molecular Orbital Theory when it comes to Bond Order is that it can more accurately describe partial bonds (for example in  $\text{H}_2^+$ , where the Bond Order=1/2), than Lewis Structures.

एम्. ओ. सिधान्त की एक विशेषता है कि इसके आधार पर आंशिक बंध निर्माण को भी समझा जा सकता है

# H<sub>2</sub> MOLECULE (H<sub>2</sub> अणु)



# H<sub>2</sub> MOLECULE (H<sub>2</sub> अणु)



# H<sub>2</sub> MOLECULE (H<sub>2</sub> अणु)

H<sub>2</sub> MOLECULE (H<sub>2</sub> अणु)

- × The following symmetry adapted atomic orbitals do:

$1s' - 1s''$

Antisymmetric combination: negated by reflection,  
unchanged by other operations

(प्रति सममिति युग्मन, प्रति बंधीय एम्.ओ. ; उर्जा में अधिक )

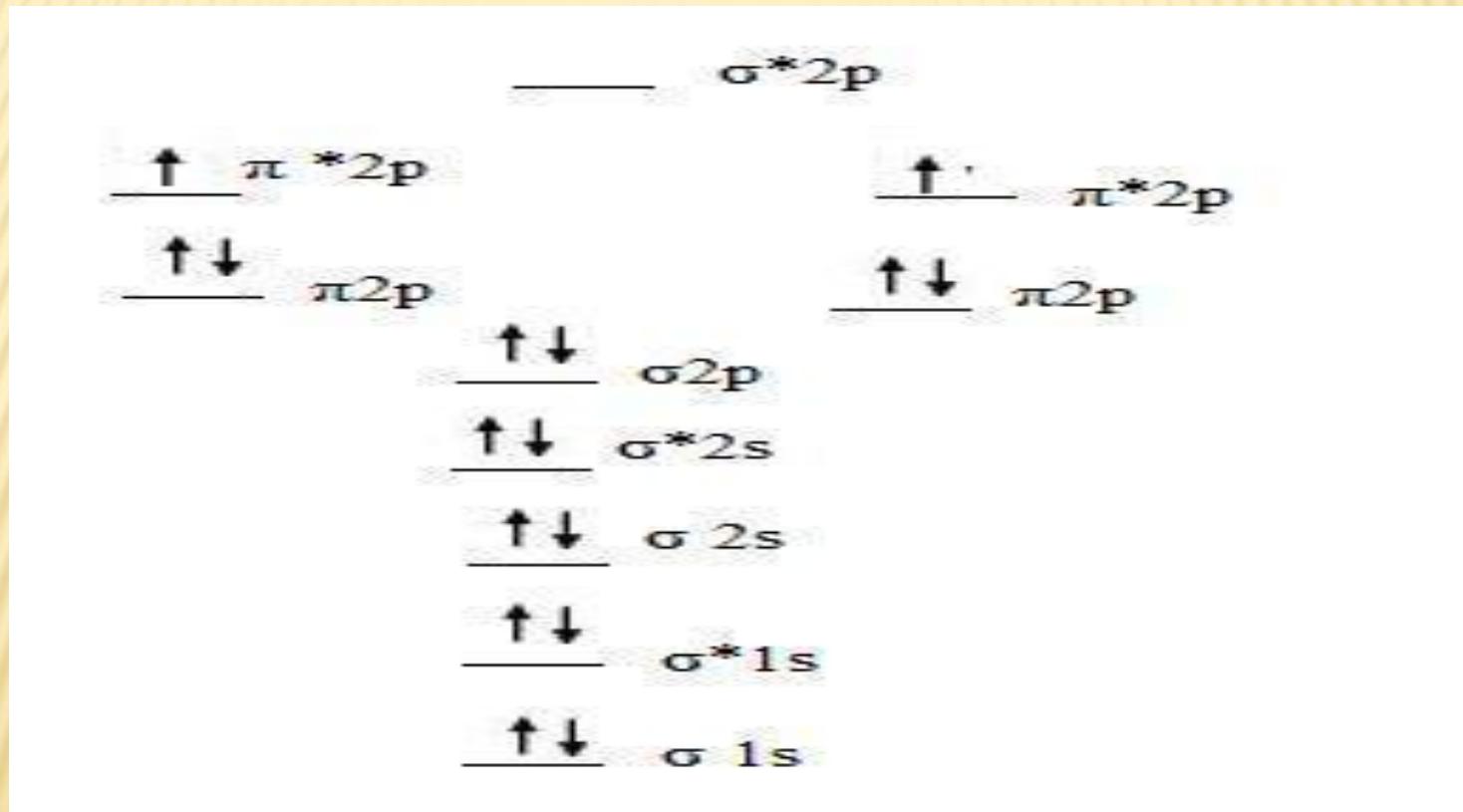
$1s' + 1s''$

Symmetric combination: unchanged by all symmetry operations

( सममिति युग्मन, बंधीय एम्.ओ. ; उर्जा में कम )

- × The symmetric combination (called a bonding orbital) is lower in energy than the basis orbitals, and the antisymmetric combination (called an antibonding orbital) is higher

# OXYGEN MOLECULE (आक्सीजन अणु )



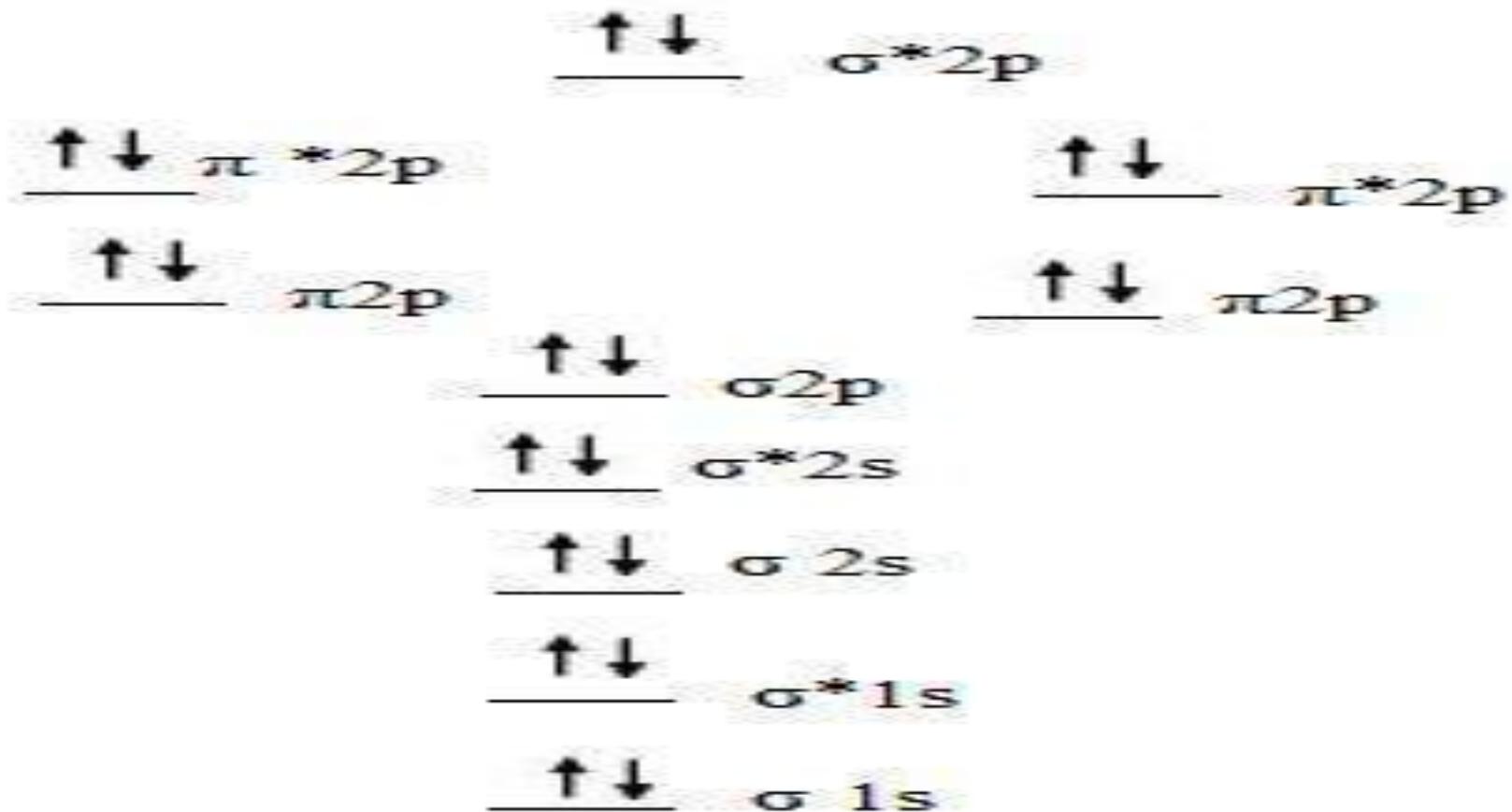
# OXYGEN MOLECULE (आक्सीजन अणु )

- ✖ Bond Order =  $(\frac{1}{2})(10 - 6) = 2$
- ✖ The bond order is two so the molecule is stable.
- ✖ There are two unpaired electrons, so molecule is paramagnetic.

बंध कोटि दो; अणु स्थायी ; दो अयुग्मित इलेक्ट्रान ; अतः अणु चुम्बकीय

# NEON MOLECULE

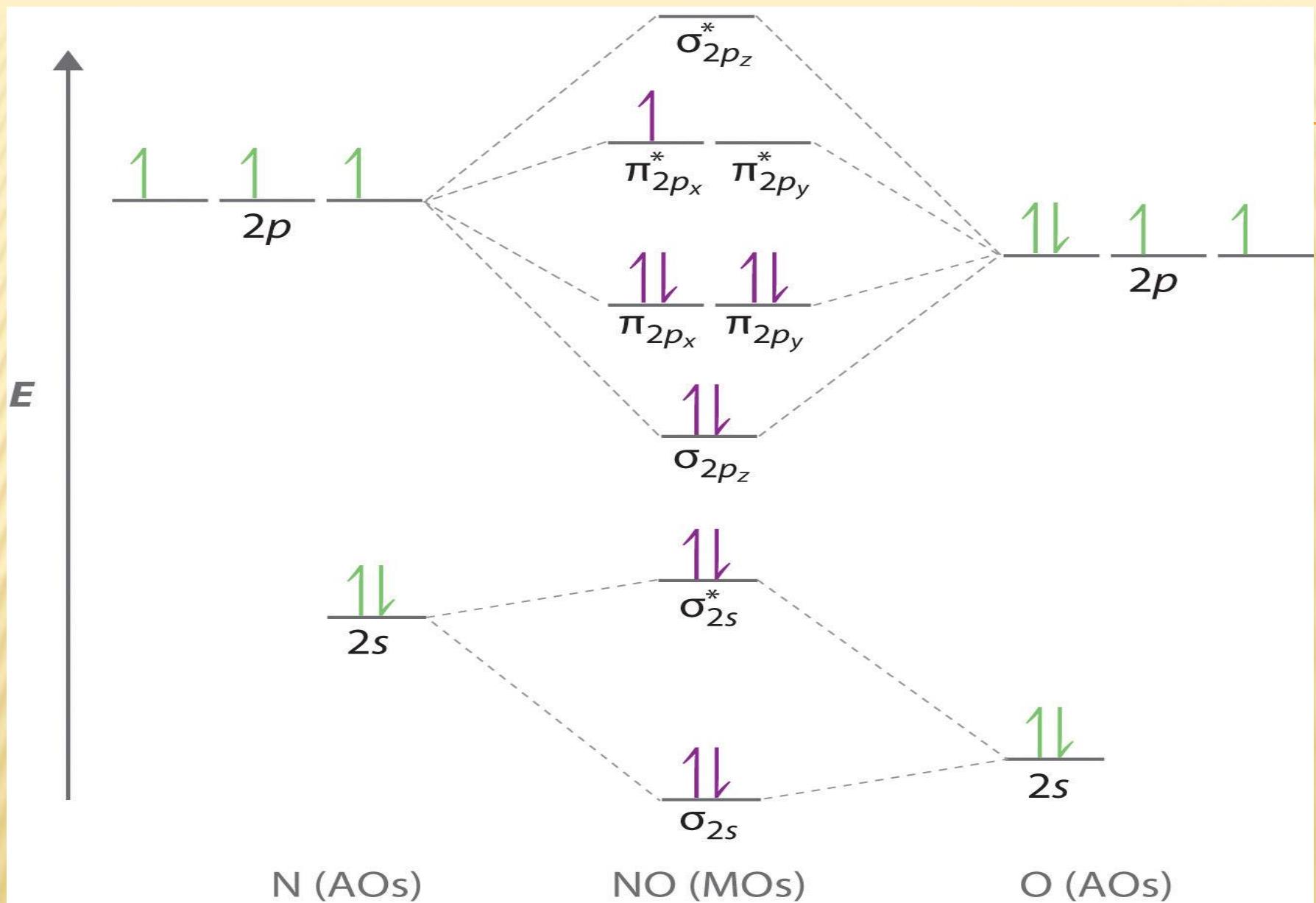
(निआन अणु )



# NEON MOLECULE (निआन अणु )

- ✖ Bond Order =  $(\frac{1}{2})(10 - 10) = 0$
- ✖ bond order is zero, so  $\text{Ne}_2$  is unstable.
- ✖ diamagnetic

बंध कोटि शून्य ; अणु अस्थायी ; प्रति  
चुम्बकीय



# **NO MOLECULE (NO अणु)**

✗ Bond order (बंध कोटि)

$$= \frac{1}{2} (8-3)$$

$$= 2.5$$

Unpaired Electrons (अयुग्मित इलेक्ट्रान )

paramagnetic (अनुचुम्बकीय )

# CO MOLECULE (CO अणु)

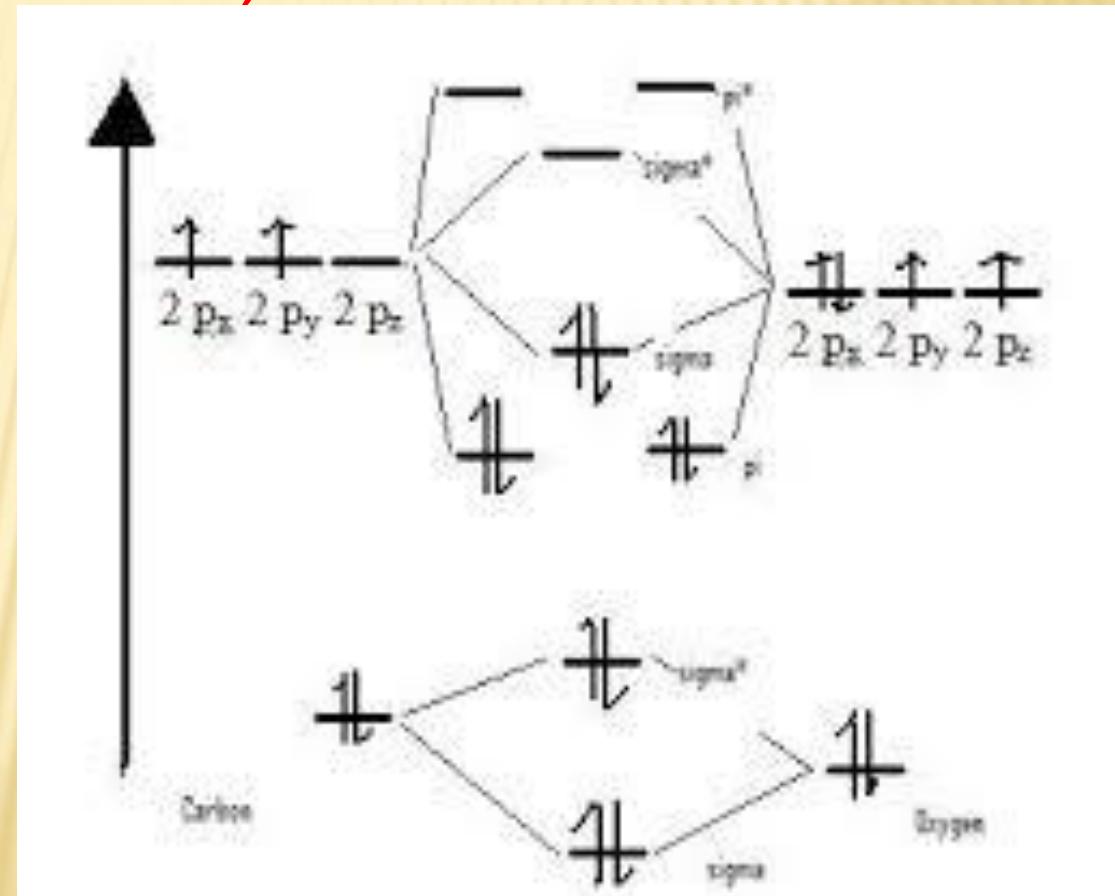
- Bond order (बंध कोटि)

$$= \frac{1}{2} (8-2)$$

$$= 3$$

Diamagnetic

प्रतिचुम्बकीय



# MULTI CENTER ELECTRON DEFICIENT COMPOUNDS

(बहु केन्द्रीय इलेक्ट्रान की कमी वाले योगिक)

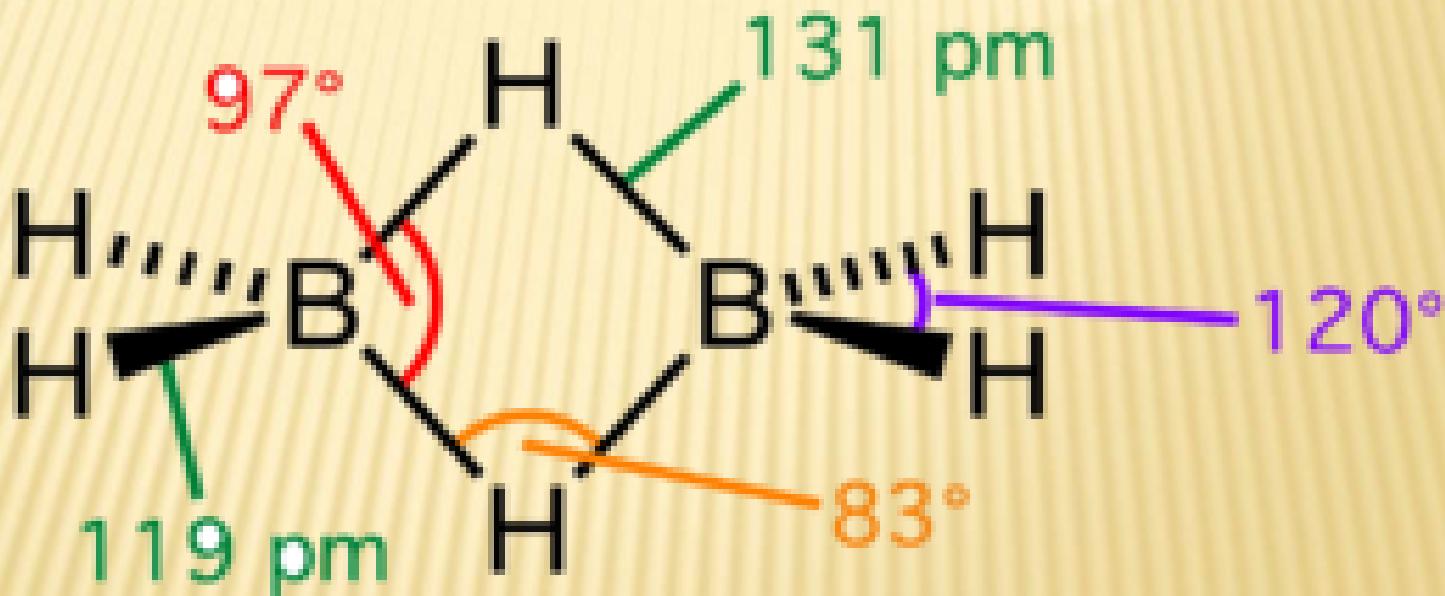
- Three-center two-electron bonds are seen in many boron compounds, such as diborane ( $B_2H_6$ ).
- The monomer  $BH_3$  is unstable since the boron atom is only surrounded by six valence electrons, and thus, to form a stable electron configuration closer to an octet, shares electrons with a B–H bond on another boron atom, forming a B–H–B 3-center-2-electron bond.

# STRUCTURE OF DIBORANE

(दाई बोरेन की संरचना)

In diborane, there are two such bonds:

two H atoms bridge the two B atoms, leaving two additional H atoms in ordinary B–H bonds on each B



# MULTI CENTER ELECTRON DEFICIENT COMPOUNDS

- This bonding pattern is also seen in trimethyl aluminium, which forms a dimer  $\text{Al}_2(\text{CH}_3)_6$  with the carbon atoms of two of the methyl groups in bridging positions.

इसी प्रकार के बंध trimethyl aluminium, में भी होते हैं जिसमें द्विलक  $\text{Al}_2(\text{CH}_3)_6$  का निर्माण होता है !

- This type of bond also occurs in carbon compounds, where it is sometimes referred to as hyperconjugation; another name for asymmetrical three-center two-electron bonds.

# PERCENTAGE IONIC CHARACTER

प्रतिशत आयनिक अभिलक्षण

★ Dipole moment  $\mu = e \times d$

द्विध्रुव आघूर्ण  $\mu = e \times d$

% Ionic Character =  $\{(\mu_{\text{exp}})/(\mu_{\text{theoretical}})\} \times 100$

% आयनिक अभिलक्षण =  $\{(\mu_{\text{exp}})/(\mu_{\text{theoretical}})\} \times 100$

# PERCENTAGE IONIC CHARACTER

## प्रतिशत आयनिक अभिलक्षण

- ✖ The dipole moment of HBr is  $2.60 \times 10^{-30}$  and the inter atomic spacing is 1.41. What is the percentage ionic character of HBr?

$$\mu_{\text{theo}} = \text{electron charge} \times \text{interatomic spacing}$$

$$= (1.6 \times 10^{-19}) \text{ C} \times (1.41 \times 10^{-10}) \text{ m}$$

$$= 2.26 \times 10^{-29} \text{ Cm}$$

# PERCENTAGE IONIC CHARACTER

प्रतिशत आयनिक अभिलक्षण

✖ % ionic character

प्रतिशत आयनिक अभिलक्षण

$$= \{(\mu_{\text{exp}})/(\mu_{\text{theoretical}})\} \times 100$$

$$= [2.6 \times 10^{-30}]/[2.26 \times 10^{-29}]$$

$$= 0.12 \text{ or } 12\%$$

# PERCENTAGE IONIC CHARACTER

## प्रतिशत आयनिक अभिलक्षण

- More the electro negativity difference more will be the ionic character in bond

अधिक विद्युत रिनात्मकता अंतर अधिक प्रतिशत आयनिक अभिलक्षण

Pauling explain the following relation

पौलिंग द्वारा निम्नलिखित सूत्र दिया गया

Percentage Ionic Character

प्रतिशत आयनिक अभिलक्षण

$$= 1 - e^{-0.25(X_a - X_b)} \times 100$$

# PERCENTAGE IONIC CHARACTER

## प्रतिशत आयनिक अभिलक्षण

- इस समीकरण से HF के लिए प्रतिशत आयनिक अभिलक्षण का मान ४४.१२ आता है जो वास्तविक मान ४४.८ के निकट है !
- Hannay and Smith relation हाने और स्मिथ सूत्र  
Percentage Ionic Character

## प्रतिशत आयनिक अभिलक्षण

$$= \{16X(X_a - X_b) + 3.5(X_a - X_b)^2\} \times 100$$

# PERCENTAGE IONIC CHARACTER

## प्रतिशत आयनिक अभिलक्षण

- On this basis if electro negativity difference is 1.7 bond will be 50% ionic.

इस आधार पर विद्युत् रिनात्मकता का अंतर यदि १.७ हो तो बंध ५०% आयनिक होगा

- If it is more bond will be more ionic and vice versa

यदि यह अधिक हो तो अधिक आयनिक एवं यदि कम हो तो कम आयनिक होगा

# BOND ENERGY / BOND STRENGTH

- Bond energy ( $E$ ) is the measure of bond strength in a chemical bond. It is the heat required to break one mole of molecules into their individual atoms.
- बंध ऊर्जा बंध शक्ति का परिचायक है ! यह एक मोल अणुओं को परमाणुओं में पृथक करने में प्रयुक्त होने वाली ऊर्जा है !

# BOND ENERGY / BOND STRENGTH

## ❖ Average Bond energy

= heat of formation / no. of bonds in molecule

= energy required to break bonds into atoms/no. of bonds in molecule

## औसत बांध ऊर्जा

= अणु को उसके परमाणुओं में विघटित करने के लिए आवश्यक ऊर्जा / अणु के बंधों की संख्या

= सम्भवन की ऊर्जा / अणु के बंधों की संख्या

# FACTORS EFFECTING BOND ENERGY

- ✖ No. of orbitals involved in overlapping with extent.  
अतिव्यापन में भाग लेने वाले कक्षकों की संख्या एवं परिमाण
- ✖ Nature of hybridization संकर कक्षकों का स्वाभाव
- ✖ Type of overlapping in orbitals कक्षकों में अतिव्यापन का प्रकार
- ✖ Size of atoms involved in bonding बांध में भाग लेने वाले परमाणुओं का आकार
- ✖ Resonance energy अनुनाद ऊर्जा
- ✖ Electro negativity विद्युत् रिनात्मकता

# REFERENCES AND ACKNOWLEDGEMENTS

- ✖ <http://en.wikipedia.org/>
- ✖ <https://www.google.com>
- ✖ Unified Chemistry; Shivlal Agarwal and Company
- ✖ Text book of Inorganic Chemistry; G.S. Manku
- ✖ Inorganic Chemistry; K.N Upadhyaya

---

Best Of Luck

# Elementary Quantum Mechanics

## (प्रारंभिक क्वांटम यांत्रिकी)

B.Sc. III year Paper –I Unit -I

Kishor Arora

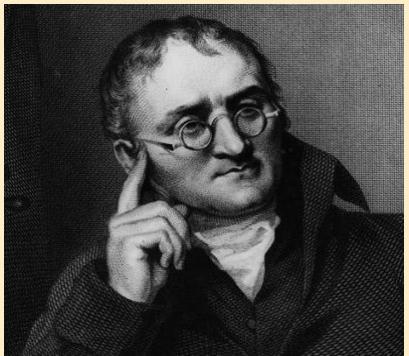
Professor- Chemistry,

Govt. Postgraduate College, Datia ( M.P.) 475 661

किशोर अरोरा

प्राध्यापक- रसायन,

शासकीय स्नातकोत्तर महाविद्यालय, दतिया (म.प्र.)- ४७५६६१



## Dalton's Atomic Theory (डेल्टन का परमाणु सिधान्त )

- Atom is smallest indestructible particle of matter.
- परमाणु पदार्थ का छोटे से छोटा अविभाज्य कण है
- It is the particle responsible for chemical reactions.
- यह कण किसी रासयनिक क्रिया के लिए उत्तरदायी रहता है
- Atoms of similar elements are same and that of different elements are different.
- समान तत्वों के परमाणु समान एवं भिन्न तत्वों के परमाणु भिन्न रहते हैं

J J Thomson - 1897- ELECTRON

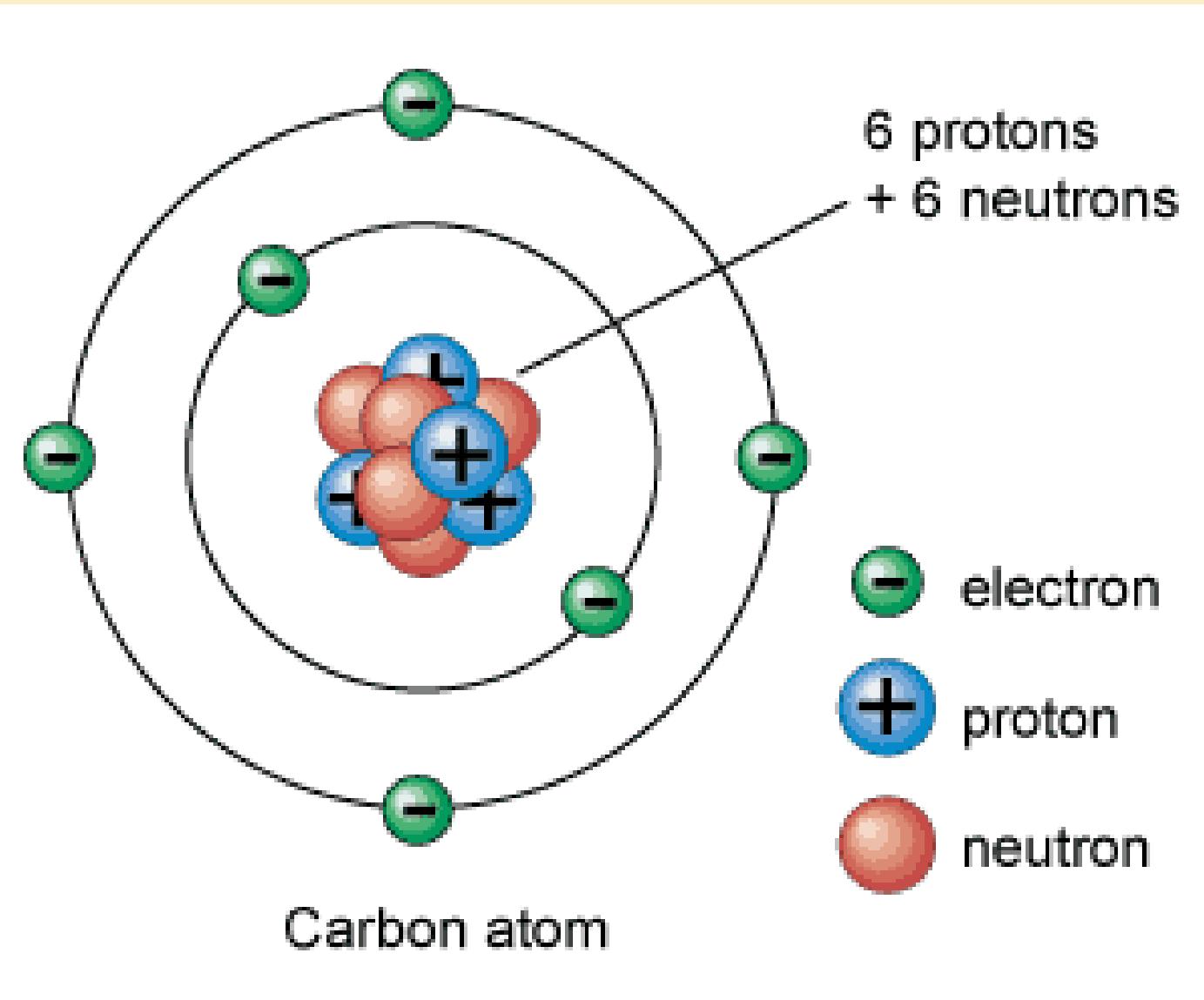
जे.जे. थामसन - १८९७- इलेक्ट्रॉन

Goldstein- 1886- PROTON

गोल्डस्टीन - १८८६- प्रोटोन

Chadwick- 1932- NEUTRON

चेडविक- १९३२- न्यूट्रॉन



Electron  
इलेक्ट्रान

- $9.1 \times 10^{-31}$        $-1.602 \times 10^{-19}$
- (mass)                          (charge)

Proton  
प्रोटोन

- $1.672 \times 10^{-24}$        $+1.602 \times 10^{-19}$
- (mass)                          (charge)

Neutron  
न्यूट्रॉन

- $1.6748 \times 10^{-24}$       0.0
- (mass)                          (charge)

# Planck's Quantum Theory

## (प्लांक की अवधारणा/ सिद्धान्त)

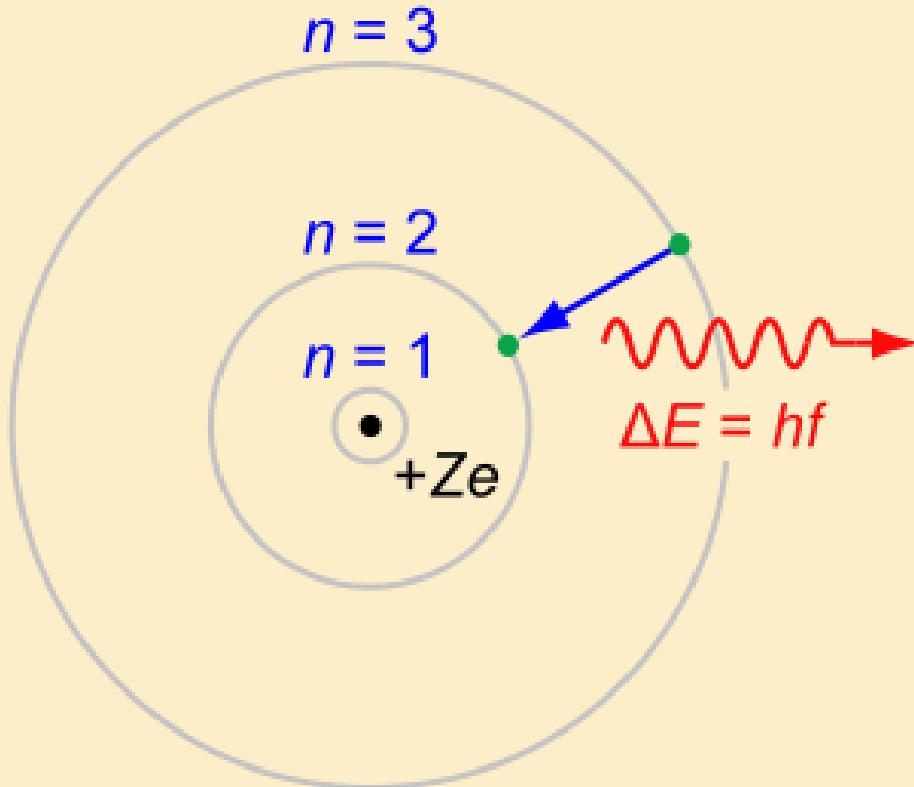


» For frequency  $\nu$ , or for wavelength  $\lambda$ ,  
Planckian radiation can be described thus  
( $\nu$  आवृति एवं  $\lambda$  तरंग दैर्घ्य के लिए):

$$B_\nu(T) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}$$

$$B_\lambda(T) = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda k_B T}} - 1}$$

# Bohr Atom Model (बोहर एटम मॉडल)



# Bohr Atom Model (बोहर एटम मॉडल)

- रेडियस ऑफ इलेक्ट्रान Radius of electron :-

$$r_1 = \frac{\hbar^2}{k_e e^2 m_e} \approx 5.29 \times 10^{-11} \text{m}$$

- Energy of Electron (इलेक्ट्रान की ऊर्जा):-

$$E = -\frac{Z k_e e^2}{2r_n} = -\frac{Z^2 (k_e e^2)^2 m_e}{2\hbar^2 n^2} \approx \frac{-13.6 Z^2}{n^2} \text{eV}$$

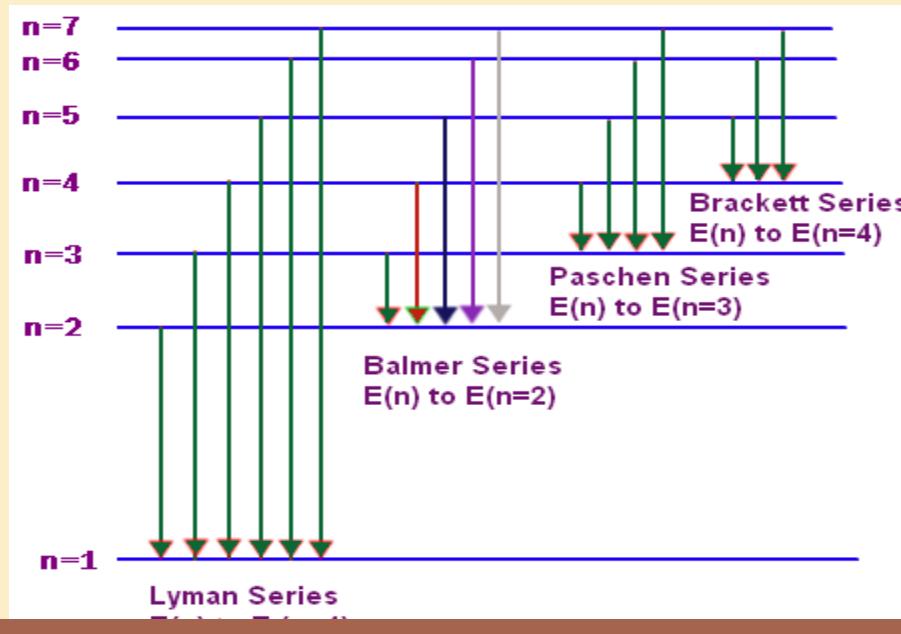
- Velocity of Electron (इलेक्ट्रान का वेग):-

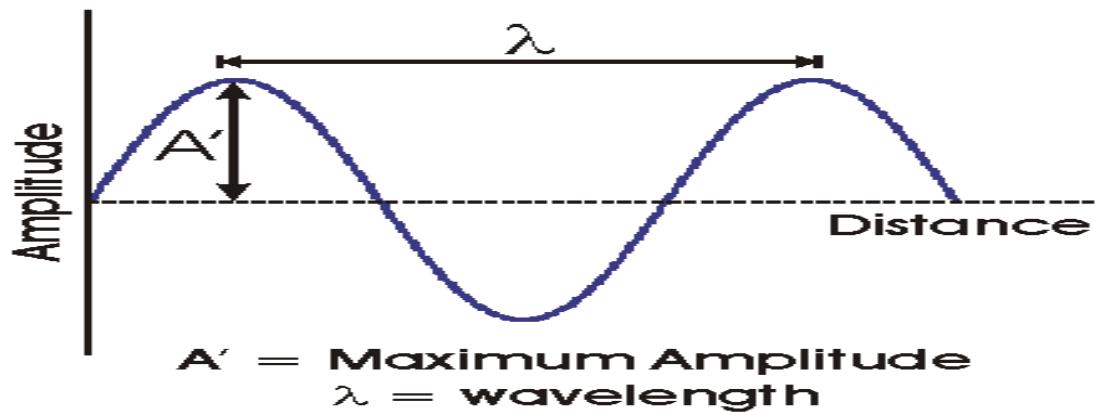
$$v = \sqrt{\frac{Z k_e e^2}{m_e r}}$$

# Rydberg's Formula (रिद्बेर्ग सूत्र)

$$E = E_i - E_f = R_E \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

$$\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right).$$



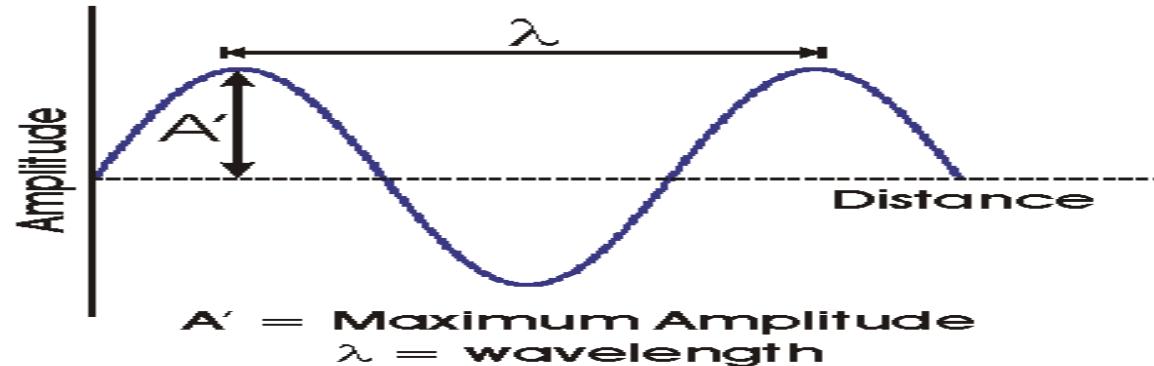


Wave length (तरंग देर्घ्य)  $\lambda$ -nm, cm,  $\text{\AA}$ ,

Frequency (आवृत्ति)  $v$  -Hz, cps

Velocity (वेग)  $c$ -  $3 \times 10^{10}$  cm/s

Wave number (तरंग संख्या)= $1/\lambda$  ( $\text{cm}^{-1}$ )



$$C = v \lambda$$

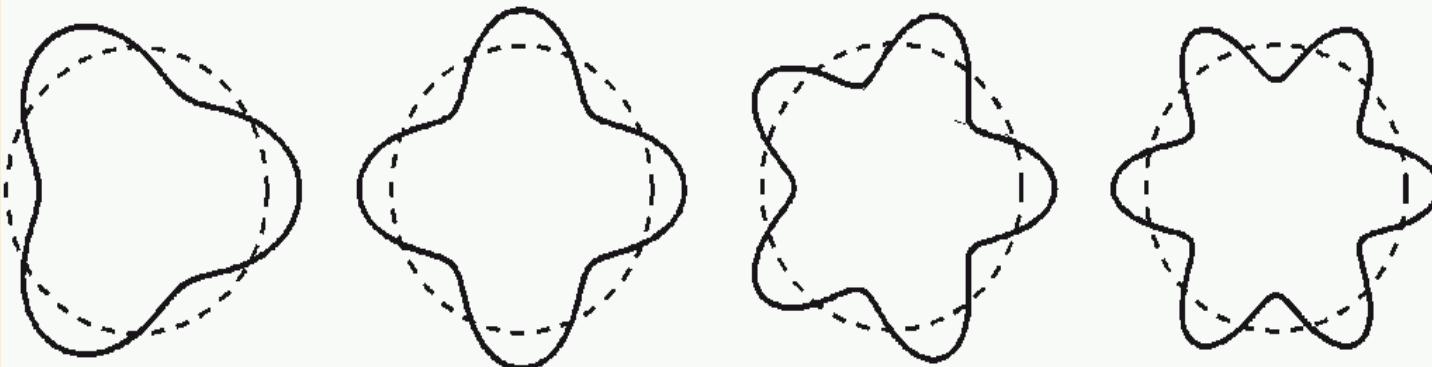
$$E = h\nu$$

$$E = hc/\lambda$$



## De Broglie's idea

### (दे ब्रोग्ली की धारणा)



## De Broglie's equation

(दे ब्रोग्ली का समीकरण)

Einstein's eq. (आइंस्टीन समीकरण).:  $E=mc^2$

Plank's eq. (प्लांक समीकरण):  $E=h\nu$

or (अथवा)  $E=hc/\lambda$

Equating both... (दोनों समीकरण से)

$$hc/\lambda=mc^2$$

thus (अतः),

$$\lambda=h/mc = \lambda=h/p_p$$

or (अथवा)

$$\lambda=h/mv = \lambda=h/p_e$$

# Heisenberg's Uncertainty Principle

## (हेइसेंबर्ग का अनिश्चितता का सिधान्त)



- In his celebrated 1927 paper, Heisenberg established this expression as the minimum amount of unavoidable momentum disturbance caused by any position measurement

(१९२७ में अपने एक शोध पत्र में हेइसेंबर्ग द्वारा संवेग में अवांछित विचलन के बारे में बताया गया जो की स्थिति के मापन के कारण हो ),

$$\Delta x \Delta p \gtrsim h \quad (1)$$

- but he did not give a precise definition for the uncertainties  $\Delta x$  and  $\Delta p$

(लेकिन उनके द्वारा  $\Delta x$  और  $\Delta p$  के बारे में कोई भी सटीक परिभाषा नहीं दी गई ) .

- In his Chicago lecture he refined his principle

(अपने शिकागो के व्याख्यान में उनके द्वारा यह सिधान्त इस प्रकार संशोधित किया गया):

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (2)$$

# Orbit and Orbital

## (कक्ष एवं कक्षक)

### • ORBIT

1. It is well-defined circular path followed by electron around nucleus.

यह एक सुनिश्चित वृत्ताकार पथ है जिस पर इलेक्ट्रान नाभिक के चारों ओर गतिमान होते हैं

2. It represents two dimensional motion of electron around nucleus.

इसमें इलेक्ट्रान की नाभिक के चारों ओर द्विविमीय गति होती है

# Orbit and Orbital (कक्ष एवं कक्षक)

## ORBIT

3. The maximum no. of electrons in an orbit is  $2n^2$ .

एक कक्ष में अधिकतम इलेक्ट्रान संख्या  $2n^2$  हो सकती है

4. Orbit is circular in shape.

कक्ष वृत्ताकार होते हैं

# Orbit and Orbital (कक्ष एवं कक्षक)

## ORBITAL

1. It is a region of space around the nucleus where the probability of finding an electron is maximum.

यह नाभिक के चारों ओर वेह क्षेत्र है जहाँ इलेक्ट्रान के पाए जाने की प्रयिकता अधिक होती है।

2. It represents three dimensional motion of electron around nucleus.

इलेक्ट्रान की नाभिक के चारों ओर त्रिविमीय गति को दर्शाता है।

# Orbit and Orbital (कक्ष एवं कक्षक)

- **ORBITAL**

3. The maximum no. of electrons in an orbital is 2.

एक कक्षक में अधिकतम इलेक्ट्रान की संख्या 2 होती है

4. Orbitals have different shapes.

कक्षकों की आकृति भिन्न हो सकती है

# Schrodinger Equation

## (श्रोदिन्गेर समीकरण)

$$H\Psi = E\Psi$$



$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

# Schrodinger Equation (Derivation)

(श्रोदिन्गेर समीकरण व्युत्पत्ति)

- We start with the one-dimensional classical wave equation, चिरसम्मत यांत्रिकी के आधार पर एक विमीय तरंग समीकरण है

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$$

- By introducing the wave function तरंग फलन लेने पर

$$u(x, t) = \psi(x)f(t)$$

- we obtain हमें प्राप्त होगा

$$f(t) \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = \frac{1}{v^2} \psi(x) \frac{d^2 f(t)}{dt^2}$$

# Schrodinger Equation (Derivation)

(श्रोदिन्गेर समीकरण व्युत्पत्ति)

If we introduce one of the standard wave equation solutions for  $f(t)$  such as  $e^{i\omega t}$

यदि तरंग समीकरण  $f(t)$  का मानक हल  $e^{i\omega t}$  लिया जाये तो

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{\omega^2}{v^2}\psi(x)$$

Now we have an ordinary differential equation describing the spatial amplitude of the matter wave as a function of position  
यह एक साधारण अवकल समीकरण है जो त्रिविम में तरंग के amplitude को स्थिति के फलन से सम्बन्धित करता है

# Schrodinger Equation (Derivation)

(श्रोदिन्गेर समीकरण व्युत्पत्ति)

- The energy of a particle is the sum of kinetic and potential parts कुल ऊर्जा गतिज एवं स्थितिज ऊर्जा का योग होगी

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

- which can be solved for the momentum, p , to obtain जिससे संबंधित p के लिए हल किया जा सकती है

$$p = \{2m[E - V(x)]\}^{1/2}$$

# Schrodinger Equation (Derivation)

(श्रोदिन्गेर समीकरण व्युत्पत्ति)

- we can use the de Broglie formula to get an expression for the wavelength हम दी ब्रोग्ली सूत्र का उपयोग कर तरंग देख्य इस प्रकार प्राप्त कर सकते हैं

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\{2m[E - V(x)]\}^{1/2}}$$

- The term  $\omega^2/v^2$  in one of the above equation can be rewritten in terms of  $\lambda$  उपरोक्त में से एक समीकरण में पद  $\omega^2/v^2$  पुनः  $\lambda$  के पद में

# Schrodinger Equation (Derivation)

(श्रोदिन्गेर समीकरण व्युत्पत्ति)

$$\frac{\omega^2}{v^2} = \frac{4\pi^2\nu^2}{v^2} = \frac{4\pi^2}{\lambda^2} = \frac{2m[E - V(x)]}{\hbar^2}$$

- Since  $\omega = 2\pi\nu$  and  $\nu\lambda = v$
- When this result is substituted into differential equation जब उपरोक्त को अवकल समीकरण में प्रतिस्थापित किया जाये we get an equation हमें एक समीकरण प्राप्त होगा

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\psi(x) = 0$$

# Schrodinger Equation (Derivation)

(श्रोदिन्गेर समीकरण व्युत्पत्ति)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

- It is one dimensional time independent Schrodinger equation यह एक विमीय समय स्वतंत्र श्रोदिन्गेर समीकरण है
- Writing three dimensional equation in suitable form त्रिविमीय समीकरण एक उपर्युक्त प्रकार से लिखने पर

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

# Applications of Schrodinger Equation

## (श्रोडिंगर समीकरण के अनुप्रयोग)

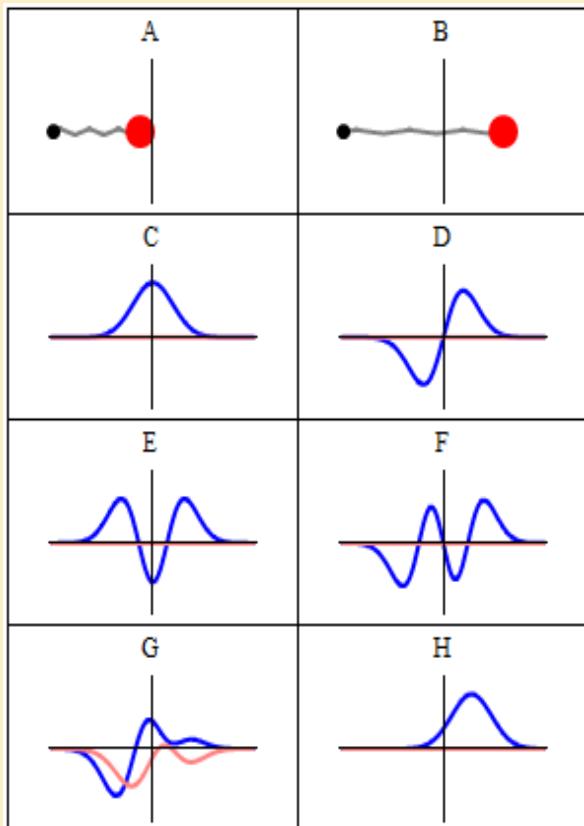
- Understanding behavior of micro particles  
(सूक्ष्म कणों के व्यवहार को समझाने में )
- Estimating energy and wave function for such particles (ऐसे कणों के लिए ऊर्जा एवं तरंग फलन ज्ञात करने में)
- Estimation of translation motion of elementary particle in space (त्रिविम में सूक्ष्म कण की स्थानातरित गति के निर्धारण में)

# Applications of Schrodinger Equation

## (श्रोदिंगर समीकरण के अनुप्रयोग)

- Clarification of atomic and molecular structure  
(परमाणिक एवं आणविक संरचना के स्पष्टीकरण में )
- Analysis of molecular motions (आणविक गति के विश्लेषण में)
- Ascertaining translational motion of an elementary particle (अंतराकाश में किसिस्कन के स्थानात्मक गति के निर्धारण में)

# Wave Function (तरंग फलन)



A wave function or wavefunction (also named a state function) in quantum mechanics describes the quantum state of a particle and how it behaves.  
(एक तरंग फलन अथवा अवस्था फलन क्वांटम यांत्रिकी में कण की क्वांटम अवस्था को या व्यवहार को दर्शाता है)

It is a function of space and time  
(यह त्रिविम एवं समय का फलन है)

The most common symbols for a wave function are  $\psi$  or  $\Psi$   
(इसे सामान्यत  $\psi$  चिन्ह से प्रदर्शित करते हैं)

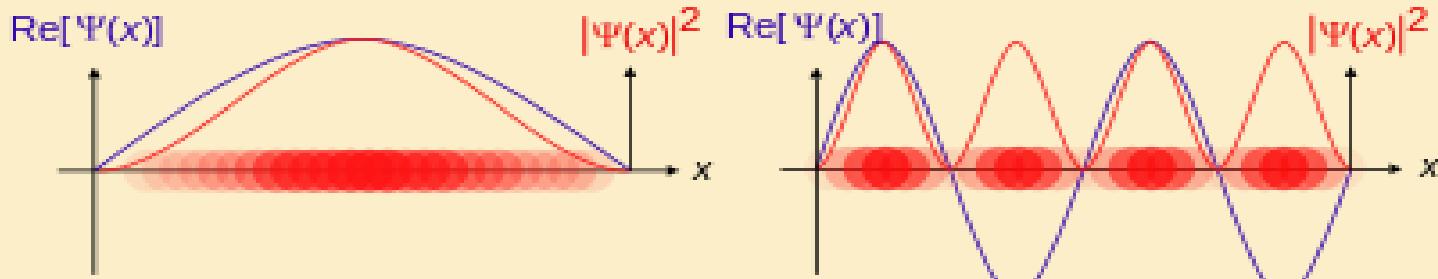
# Wave Function (तरंग फलन)

- Wave function can be expressed as (तरंग फलन व्यक्त किया जा सकता है):-

$$\Psi(x, t)$$

- Shi square is significant instead of shi (शाई के स्थान पर शाई के वर्ग का महत्व है):-

$$|\psi|^2$$



# Wave Function

## (तरंग फलन)

- $\Psi$  must be single valued , finite and continuous
  - $\Psi$  एकल मान वाला , मापने योग्य एवं सतत होना चाहिए
  - That is why  $\Psi = \tan x$  is not at all physically significant.
  - इसी कारण से  $\Psi = \tan x$  भौतिक रूप से महत्व वाला फलन नहीं है

# Wave Function (तरंग फलन)

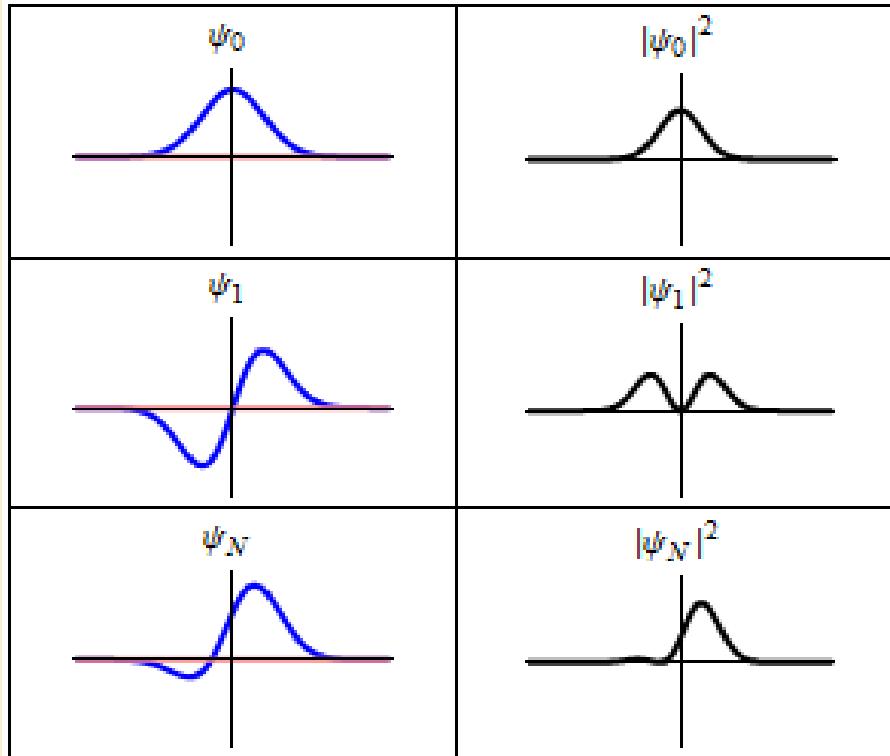
- Normalized wave function (प्रसमानार्थित तरंग फलन):-

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi(x, t)|^2 = 1 ,$$

- Orthogonal Wave function (ओर्थोगोनल लम्बकोनीय तरंग फलन)

# Wave Function

## (तरंग फलन)



# Eigen Function (एइगेन फलन)

- Eigen Equation (एइगेन समीकरण)

$$\mathcal{A}f = \lambda f$$

$$Df = \lambda f$$

- Vibrating String (कम्पन करते स्ट्रिंग का)

$$\frac{\partial^2 h}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 h}{\partial x^2},$$

# H-Atom ( H-परमाणु )

- Schrodinger equation (श्रोदिन्गेर समीकरण):-

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}\psi$$

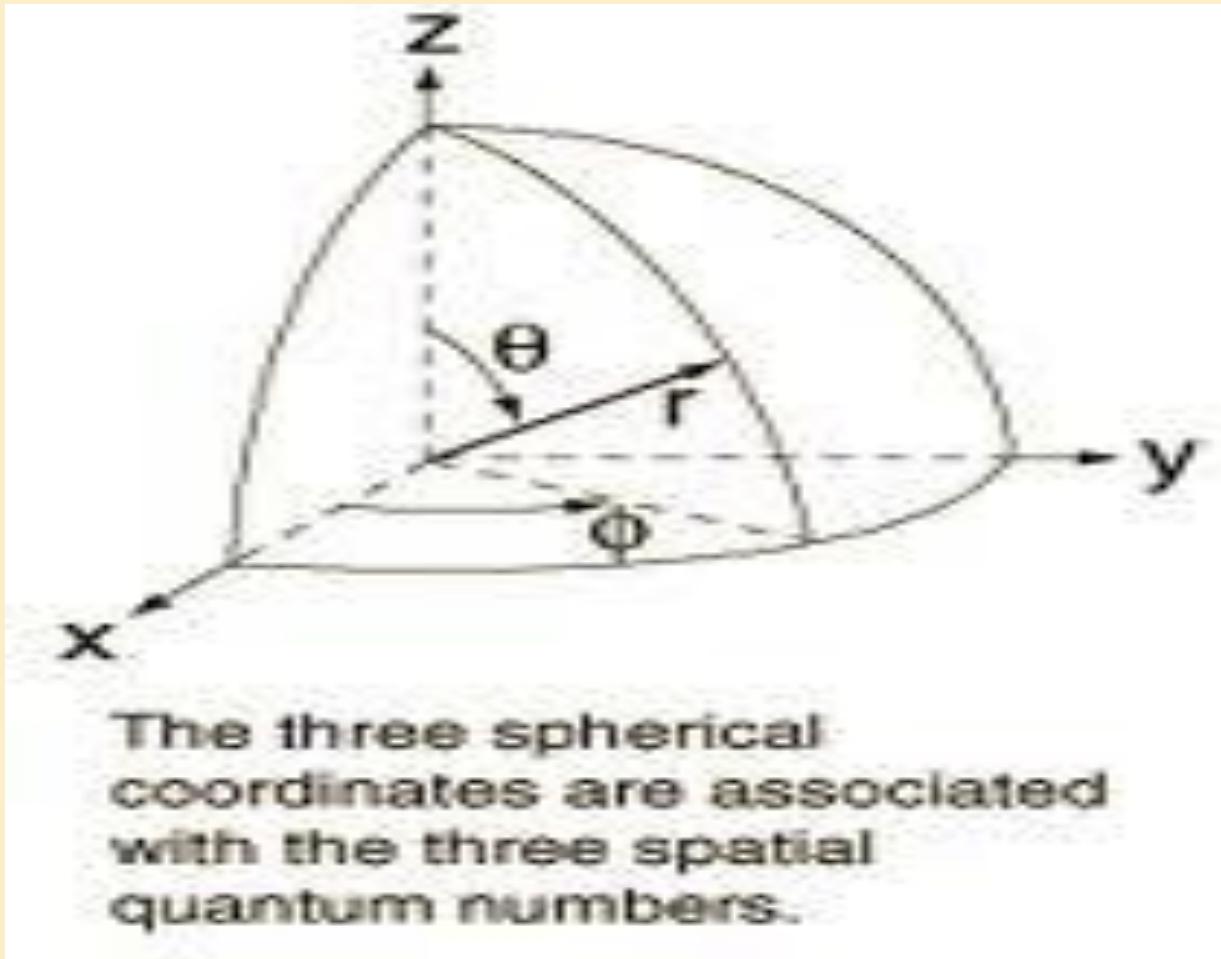
- Where (जहाँ):-  $\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}$

- Wave function (तरंग फलन):-

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y_\ell^m(\theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

# Wave Function for H-Atom

## (H - परमाणु का तरंग फलन )



# H-Atom ( H-परमाणु )

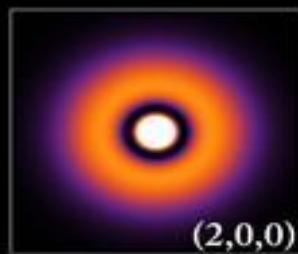
- Wave Function (तरंग फलन):-

$$\psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi) = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+\ell)!]}} e^{-r/na_0} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^\ell L_{n-\ell-1}^{2\ell+1} \left(\frac{2r}{na_0}\right) \cdot Y_\ell^m(\theta, \phi)$$

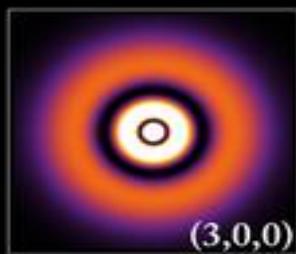
- Where (जहाँ):-

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$$

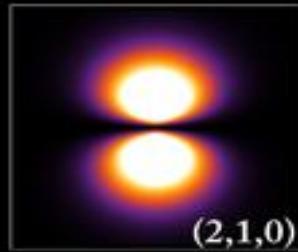
(Bohr Radius बोर त्रिज्या)



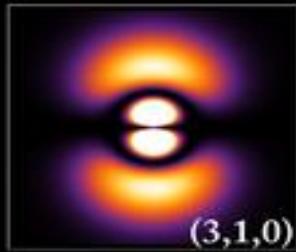
(2,0,0)



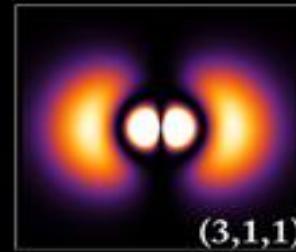
(3,0,0)



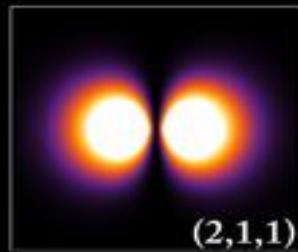
(2,1,0)



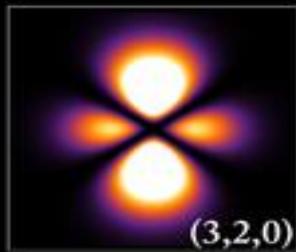
(3,1,0)



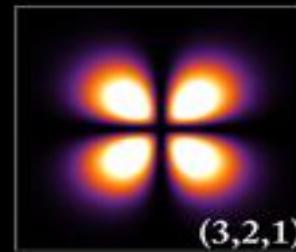
(3,1,1)



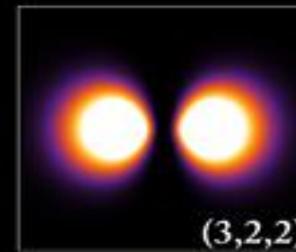
(2,1,1)



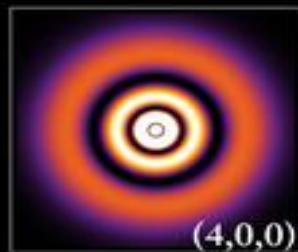
(3,2,0)



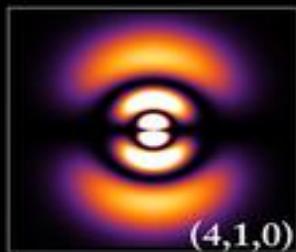
(3,2,1)



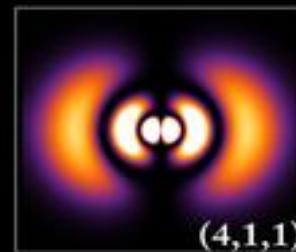
(3,2,2)



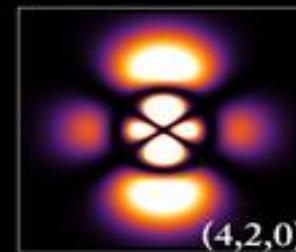
(4,0,0)



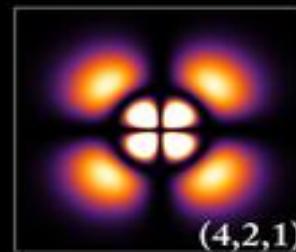
(4,1,0)



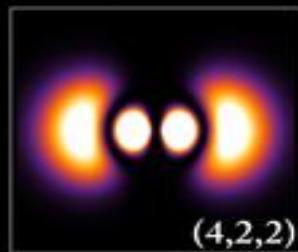
(4,1,1)



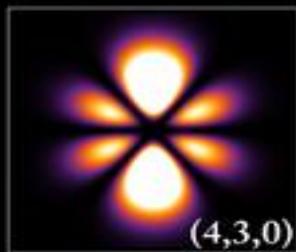
(4,2,0)



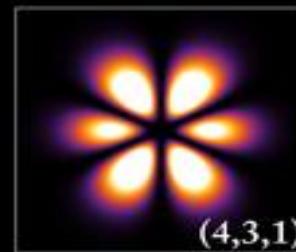
(4,2,1)



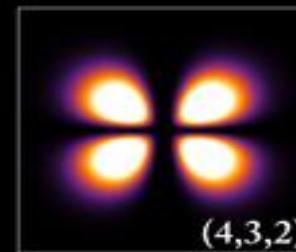
(4,2,2)



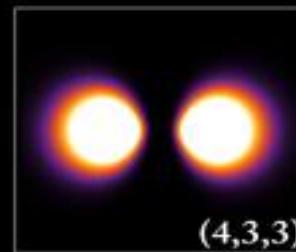
(4,3,0)



(4,3,1)



(4,3,2)



(4,3,3)

# Hydrogen Wave Function

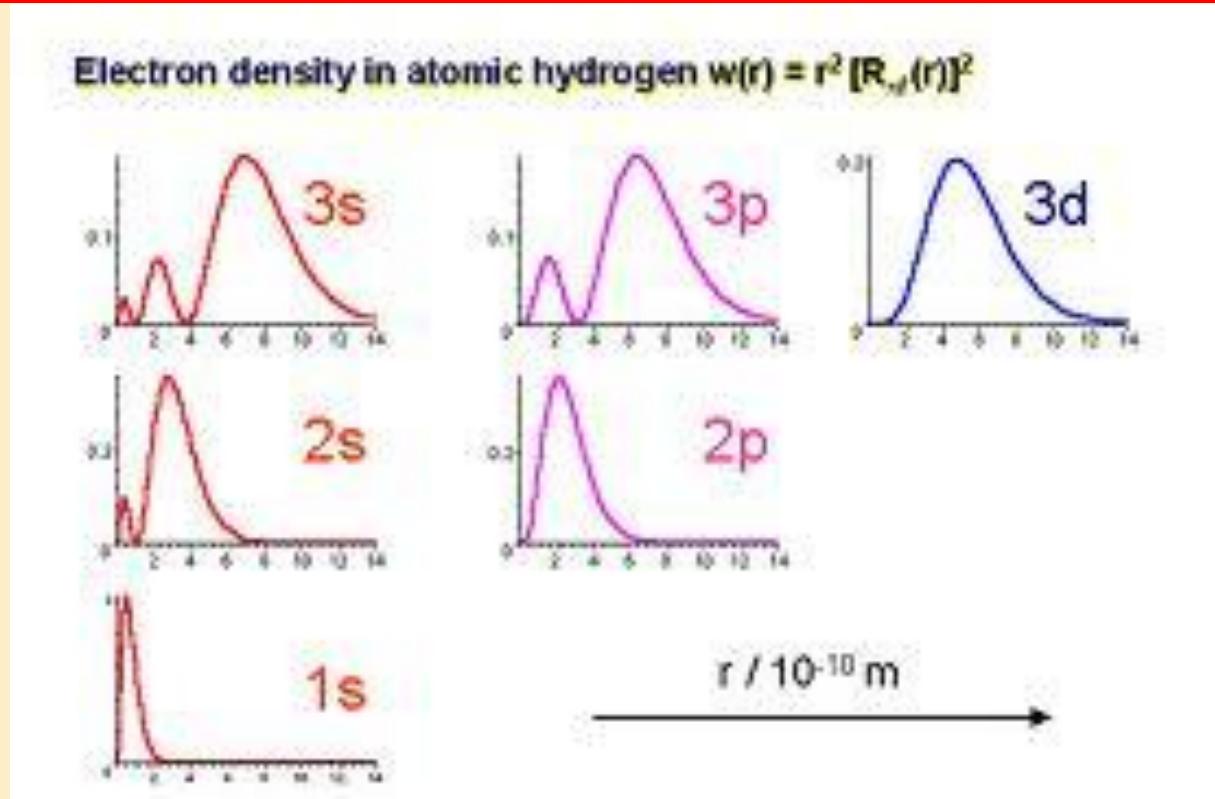
Probability density plots.

$$\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]}} e^{-\rho/2} \rho^l L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) \cdot Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

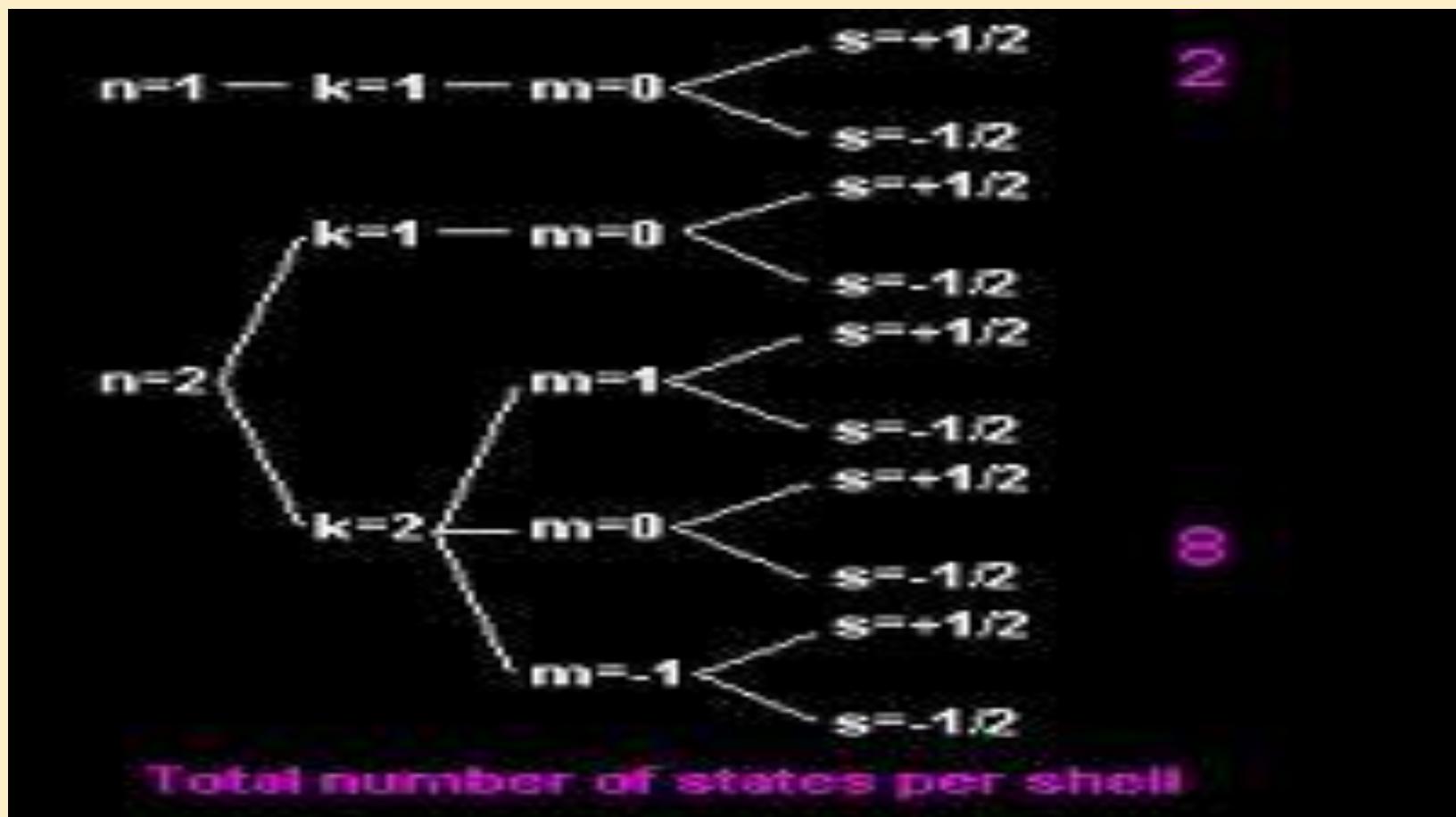
# Radial Probability Distribution

## Function

(त्रिज्या प्रयिककता वितरण फलन)

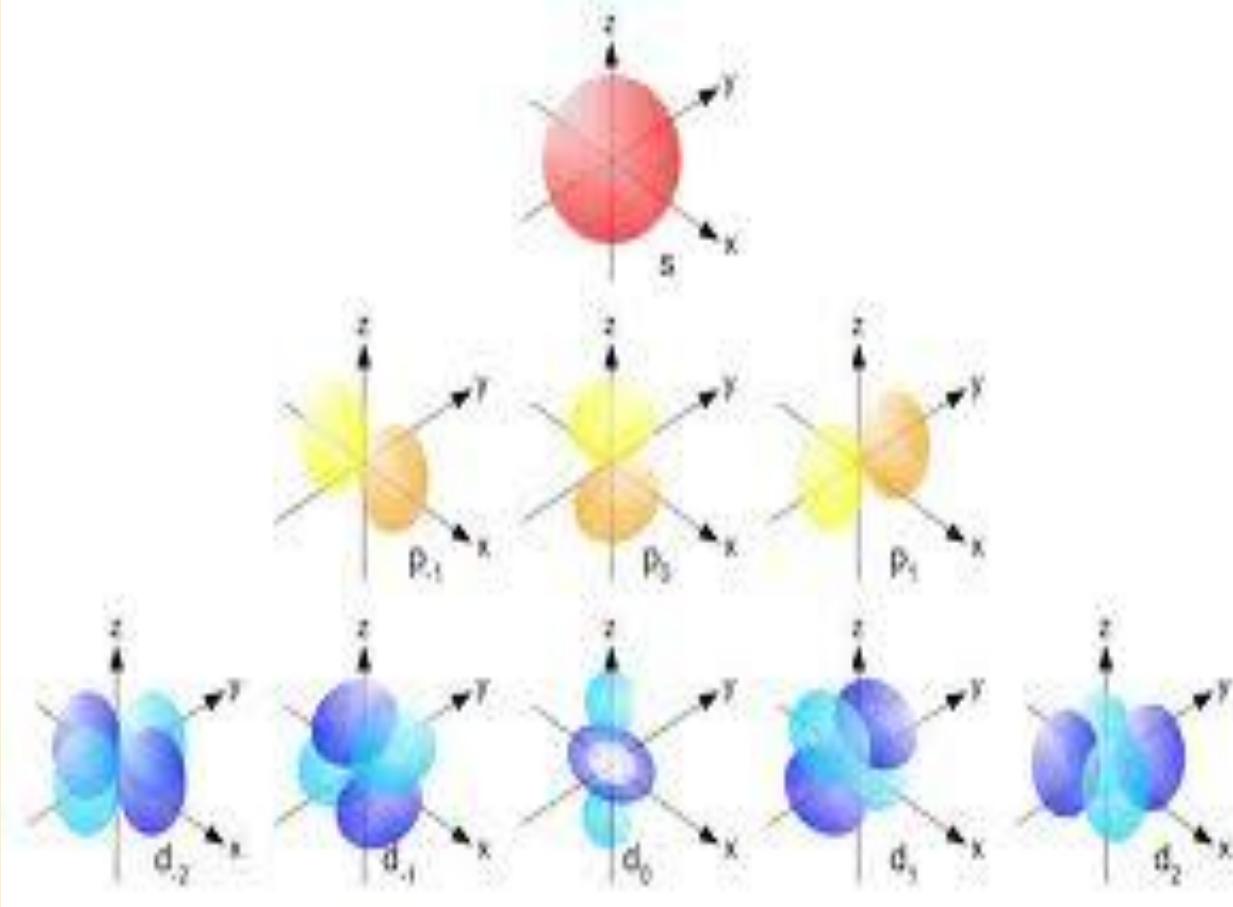


# Quantum Numbers(क्वांटम संख्या )



# Shapes of Orbitals

## (कक्षकों का आकार)



# Effective nuclear charge (प्रभावी नाभिकीय आवेश )

- The **effective nuclear charge** (often symbolized as  $Z^*$ ) is the net positive charge experienced by an electron in a multi-electron atom. (प्रभावी नाभिकीय आवेश, जिसे से दर्शाया जाता है, किसी बहु-एलेक्ट्रोनी निकाय में एक इलेक्ट्रान द्वारा अनुभव किया जाने वाला नेट धनात्मक आवेश है)
- The term "effective" is used because the shielding effect of negatively charged electrons prevents higher orbital electrons from experiencing the full nuclear charge by the repelling effect of inner-layer electrons. (पद प्रभावी आंतरिक कक्ष के एलेक्ट्रोनों के आवरणी अथवा परिरक्षण प्रभाव के कारण प्रयुक्ति किया गया है )

# Effective nuclear charge

## (प्रभावी नाभिकीय आवेश )

- It is estimated as (इसे निम्न अनुसार परिकलित कर सकते हैं )

$$Z_{eff} = Z - S$$

- S can be computed according to the following rules ( को निम्न नियमों के अनुसार ज्ञात कर सकते हैं)

Group	Other electrons in the same group	Electrons in group(s) with <u>principal quantum number</u> n and <u>azimuthal quantum number</u> < l	Electrons in group(s) with <u>principal quantum number</u> n-1	Electrons in all group(s) with <u>principal quantum number</u> < n-1
[1s]	0.30	-	-	-
[ns,np]	0.35	-	0.85	1
[nd] or [nf]	0.35	1	1	1

# Effective nuclear charge

## (प्रभावी नाभिकीय आवेश )

- He (1s<sub>2</sub>); S = 1×0.30 = 0.30; Z<sub>eff</sub> = 2-0.30 = 1.70
- N (1s<sub>2</sub> 2s<sub>2</sub> 2p<sub>3</sub>); S= 4×0.30 +2×0.85 = 3.10; Z<sub>eff</sub> = 7-3.10 = 3.90

$$Z_{eff}(F^-) = 9 - 2 = 7+$$

$$Z_{eff}(Ne) = 10 - 2 = 8+$$

$$Z_{eff}(Na^+) = 11 - 2 = 9+$$

# Effective nuclear charge

## (प्रभावी नाभिकीय आवेश )

- It is used in estimation of bond length and bond energy (आबंध लम्बाई एवं आबंध ऊर्जा की गणना में इसका उपयोग होता है)
- It is used in the estimation of IP for elements (तत्वों के आयनन विभव की गणना में इसका उपयोग होता है)
- Pauling had used it in the estimation of electro negativity of elements (पौलिंग द्वारा इसका उपयोग तत्वों की विद्युत् रिनात्मकता को ज्ञात करने में किया गया)
- Some properties can also be explained as filing order of 4s and 3d (तत्वों के कुछ गुण भी इस के आधार पर ज्ञात कर सकते हैं जैसे 4s एवं 3d में एलेक्ट्रॉनों को भरने का आईर)

# Pauli's Exclusion Principle

## (पौली का अपवर्जन नियम)

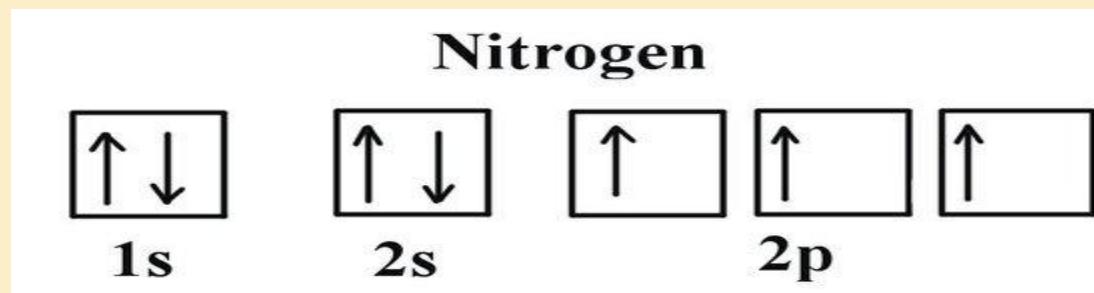
- *It is impossible for two electrons of a poly-electron atom to have the same values of the four quantum numbers ( $n$ ,  $\ell$ ,  $m_\ell$  and  $m_s$ ).*
- किसी बहु इलेक्ट्रोनि निकाय में किन्ही दो इलेक्ट्रॉन्स की चारों क्वाटम संख्याओं के मान समान नहीं हो सकते
- For two electrons residing in the same orbital,  $n$ ,  $\ell$ , and  $m_\ell$  are the same, so  $m_s$  must be different and the electrons have opposite spins.
- एक ही कक्षक में यदि दो इलेक्ट्रान हों तो उनका  $n$ ,  $\ell$ , और  $m_\ell$  समान हो पर  $m_s$  भिन्न होगा अर्थात् उन दोनों इलेक्ट्रॉनों की चक्र गति भिन्न होंगी

# Hund's Rule of Maximum Multiplicity

(हूंड का अधिकतम बहुलता का नियम)

- If we look at the correct electron configuration of Nitrogen
- इस नियम के अनुसार नाइट्रोजन का सही इलेक्ट्रॉनिक विन्यास होगा

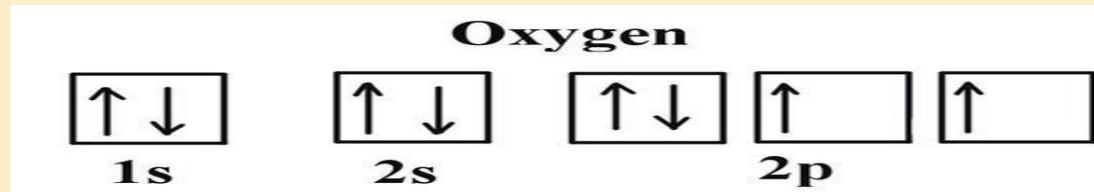
$$(Z = 7): 1s^2 \ 2s^2 \ 2p^3$$



# Hund's Rule of Maximum Multiplicity

## (हैंड का अधिकतम बहुलता का नियम)

- If we look at the element after Nitrogen in the same period, Oxygen ( $Z = 8$ ) its electron configuration is:
- यदि नाइट्रोजन के पश्चात ऑक्सीजन को ले तो इसका इलेक्ट्रॉनिक विन्यास होगा
- $1s^2 \ 2s^2 \ 2p^4$

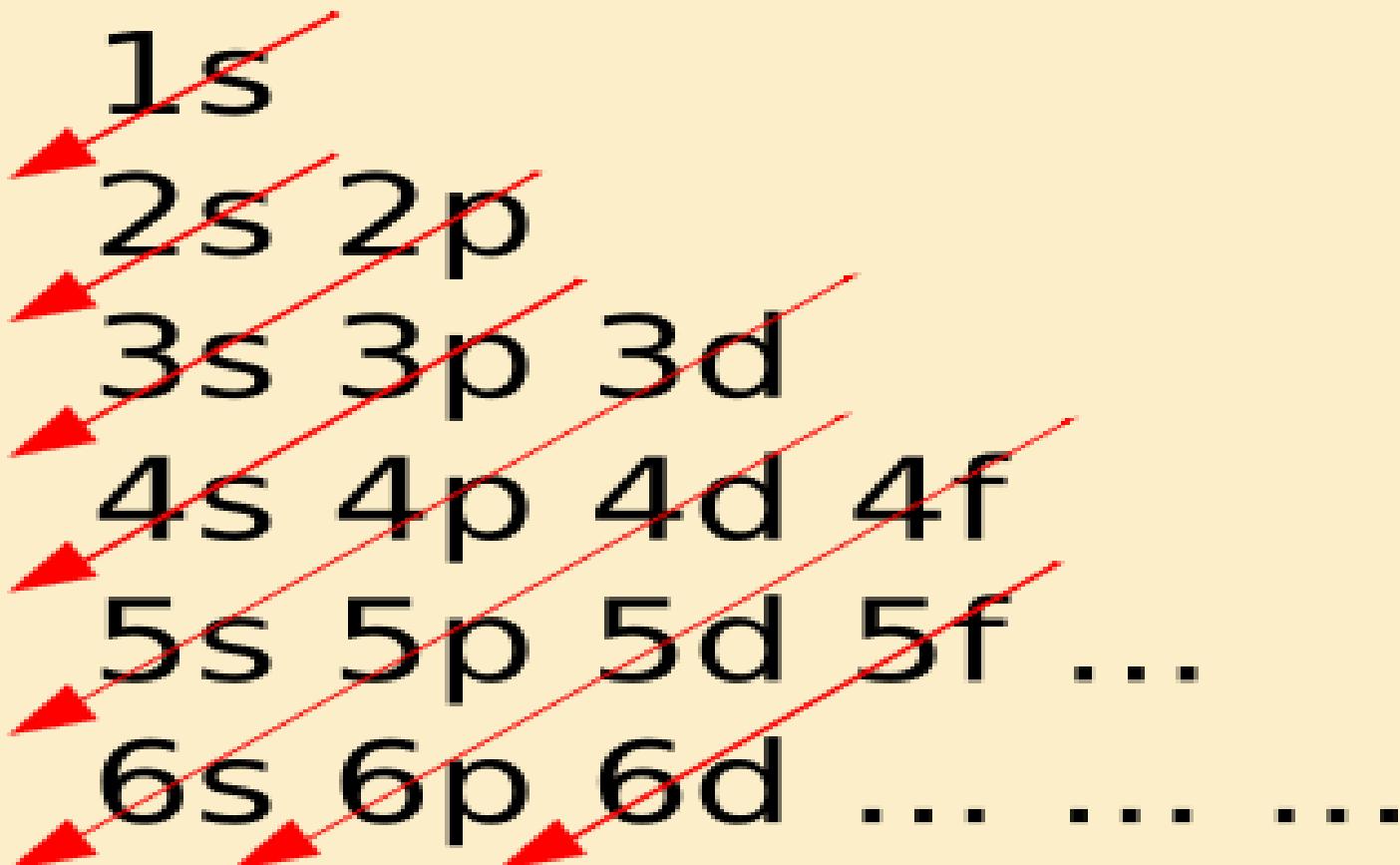


- Oxygen has one more electron than Nitrogen and as the orbitals are all half filled the electron must pair up.

ऑक्सीजन के पास नाइट्रोजन की तुलना में एक और इलेक्ट्रॉन है, यदि सभी कक्षक अधृपूर्ण हैं तो इलेक्ट्रॉन का युग्मन होगा

# Aufbau's Principle

## औफबाऊ का सिधान्त



# Exceptions in Aufbau Principle

## ऑफबाऊ सिधान्त में अपवाद

- The rule then predicts the configuration of  $_{29}\text{Cu}$  to be  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^9$ , or  $[\text{Ar}]4s^2 3d^9$

इस नियम से  $_{29}\text{Cu}$  का इलेक्ट्रॉनिक विन्यास इस प्रकार होगा  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^9$ , or  $[\text{Ar}]4s^2 3d^9$

- However the experimental electronic configuration of the copper atom is  $[\text{Ar}]4s^1 3d^{10}$   
जबकि  $_{29}\text{Cu}$  का इलेक्ट्रॉनिक विन्यास है  $[\text{Ar}]4s^1 3d^{10}$

# Exceptions in Aufbau Principle

## औफबाऊ सिधान्त में अपवाद

- Similarly, chromium takes the electronic configuration of  $[Ar]4s^13d^5$  instead of  $[Ar]4s^23d^4$

इसी प्रकार क्रोमियम का इलेक्ट्रॉनिक विन्यास है

$[Ar]4s^13d^5$

# Electronic Configuration

## इलेक्ट्रॉनिक विन्यास

Atomic Number	Element Symbol	Electron Configuration	Number of Valence Electrons
1	H	$1s^1$	1
2	He	$1s^2$	2
3	Li	$1s^2 2s^1$	1
4	Be	$1s^2 2s^2$	2
5	B	$1s^2 2s^2 2p^1$	3
6	C	$1s^2 2s^2 2p^2$	4
7	N	$1s^2 2s^2 2p^3$	5
8	O	$1s^2 2s^2 2p^4$	6
9	F	$1s^2 2s^2 2p^5$	7
10	Ne	$1s^2 2s^2 2p^6$	8

Atomic number	Symbol	Electron configuration	Atomic number	Symbol	Electron configuration	Atomic number	Symbol	Electron configuration
1	H	$1s^1$	37	Rb	$[Kr]5s^1$	73	Ta	$[Xe]6s^24f^{14}5d^3$
2	He	$1s^2$	38	Sr	$[Kr]5s^2$	74	W	$[Xe]6s^24f^{14}5d^4$
3	Li	$[He]2s^1$	39	Y	$[Kr]5s^24d^1$	75	Re	$[Xe]6s^24f^{14}5d^5$
4	Be	$[He]2s^2$	40	Zr	$[Kr]5s^24d^2$	76	Os	$[Xe]6s^24f^{14}5d^6$
5	B	$[He]2s^22p^1$	41	Nb	$[Kr]5s^14d^4$	77	Ir	$[Xe]6s^24f^{14}5d^7$
6	C	$[He]2s^22p^2$	42	Mo	$[Kr]5s^14d^5$	78	Pt	$[Xe]6s^14f^{14}5d^9$
7	N	$[He]2s^22p^3$	43	Tc	$[Kr]5s^24d^5$	79	Au	$[Xe]6s^14f^{14}5d^{10}$
8	O	$[He]2s^22p^4$	44	Ru	$[Kr]5s^14d^7$	80	Hg	$[Xe]6s^24f^{14}5d^{10}$
9	F	$[He]2s^22p^5$	45	Rh	$[Kr]5s^14d^8$	81	Tl	$[Xe]6s^24f^{14}5d^{10}6p^1$
10	Ne	$[He]2s^22p^6$	46	Pd	$[Kr]4d^{10}$	82	Pb	$[Xe]6s^24f^{14}5d^{10}6p^2$
11	Na	$[Ne]3s^1$	47	Ag	$[Kr]5s^14d^{10}$	83	Bi	$[Xe]6s^24f^{14}5d^{10}6p^3$
12	Mg	$[Ne]3s^2$	48	Cd	$[Kr]5s^24d^{10}$	84	Po	$[Xe]6s^24f^{14}5d^{10}6p^4$
13	Al	$[Ne]3s^23p^1$	49	In	$[Kr]5s^14d^{10}5p^1$	85	At	$[Xe]6s^24f^{14}5d^{10}6p^5$
14	Si	$[Ne]3s^23p^2$	50	Sn	$[Kr]5s^14d^{10}5p^2$	86	Rn	$[Xe]6s^24f^{14}5d^{10}6p^6$
15	P	$[Ne]3s^23p^3$	51	Sb	$[Kr]5s^14d^{10}5p^3$	87	Fr	$[Rn]7s^1$
16	S	$[Ne]3s^23p^4$	52	Te	$[Kr]5s^14d^{10}5p^4$	88	Ra	$[Rn]7s^2$
17	Cl	$[Ne]3s^23p^5$	53	I	$[Kr]5s^14d^{10}5p^5$	89	Ac	$[Rn]7s^26d^1$
18	Ar	$[Ne]3s^23p^6$	54	Xe	$[Kr]5s^14d^{10}5p^6$	90	Th	$[Rn]7s^26d^2$
19	K	$[Ar]4s^1$	55	Cs	$[Xe]6s^1$	91	Pa	$[Rn]7s^25f^26d^1$
20	Ca	$[Ar]4s^2$	56	Ba	$[Xe]6s^2$	92	U	$[Rn]7s^25f^36d^1$
21	Sc	$[Ar]4s^23d^1$	57	La	$[Xe]6s^25d^1$	93	Np	$[Rn]7s^25f^46d^1$
22	Ti	$[Ar]4s^23d^2$	58	Ce	$[Xe]6s^24f^15d^1$	94	Pu	$[Rn]7s^25f^6$
23	V	$[Ar]4s^23d^3$	59	Pr	$[Xe]6s^24f^3$	95	Am	$[Rn]7s^25f^7$
24	Cr	$[Ar]4s^23d^5$	60	Nd	$[Xe]6s^24f^4$	96	Cm	$[Rn]7s^25f^66d^1$
25	Mn	$[Ar]4s^23d^5$	61	Pm	$[Xe]6s^24f^5$	97	Bk	$[Rn]7s^25f^9$
26	Fe	$[Ar]4s^23d^6$	62	Sm	$[Xe]6s^24f^6$	98	Cf	$[Rn]7s^25f^{10}$
27	Co	$[Ar]4s^23d^7$	63	Eu	$[Xe]6s^24f^7$	99	Es	$[Rn]7s^25f^{11}$
28	Ni	$[Ar]4s^23d^8$	64	Gd	$[Xe]6s^24f^55d^1$	100	Fm	$[Rn]7s^25f^{12}$
29	Cu	$[Ar]4s^23d^{10}$	65	Tb	$[Xe]6s^24f^9$	101	Md	$[Rn]7s^25f^{13}$
30	Zn	$[Ar]4s^23d^{10}$	66	Dy	$[Xe]6s^24f^{10}$	102	No	$[Rn]7s^25f^{14}$
31	Ga	$[Ar]4s^23d^{10}4p^1$	67	Ho	$[Xe]6s^24f^{11}$	103	Lr	$[Rn]7s^25f^{14}6d^1$
32	Ge	$[Ar]4s^23d^{10}4p^2$	68	Er	$[Xe]6s^24f^{12}$	104	Rf	$[Rn]7s^25f^{14}6d^2$
33	As	$[Ar]4s^23d^{10}4p^3$	69	Tm	$[Xe]6s^24f^{13}$	105	Db	$[Rn]7s^25f^{14}6d^3$
34	Se	$[Ar]4s^23d^{10}4p^4$	70	Yb	$[Xe]6s^24f^{14}$	106	Sg	$[Rn]7s^25f^{14}6d^4$
35	Br	$[Ar]4s^23d^{10}4p^5$	71	Lu	$[Xe]6s^24f^{14}5d^1$	107	Bh	$[Rn]7s^25f^{14}6d^5$
36	Kr	$[Ar]4s^23d^{10}4p^6$	72	Hf	$[Xe]6s^24f^{14}5d^2$	108	Hs	$[Rn]7s^25f^{14}6d^6$
						109	Mt	$[Rn]7s^25f^{14}6d^7$
						110	Ds	$[Rn]7s^15f^{14}6d^9$
						111	Rg	$[Rn]7s^15f^{14}6d^{10}$

## References (सन्दर्भ)/

## Acknowledgements (आभार)

- (1) Quantum Mechanics: A Comprehensive Text for Chemistry;  
— Kishor Arora; Himalaya Publishing House, Mumbai ; 2010
- (2) रसायन (अकार्बनिक एवं कार्बनिक रसायन) सेमेस्टर द्वितीय ; राम प्रसाद पब्लिकेशन ; आगरा २०१२
- (3) स्नातकोत्तर रसायन विज्ञान ;  
ओ.पी. श्रीवास्तव , किशोर अरोड़ा एवं नीलम चोप्रा  
म.प्र. हिंदी ग्रन्थ अकादमी ;२००४
- (4) [www.google.com/images](http://www.google.com/images)
- (5) [www.wikipedia.com](http://www.wikipedia.com)

- Best Of Luck