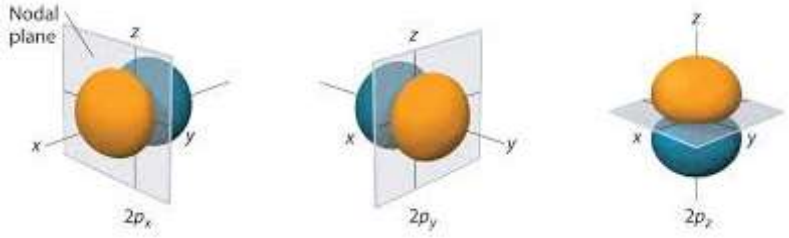
**Schrodinger Wave Mechanical model**

- बोर परमाणु सिद्धांत की असफलता के बाद इसकी परमाणु स्पेक्ट्रम को समझाने की क्षमता के कारण, एक ऐसे प्रतिरूप की आवश्कता अनुभव हुई जो स्थिर कोश सिद्धांत, डी–ब्रोग्ली सिद्धांत तथा हाइजेनबर्ग के अनिश्चितता के सिद्धांत को सम्मिलित कर सके । उपरोक्त तथ्यों को सम्मिलित करने वाले सिद्धान्त को क्वाण्टम यांत्रिकी कहते है।
- इरविन श्रोडिंगर ने एक मॉडल विकसित किया जो इलेक्ट्रॉन के कण व तरंग दोनो गुणों पर आधारित है, इसे परमाणु के तरंग यांत्रिक मॉडल के नाम से जाना जाता है।
- श्रोडिंगर ने हाइड्रोजन परमाणु के लिए एक समीकरण को प्रयुक्त किया व अद्भुत यर्थाथता के साथ इसके कई गुणधर्मों को बताया। अवकलन तरंग समीकरण निम्न है :

$$\frac{\delta^2\psi}{\delta x^2} + \frac{\delta^2\psi}{\delta y^2} + \frac{\delta^2\psi}{\delta z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E-V)\ \psi = 0$$

जहाँ m इलेक्ट्रॉन का द्रव्यमान है, $\psi$ तरंग फलन है, E इलेक्ट्रॉन की कुल ऊर्जा है, V विभव ऊर्जा है व h प्लांक नियतांक है।

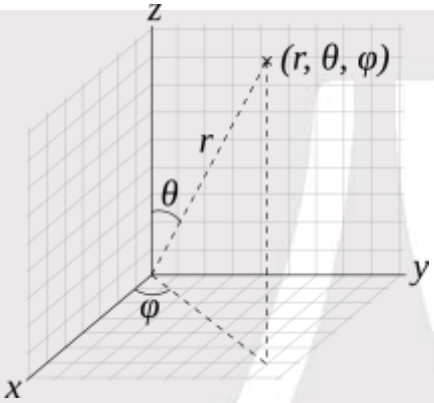
- यह समीकरण, तरंग फलन का व्यवहार प्रदर्शित करती है जो उपपरमाण्वीय तंत्र के तरंग जैसे गुणधर्मो को वर्णित करता है। इसे तंत्र के भिन्न ऊर्जा स्तरों को प्राप्त करने के लिए हल किया जाता है।
- परमाणु कक्षक एक इलेक्ट्रॉन तरंग फलन $\psi(r, \theta, \phi)$ है जो श्रोडिंजर समीकरण के हल से प्राप्त होता है। कक्षक तरंग फलन $\psi$ कोई भौतिक महत्त्व नहीं रखता परन्तु इसका वर्ग ($\psi^2$), भौतिक महत्त्व रखता है। यह एक परमाणु में एक बिन्दु पर इलेक्ट्रॉन प्रायिकता घनत्व को मापता है।
- जब हम श्रोडिंगर समीकरण को हल करते हैं, यह प्रेक्षित होता है कि त्रिविम के कुछ क्षेत्रों के लिए $\psi$ का मान धनात्मक है व अन्य के लिए यह ऋणात्मक है। लेकिन प्रायिकता धनात्मक होनी चाहिए, इसलिए $\psi$ के स्थान पर $\psi^2$ को प्रयुक्त करना उपर्युक्त है।
- हाईजनबर्ग के अनिश्चितता सिद्धांत के कारण, इलेक्ट्रॉन कक्षा संकल्पना का बहिष्कार हुआ। इसके स्थान पर एक नयी संकल्पना प्रस्तुत हुई जिसमें इलेक्ट्रॉन के पाये जाने की अधिकतम सम्भावित विचारधारा को प्रस्तुत किया गया। अतः अन्तरिक्ष में विभिन्न स्थानों पर एक इलेक्ट्रॉन के पाये जाने की इस सम्भावना को कक्षक कहा गया।
- एक निश्चित परमाण्विय तंत्र के लिए श्रोडिंगर समीकरण को हल किया जाता है। इसे कैसे किया जाता है, इसका विस्तृत वर्णन पाठ्यक्रम से बाहर है, लेकिन इसके हल के परिणाम हमारे लिए बहुत महत्वपूर्ण हैं।
- इस समीकरण के हल का महत्वपूर्ण बिन्दु यह है कि यह संख्याओं का एक समूह प्रदान करता है, जिन्हें क्वांटम संख्याएँ कहते हैं। परमाणुओं में इलेक्ट्रॉन के वितरण को वर्णित करने के लिए क्वांटम संख्याएँ आवश्यक हैं। श्रोडिंगर समीकरण को हल कर व्युत्पन्न क्वांटम संख्याएँ, मुख्य क्वांटम संख्या, द्विगंशी क्वांटम संख्या व चुम्बकीय क्वांटम संख्या कहलाती हैं। यह क्वांटम संख्याएँ परमाण्वीय कक्षकों का वर्णन करती हैं।
- कक्षक : अन्तरिक्ष में वह स्थान, जहाँ इलेक्ट्रॉन के पाये जाने की प्रायिकता अधिकतम होती है।
- नोड व नोड तल : नोड उस क्षेत्र को प्रदर्शित करता है, जहाँ एक इलेक्ट्रॉन के पाये जाने की सम्भावना शून्य होती है (अर्थात् $\psi$ व $\psi^2 = 0$) । इसी प्रकार नोडल तल उस तल को प्रदर्शित करता है, जहाँ इलेक्ट्रॉन के पाये जाने की प्रायिकता शून्य होती है।



- नोड दो प्रकार के होते है : (a) त्रिज्य नोड (b) कोणीय नोड
  एक त्रिज्य नोड, नाभिक के चारों ओर वह गोलीय क्षेत्र है, जहाँ $\psi$ व $\psi^2$ शून्य के बराबर होता है।
- एक कक्षक जो नोडों की उच्च संख्या रखता है, उसकी ऊर्जा अधिक होती है।
- नोडों की संख्या का परिकलन : त्रिज्य नोड = $n - \ell - 1$, कोणीय नोड = $\ell$, कुल नोड = $n - 1$
  जहाँ n व $\ell$ क्रमशः मुख्य व द्विगंशी क्वांटम संख्याएँ हैं।
  E.g. 3p-कक्षक में, त्रिज्य नोड = $3 - 1 - 1 = 1 (= n - \ell - 1)$
  कोणीय नोड = $1 (= \ell)$
  कुल नोड = 2 (एक त्रिज्य, एक कोणीय)

**Pictorial Representation of Atomic orbitals**

- परमाणु की गोलीय सममिती होने के कारण, तरंग फलनों को मुख्यतया एक गोलीय ध्रुवीय–निर्देशांक तंत्र के रूप में सरल रूप में प्रस्तुत किया गया, जैसाकि निम्न चित्र में दर्शाया गया है,




त्रिज्य दूरी = r,
कोटिशर = $\theta$.
दिगंश कोण = $\phi$,
$x = r \sin\theta \cos\phi$
$y = r \sin\theta \sin\phi$
$z = r \cos\theta$

- परिक्षण के दौरान यह पाया गया कि तरंग फलन, दो तरंग फलनों का गुणनफल हो सकती है, जिसमें एक फलन (कोणीय भाग X) केवल कोण $\theta$ तथा $\phi$ पर निर्भर होती है, तथा दूसरा फलन (अक्षीय भाग R) केवल नाभिक से दूरी पर निर्भर करती हैं।
- कक्षीय तरंग फलन $\psi$ दो फलनों का गुणनफल है जो कि त्रिज्य फलन $\psi_{(r)}$ तथा कोणीय फलन $\psi_{(\theta, \phi)}$ है,
  $\psi = \psi_{(r)} . \psi_{(\theta, \phi)}$ $[\psi_{(r)} = R ; \psi_{(\theta, \phi)} = X]$
  अतः $\psi_{(r, \theta, \phi)} = R_{(r)} . X_{(\theta, \phi)}$
  यहाँ $\psi_{(r)}$ नाभिक से दूरी (r) का फलन है तथा $\psi_{(\theta, \phi)}$ कोटिशर($\theta$) एवं दिगंश ($\phi$) कोणों का फलन है।
- $\psi_{(r)}$ अर्थात् तरंग फलन का त्रिज्य भाग क्वाण्टम संख्या n तथा l पर निर्भर करता है व यह कक्षक के आकार का निर्धारण करता है।
- तरंग फलन $\psi_{(\theta - \phi)}$, का कोणीय भाग क्वाण्टम संख्या l व m पर निभ्रर करता है व यह कक्षक की आकृति का निर्धारण करता है।
- हाइड्रोजन परमाणु के कोणीय एवम् के तरंग फलन है। निम्न है

| कोणीय भाग $\mathbf{X(\theta, \phi)}$ | अक्षीय/त्रिज्य भाग $\mathbf{R_{n,\ell}(r)}$ |
|---|---|
| $X(s) = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$ | $R(1s) = 2\left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\sigma/2}$ |
| $X(p_x) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin\theta \cos\phi$ | $R(2s) = \frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} (2 - \sigma) e^{-\sigma/2}$ |
| $X(p_y) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin\theta \sin\phi$ | $R(2p) = \frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} \sigma e^{-\sigma/2}$ |
| $X(p_z) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos\theta$ | |

$$X(d_{z^2}) = \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3\cos^2\theta - 1)$$

$$X(d_{xz}) = \left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \sin\theta\cos\theta\cos\phi \qquad R(3s) = \frac{1}{9\sqrt{3}}\left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} (6 - 6\sigma + \sigma^2)\, e^{-\sigma/2}$$

$$X(d_{yz}) = \left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \sin\theta\cos\theta\sin\phi \qquad R(3p) = \frac{1}{9\sqrt{6}}\left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} (4 - \sigma)\,\sigma e^{-\sigma/2}$$

$$X(d_{x^2-y^2}) = \left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \sin^2\theta\cos 2\phi \qquad R(3d) = \frac{1}{9\sqrt{30}}\left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} \sigma^2 e^{-\sigma/2}$$

$$X(d_{xy}) = \left(\frac{15}{4\pi}\right)^{1/2} \sin^2\theta\sin 2\phi$$

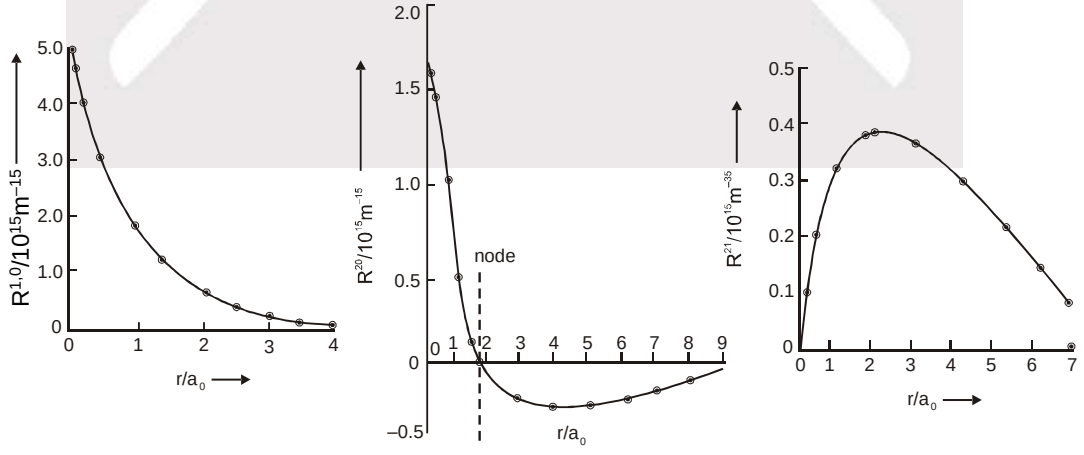
$$\sigma = \frac{2Zr}{na_0} \quad ; \quad a_0 = \frac{h^2}{4\pi^2 me^2}$$

- तरंग फलन के कोणीय एवम् अक्षीय भाग एक–दूसरे पर निर्भर नहीं होते है।
  s-कक्षक के लिए तरंग फलन के कोणीय भाग का मान हमेशा एक–समान $(1/4\pi)^{1/2}$, रहता है तथा मुख्य क्वान्टम संख्या से स्वतंत्र होता है।
  p-कक्षकों एवम् d-कक्षकों की कोणीय निर्भरता मुख्य क्वाण्टम संख्या पर निर्भर नहीं करती है। अतः दिये गये सभी प्रकार के कक्षक समान कोणीय व्यवहार रखते है।
- अतः, सारणी से स्पष्ट है कि तरंग फलन का अक्षीय भाग मुख्य क्वाण्टम संख्या (n) तथा कोणीय संवेग क्वाण्टम संख्या ($\ell$) दोनों पर निर्भर होता है।
- किसी निश्चित अवस्था की तरंग फलन ज्ञात करने के लिए, तरंग फलन के उपर्युक्त कोणीय एवम् अक्षीय दोनों भागों को गुणन करके एक तरंग फलन प्राप्त किया जाता है, जिसे नियमबद्ध तरंग फलन कहते है।

सुविधा हेतु $\psi_{(r)}$ vs r एवं $\psi_{(\theta,\phi)}$ vs कोण के ग्राफ पृथक बनाए जाते हैं।

- त्रिज्य तरंग फलन **R** के आरेख **:** 1s, 2s & 2p परमाणु कक्षकों के लिए त्रिज्य तरंग फलन R, त्रिज्य प्रायिकता घनत्व $R^2$ तथा त्रिज्य प्रायिकता फलन $4\pi r^2R^2$ के आरेखों को नाभिक से r दूरी के फलन के रूप में चित्र में प्रदर्शित किया है :

**(A)**

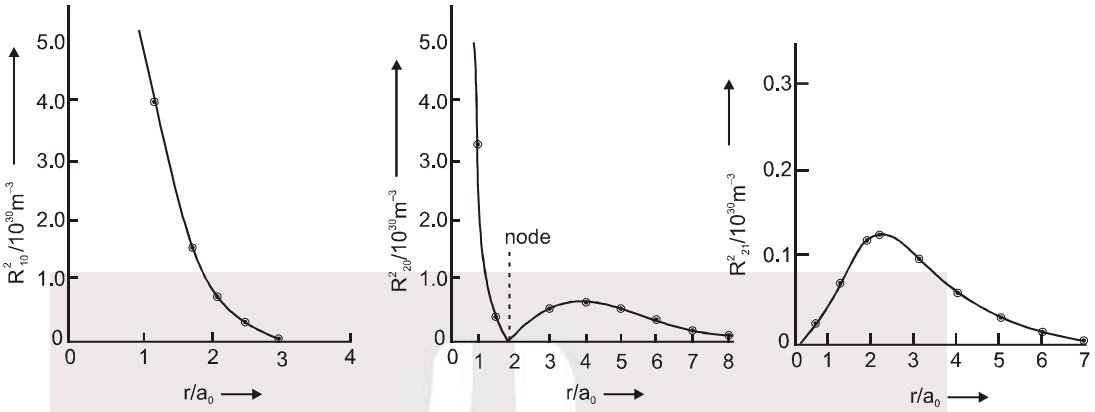



For 1s For 2s For 2p

**(i)** त्रिज्य तरंग फलन **(R)[**चित्र **(A)] :** सभी स्थितियों में जैसे ही r अनन्त पर पहुचंता है R शून्य हो जाता है। हम पाते हैं कि 2s त्रिज्य फलन में एक नोड होता है। इस नोड पर त्रिज्य फलन का मान धनात्मक से ऋणात्मक में परिवर्तित हो जाता है। सामान्य रूप से यह पाया गया है कि ns-कक्षक (n–1) त्रिज्य नोड रखते हैं तथा np-कक्षक (n–2) त्रिज्य नोड आदि रखते हैं।

**(ii)** त्रिज्य प्रायिकता घनत्व **($R^2$) [चित्र (B)] :** त्रिज्य घनत्व $R^2$ एक निश्चित त्रिज्य रेखा के सापेक्ष एक बिन्दु पर इलेक्ट्रॉन के पाये जाने के प्रायिकता घनत्व को बताता है। चित्र (B) में आरेख एक बिन्दु पर प्रायिक्ता घनत्व या आपेक्षिक इलेक्ट्रॉन घनत्व की उपयोगी जानकारी त्रिज्या के फलन के रूप में देता है। यह ध्यान देना चाहिए कि केवल s-कक्षकों के लिए नाभिक पर इलेक्ट्रॉन घनत्व अधिकतम होता है। जबकि सभी अन्य कक्षकों के लिए नाभिक पर इलेक्ट्रॉन घनत्व शून्य होता है। इसका शून्य मान ($R^2 = 0$) एक इलेक्ट्रॉन के पाये जाने की शून्य प्रायिकता को निर्देशित करता है।

**(B)**

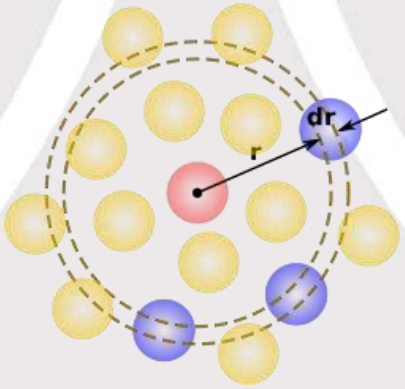



**For 1s** **For 2s** **For 2p**

**(iii)** त्रिज्य प्रायिकता फलन **$4\pi r^2R^2$ [चित्र(C)] :** चूंकि परमाणु गोलीय सममिति रखता है, अतः गोले की त्रिज्या (r + dr) तथा r के मध्य गोले के कोश में इलेक्ट्रॉन के पाये जाने की प्रायिकता पर विचार करना अधिक उपयोगी है।

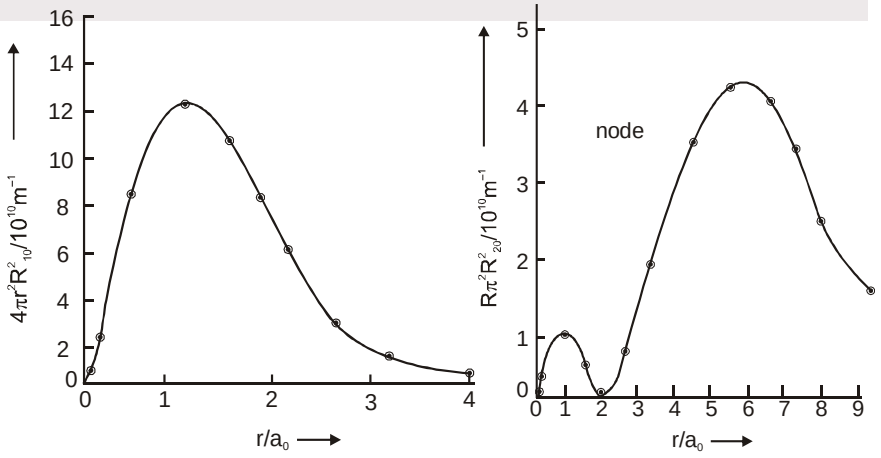
कोश का आयतन $4/3\pi(r + dr)^3 - 4/3\pi r^3 = 4\pi r^2dr$ के बराबर होता है।

- $\psi^2$ dV (or $\psi^2.4\pi r^2dr$) नाभिक को घेरे हुए सूक्ष्म आयतन dV में प्रायिकता को दर्शाता है।

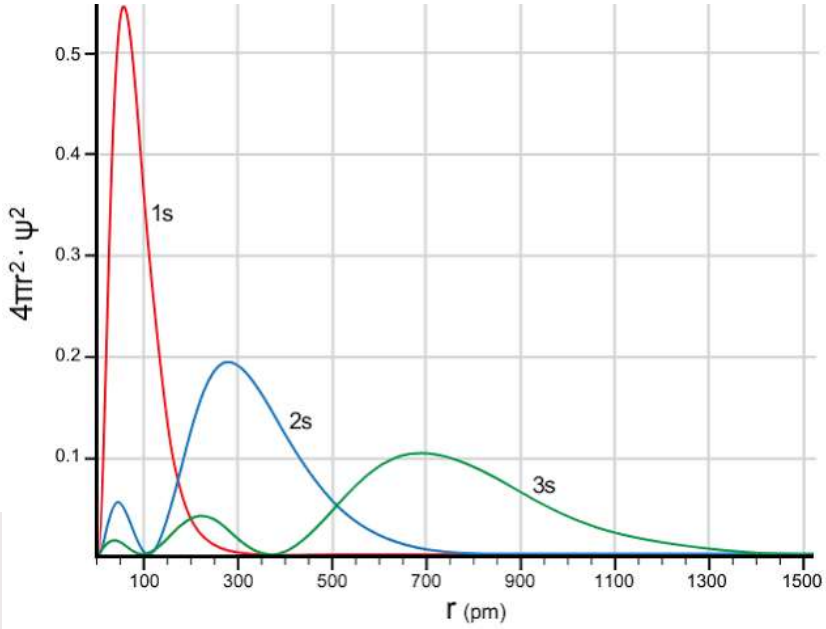



वह प्रायिकता जो दिशा पर निर्भर नहीं करती, त्रिज्य प्रायिकता कहलाती है तथा यह [$4\pi r^2drR^2$] के बराबर होती है। यह दिशा से स्वतंत्र नाभिक से r दूरी पर इलेक्ट्रॉन के पाये जाने की प्रायिकता को बताती है।

**(C)**




**For 1s** **For 2s**




## PRACTICES PROBLEMS

**1.** श्रोडिंगर तरंग समीकरण से निम्न क्वांटम संख्या प्राप्त नहीं होती है :

(A) n (B) $\ell$ (C) m (D) s

**2.** श्रोडिंगर समीकरण का हल, तीन क्वांटम संख्या (n, $\ell$, m) को $\psi_{n\ell m}$ के रूप में देता है। पूर्ण तरंग फलन $\psi_{400}$ द्वारा कौनसा कक्षक प्रदर्शित होता है :

(A) 4d (B) 3d (C) 4p (D) 4s

**3.** $\psi_{321}$ में, कक्षक कोणीय संवेग, गोलीय नोडों की संख्या व कोणीय नोडों की संख्या का योग निम्न है :

(A) $\frac{\sqrt{6}h+4\pi}{2\pi}$ (B) $\frac{\sqrt{6}h+2\pi}{2\pi}$ (C) $\frac{\sqrt{8}h+4\pi}{2\pi}$ (D) $\frac{\sqrt{8}h+6\pi}{2\pi}$

**4.** हाइड्रोजन परमाणु के 3s-कक्षक के लिए सामान्य तरंग फलन निम्न है :

$$\psi_{3s} = \frac{1}{18\sqrt{3\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}\left[6-\frac{4r}{a_0}+\frac{4r^2}{9a_0^2}\right]e^{-r/3a_0}$$

उक्त दिया गया कक्षक (3s), $1.9a_0$ तथा $xa_0$ पर दो नोड रखता है। तब x का मान ज्ञात कीजिए :

(A) 6.4 (B) 7.1 (C) 2.5 (D) 5.6

**5.*** सही कथन/कथनों का चयन कीजिए :

(A) तरंग फलन का एक भाग त्रिज्य फलन [R(r)], केवल क्वांटम संख्या n पर निर्भर करता है।

(B) कोणीय फलन केवल दिशा पर निर्भर करता है तथा नाभिक से दूरी पर निर्भर नहीं करता है।

(C) $\Psi^2$ (r, $\theta$, $\phi$), अन्तरिक्ष में किसी निश्चित बिन्दु पर इलेक्ट्रॉन के पाये जाने का प्रायिकता घनत्व है।

(D) त्रिज्य वितरण फलन ($4\pi r^2R^2$), नाभिक से r दूरी पर इलेक्ट्रॉन के पाये जाने की प्रायिकता को बताता है।

**6.** ज्ञात कीजिए :

(A) 5s परमाण्विय कक्षक के त्रिज्य नोडों की संख्या

(B) $3d_{yz}$ परमाण्विय कक्षक के कोणीय नोडों की संख्या

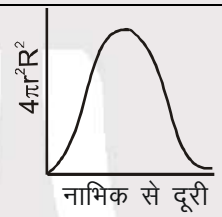
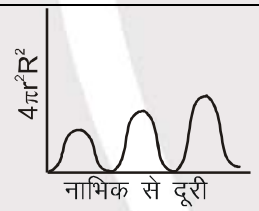
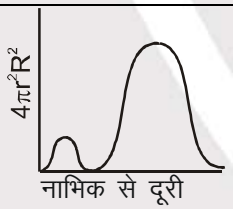
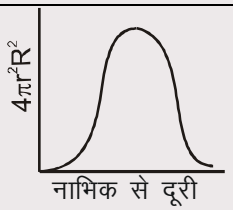
(C) $4d_{xy}$ परमाण्विय कक्षकों के लिए कोणीय नोडों व त्रिज्य नोडों का योग

(D) 3p परमाण्विय कक्षक के कोणीय नोडों की संख्या

**7.** कॉलम-**I** तथा कॉलम-**II** प्रत्येक में चार विकल्प हैं। कॉलम-**I** के विकल्प को कॉलम-**II** के विकल्प के साथ सुमेलित किया जाना है। कॉलम-**I** के एक या एक से अधिक विकल्प, कॉलम-**II** के समान विकल्प के साथ सुमेलित हो सकते हैं :

| | कॉलम-**I** | | कॉलम-**II** |
|---|---|---|---|
| (A) | कक्षक जो दो कोणीय नोड रखता है | (p) | $3d_{x^2-y^2}$ |
| (B) | कक्षक जो एक कोणीय नोड रखता है | (q) | $3p_x$ |
| (C) | कक्षक जो एक भी कोणीय नोड नहीं रखता है | (r) | 4f |
| (D) | कक्षक जो तीन कोणीय नोड रखता है | (s) | 3s |

**8.** कॉलम-**I** तथा कॉलम-**II** प्रत्येक में 4 पद उपस्थित हैं। कॉलम-**I** के पदों को कॉलम-**II** के पदों (आरेखों) से सुमेलित करना है। कॉलम-**I** के एक से अधिक पद कॉलम-**II** के समान पदों (आरेखों)से सुमेलित हो सकते हैं।

| | कॉलम-**I** | | कॉलम-**II** |
|---|---|---|---|
| (A) | 3s | (p) |   |
| (B) | 3p | (q) |   |
| (C) | 3d | (r) |   |
| (D) | 2p | (s) |   |

# ANSWER KEY

**1.** (D) **2.** (D) **3.** (A) **4.** (B)

**5.** (B,C,D) **6.** A - 4 ; B - 2 ; C - 3 ; D – 1

**7.** (A) - (p) ; (B) - (q) ; (C) - (s) ; (D) - (r) **8.** (A) - (q) ; (B) - (r) ; (C) - (s) ; (D) - (p)