हाइड्रोजन बंध में एक त्रिज्या पर्याप्त क्यों नहीं: इलेक्ट्रॉन घनत्व से नई व्याख्या

विज्ञान एवं प्रौद्योगिकी | शोध की तारीख: 9 जनवरी 2026 | मुख्य परीक्षा: सामान्य अध्ययन-तीन

खबरों में क्यों

अभिषेक शाही और एलंगन्नन अरुणन ने हाइड्रोजन बंध वाले आणविक समूहों में हाइड्रोजन की प्रभावी त्रिज्या को दिशा और रासायनिक परिवेश के साथ समझने का प्रस्ताव दिया है। जर्नल ऑफ कम्प्यूटेशनल केमिस्ट्री में अध्ययन 9 जनवरी 2026 को पहली बार ऑनलाइन प्रकाशित हुआ। पत्रिका और क्रॉसरेफ इस तारीख की पुष्टि करते हैं। जनवरी की बाद की अंक-तारीख या मार्च में आए संस्थागत विवरण को मूल ऑनलाइन तारीख नहीं समझना चाहिए।

शोधकर्ताओं ने इलेक्ट्रॉन घनत्व के विश्लेषण से बताया कि अध्ययन किए गए अणुओं और उनके समूहों में हाइड्रोजन को एक समान गोलाकार इकाई मानना पर्याप्त नहीं है। लंबी और छोटी प्रभावी त्रिज्याओं से उसका दिशात्मक व्यवहार अधिक उपयोगी ढंग से व्यक्त किया जा सकता है। यह नया तत्व या बदला हुआ परमाणु नाभिक खोजने का दावा नहीं, रासायनिक संरचना पहचानने के मॉडल को बेहतर बनाने का प्रयास है।

हाइड्रोजन बंध क्या है?

हाइड्रोजन बंध एक आकर्षक संपर्क है जिसमें किसी अणु या आणविक खंड से जुड़ा हाइड्रोजन दूसरे इलेक्ट्रॉन-समृद्ध क्षेत्र से संपर्क करता है। अंतरराष्ट्रीय शुद्ध एवं अनुप्रयुक्त रसायन संघ की 2011 की अनुशंसा इस पहचान के लिए बंध बनने के प्रमाण पर जोर देती है। प्रमाण सैद्धांतिक, प्रायोगिक या दोनों के संयुक्त रूप में मिल सकते हैं। केवल परमाणुओं का पास दिखाई देना अंतिम निर्णय नहीं है।

सरल चित्र में दाता समूह का हाइड्रोजन एक परमाणु से पहले से जुड़ा होता है और स्वीकारक उसके साथ अतिरिक्त संपर्क बनाता है। ऐसे संपर्क एक अणु के भीतर या अलग अणुओं के बीच हो सकते हैं। प्रोटीन की संरचना और आणविक संगठन जैसे क्षेत्रों में इनका महत्व है। इसलिए इनकी पहचान के नियम पदार्थों की संरचना समझने में उपयोगी हैं, केवल रसायन की परिभाषा याद करने तक सीमित नहीं।

पुराने दूरी-आधारित संकेत की सीमा

PCSMANTRA.COM

ऐतिहासिक रूप से जब हाइड्रोजन की स्थिति ठीक से पहचानना कठिन था, तब दाता और स्वीकारक के अपेक्षाकृत भारी परमाणुओं की दूरी को उनकी वान डर वाल्स त्रिज्याओं के योग से मिलाया जाता था। कम दूरी को हाइड्रोजन बंध का संकेत माना गया। यह सुविधाजनक तरीका परमाणुओं को मानो निश्चित आकार के गोले मानकर चल सकता है। नए अध्ययन का प्रश्न इसी सरलता की सीमा से जुड़ा है।

यह कहना गलत होगा कि 2026 से पहले वैज्ञानिक हर छोटी दूरी को अचूक प्रमाण मानते थे। 2011 की अंतरराष्ट्रीय अनुशंसा ने ही भारी परमाणुओं की दूरी वाले इस ऐतिहासिक मानदंड को सामान्य पहचान नियम के रूप में अनुशंसित नहीं किया था। नया अध्ययन उसी व्यापक वैज्ञानिक विकास में अधिक दिशात्मक त्रिज्या का योगदान देता है; वह हाइड्रोजन बंध की पूरी अवधारणा को पहली बार जन्म नहीं देता।

इलेक्ट्रॉन घनत्व से क्या देखा गया?

शोध में क्वांटम रासायनिक गणनाओं और परमाणुओं को अणुओं में समझने वाले विश्लेषण का उपयोग किया गया। इसमें इलेक्ट्रॉन घनत्व का स्थानिक वितरण देखकर परमाणु के प्रभावी आकार और सीमाओं की व्याख्या होती है। गणितीय रूप से निकाली गई ऐसी सीमा को ठोस गेंद की सतह या सामान्य कैमरे में दिखने वाला किनारा नहीं समझना चाहिए। त्रिज्या किस परिभाषा और परिवेश से निकली है, यह महत्वपूर्ण है।

लेखकों के अनुसार अध्ययन किए गए दाता अणुओं और हाइड्रोजन-बंधित समूहों में हाइड्रोजन का प्रभावी आकार दीर्घवृत्तीय पाया गया। छोटी धुरी उस सहसंयोजक बंध की दिशा में थी जिससे हाइड्रोजन दाता परमाणु से जुड़ा था। इससे संकेत मिलता है कि अलग दिशाओं में एक ही दूरी को समान अर्थ देना हमेशा उचित नहीं। परिणाम अणु में स्थित हाइड्रोजन से संबंधित है, हर स्वतंत्र हाइड्रोजन परमाणु के सार्वभौमिक आकार की घोषणा नहीं।

लंबी और छोटी त्रिज्या का अर्थ

यदि किसी रूप का फैलाव हर दिशा में समान नहीं है तो उसके लिए एक संख्या पूरी जानकारी नहीं देती। दीर्घवृत्त की छोटी और लंबी धुरियों की तरह अलग दिशाओं के लिए अलग प्रभावी त्रिज्या उपयोगी हो सकती है। अध्ययन का प्रस्ताव है कि हाइड्रोजन बंध की पहचान में दिशा और परिवेश पर निर्भर लंबी तथा छोटी त्रिज्याओं को महत्व दिया जाए।

यहां त्रिज्या कोई ऐसा सार्वभौमिक स्थिरांक नहीं है जिसे एक बार लिखकर हर यौगिक में बिना परिवर्तन लगाया जा सके। संबंधित दाता और स्वीकारक का स्वभाव भी पढ़ना होगा। स्वतंत्र परमाणु, अणु में बंधा परमाणु और क्रिस्टल में निकट संपर्क से निकली त्रिज्याएं अलग परिभाषाओं से आती हैं। स्वतंत्र शोध साहित्य भी परमाणु त्रिज्या की अनेक परिभाषाएं बताता है; अलग संदर्भों की संख्याओं को मिलाना भ्रम पैदा कर सकता है।

कोण और रासायनिक परिवेश की भूमिका

अध्ययन ने विशेष रूप से बताया कि सीधी रेखा से हटे हाइड्रोजन बंधों में प्रभावी त्रिज्या संपर्क के कोण पर निर्भर करती है। इसका कारण दिशात्मक असमानता है। यदि स्वीकारक अलग दिशा से पास आए तो एक ही गोलाकार सीमा की कल्पना संपर्क की व्याख्या में जानकारी खो सकती है। दूरी के साथ कोण को पढ़ना इसलिए महत्वपूर्ण है।

संस्थागत व्याख्या के अनुसार यह असमानता दाता परमाणु की विद्युतऋणात्मकता, उसके संकरण और स्वीकारक से बने संपर्क की मजबूती से संबंध रखती है। प्रस्तुत समूहों में कमजोर स्वीकारकों के साथ दीर्घवृत्तीयता कम थी। इसे सभी संभव यौगिकों के लिए एक सरल गणितीय नियम नहीं बनाना चाहिए। सामान्य अंतरराष्ट्रीय अनुशंसा भी बताती है कि रासायनिक परिवेश और अनेक संपर्क होने पर कुछ सहसंबंध बदल सकते हैं।

PCSMANTRA.COM

गणना की तुलना संरचनात्मक आंकड़ों से

लेखकों ने अपनी व्याख्या की उपयोगिता के लिए कैम्ब्रिज क्रिस्टलोग्राफिक डेटा सेंटर के संरचनात्मक आंकड़ों का भी इस्तेमाल किया। विशेष रूप से ऑक्सीजन-हाइड्रोजन से नाइट्रोजन और नाइट्रोजन-हाइड्रोजन से नाइट्रोजन वाले संपर्कों के उदाहरणों से तुलना की गई। इससे प्रस्ताव केवल एक अलग गणना का निष्कर्ष न रहकर उपलब्ध संरचनात्मक मामलों से भी जुड़ता है।

फिर भी डेटाबेस से तुलना और पूरी नई प्रायोगिक माप-श्रृंखला एक बात नहीं हैं। सीमित प्रकार के संपर्कों में उपयोगिता मिलना हर जैविक अणु, द्रव या क्रिस्टल में समान सफलता सिद्ध नहीं करता। इस अध्ययन को गणना और उपलब्ध संरचनात्मक प्रमाण को जोड़ने वाले काम के रूप में पढ़ना उचित है। सार्वजनिक सार से पूरे डेटाबेस पर लागू सार्वभौमिक शुद्धता का प्रतिशत निकालना संभव नहीं।

दूरी के साथ अन्य प्रमाण क्यों चाहिए?

हाइड्रोजन बंध की पहचान के लिए अंतरराष्ट्रीय अनुशंसा कई प्रकार के प्रमाण बताती है। इनमें बंध की दिशा, कंपन आवृत्ति में परिवर्तन, नाभिकीय चुंबकीय अनुनाद के संकेत और इलेक्ट्रॉन घनत्व की संरचना शामिल हो सकती है। जितने अधिक उपयुक्त संकेत साथ मिलें, पहचान का आधार उतना मजबूत होता है। कोई एक संकेत हर परिस्थिति में समान रूप से निर्णायक नहीं होता।

इसलिए लंबी और छोटी त्रिज्या उपयोगी सुधार होने पर भी पूरी पहचान का स्वचालित विकल्प नहीं हैं। एक गणना में संपर्क की उपस्थिति दिखना और वास्तविक परिस्थितियों में उसकी भूमिका स्थापित करना अलग स्तर के प्रश्न हैं। कई संपर्कों वाले जाल में जोड़ी-आधारित सरल संबंध भी बदल सकते हैं। वैज्ञानिक उत्तर में दिशात्मक त्रिज्या को उपलब्ध प्रमाणों के साथ रखने की बात होनी चाहिए, अन्य प्रमाण हटाने की नहीं।

मूलभूत रसायन और भारत के लिए महत्व

यह काम गीटम और भारतीय विज्ञान संस्थान से जुड़े वैज्ञानिकों का मूलभूत रसायन अनुसंधान है। इसकी उपयोगिता पदार्थ की संरचना को अधिक सावधानी से पढ़ने के ढांचे में है। यदि मॉडल रासायनिक परिवेश और दिशा को बेहतर व्यक्त करे तो आणविक संपर्कों की व्याख्या अधिक स्पष्ट हो सकती है। संस्थान ने दूसरे गैर-सहसंयोजक संपर्कों की त्रिज्याओं तक इस दृष्टिकोण के भविष्य में विस्तार की संभावना बताई है।

इस संभावना को पहले से सिद्ध व्यापक अनुप्रयोग नहीं कहना चाहिए। अध्ययन किसी नई दवा की प्रभावशीलता, प्रोटीन रोग का उपचार या औद्योगिक पदार्थ का तैयार प्रदर्शन नहीं दिखाता। मुख्य परीक्षा के लिए सीख यह है कि परिचित वैज्ञानिक संकल्पनाएं भी बेहतर परिभाषा और मापन से विकसित होती हैं। सुविधाजनक मॉडल उपयोगी रहता है, लेकिन उसकी मान्यताओं और लागू होने की सीमा को स्पष्ट रखना जरूरी है।

आगे क्या देखना होगा?

आगे व्यापक प्रकार के दाता-स्वीकारक समूहों, अलग कोणों और जटिल आणविक परिवेशों में इस प्रस्ताव की उपयोगिता जांचना महत्वपूर्ण होगा। विभिन्न गणना विधियों और संरचनात्मक प्रमाणों की तुलना बताएगी कि लंबी-छोटी त्रिज्याओं का उपयोग कहां सबसे सहायक है। दूसरे गैर-सहसंयोजक संपर्कों में विस्तार के लिए भी अलग सत्यापन चाहिए, केवल समान शब्दावली पर्याप्त नहीं होगी।

संतुलित निष्कर्ष है कि हाइड्रोजन बंध में दूरी का अर्थ दिशा और रासायनिक परिवेश से अलग नहीं है। नई त्रिज्याएं अधिक संदर्भ-संवेदी व्याख्या देती हैं, सभी अणुओं के लिए एक अंतिम पहचान सूत्र नहीं।

PCSMANTRA.COM

अभ्यास प्रश्न: हाइड्रोजन बंध की पहचान में केवल परमाणु दूरी पर्याप्त क्यों नहीं है? दिशात्मक त्रिज्या संबंधी नए अध्ययन के आधार पर वैज्ञानिक मॉडल की उपयोगिता, प्रमाण और सीमाओं की चर्चा कीजिए। (250 शब्द)

स्रोत: प्राथमिक शोध। भारतीय विज्ञान संस्थान का विवरण। आईयूपीएसी की 2011 अनुशंसा।