

พันธะเคมี (Chemical Bonding)

คม 105 หลักเคมี 1(1/2561)

1. ประเภทของพันธะเคมี (Ionic bond, Metallic bond, Covalent bond)
2. แรงยึดเหนี่ยวภายในโมเลกุล
3. ค่าต่างๆที่เกี่ยวข้องกับการสร้างพันธะและโครงสร้างโมเลกุล (ความยาวพันธะ พลังงานพันธะ สภาพขั้วของโมเลกุล มุมพันธะ)
4. เรโซแนนซ์
5. ทฤษฎีอธิบายพันธะโควาเลนต์ (Lewis structure, Valence Shell Electron Pair Repulsion, Valence Bond Theory, Molecular Orbital Theory)

รัชดาภรณ์ ปันทะรส

Department of Chemistry, Faculty of Science, Maejo University

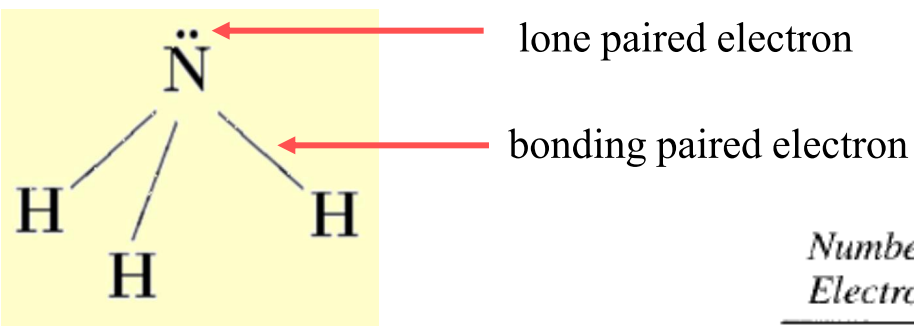
email: ratchadaporn_p@mju.ac.th

<http://www.Chemistry.mju.ac.th>

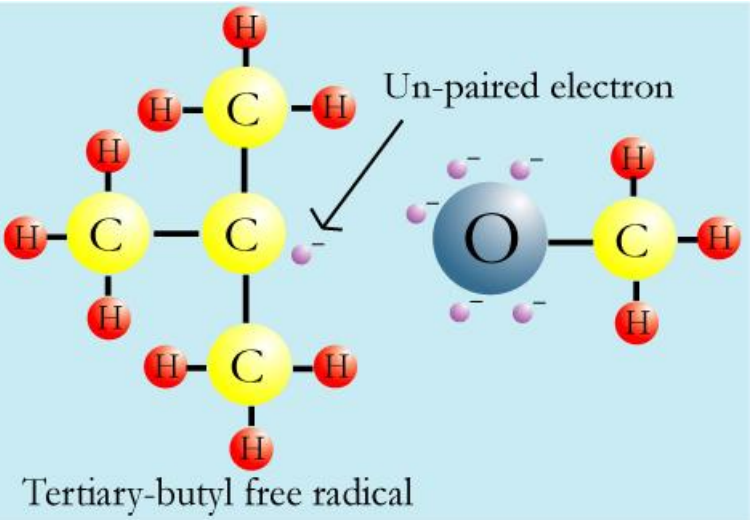
อิเล็กตรอนโดดเดี่ยว (unpaired electron) คือ อิเล็กตรอนที่ไม่ได้เกี่ยวข้องกับพันธะ

อิเล็กตรอนคู่โดดเดี่ยว (lone paired electron) คือ คู่ของเวเลนซ์อิเล็กตรอนที่ไม่ได้เกี่ยวข้องกับการเกิดพันธะ

อิเล็กตรอนคู่ร่วมพันธะ (bonding paired electron) คือ อิเล็กตรอนที่ใช้ในการเกิดพันธะ



<i>Number of Electrons</i>	<i>Arrangement</i>	<i>Unpaired e⁻</i>
1	↑ — —	1
2	↑ ↑ —	2
3	↑ ↑ ↑	3
4	↑↓ ↑ ↑	2
5	↑↓ ↑↓ ↑	1
6	↑↓ ↑↓ ↑↓	0



Tertiary-butyl free radical

สูตรและชื่อสารโควาเลนต์

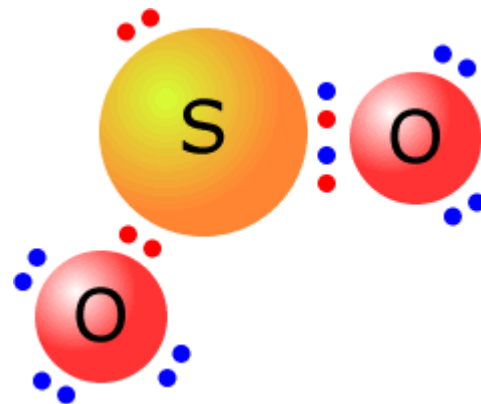
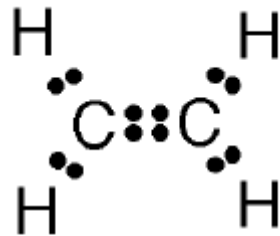
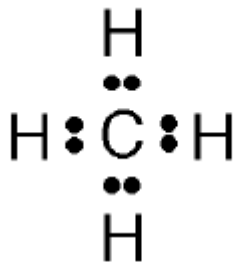
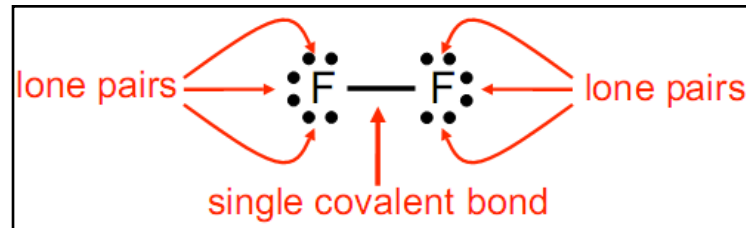
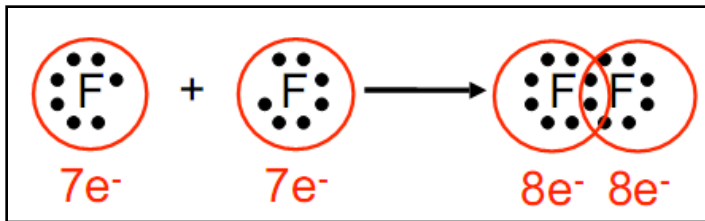
การเขียนสูตรโครงสร้าง

- แบบจุด (dot structure) • แทน 1 อิเล็กตรอน

- แบบเส้น — แทน 2 อิเล็กตรอน (1 พันธะ)

= แทน 4 อิเล็กตรอน (2 พันธะ)

≡ แทน 6 อิเล็กตรอน (3 พันธะ)



การเรียกชื่อสารประกอบโควาเลนต์

(1) อ่านชื่อธาตุที่อยู่ข้างหน้าก่อน ตามด้วยชื่อธาตุที่อยู่หลังและเปลี่ยนพยางค์ท้ายเป็น ได์ (ide)

เช่น Cl chloro เปลี่ยนเป็น chloride

Br bromo เปลี่ยนเป็น bromide

N nitro เปลี่ยนเป็น nitride

S sulfur เปลี่ยนเป็น sulfide

(2) ถ้าอะตอมของธาตุแรกมีเพียงอะตอมเดียว ไม่ต้องระบุจำนวน แต่ธาตุข้างหลังให้ระบุจำนวนอะตอม ถึงแม้มีเพียงหนึ่งอะตอมก็ตาม ด้วยเลขจำนวนในภาษากรีก

หนึ่ง	mono	หก	hexa
สอง	di	เจ็ด	hepta
สาม	tri	แปด	octa
สี่	tetra	เก้า	nona
ห้า	penta	สิบ	deca

CO carbon monoxide

CO₂ carbon dioxide

N₂O dinitrogen oxide (laughing gas)

NO₂ nitrogen dioxide

N₂O₃ dinitrogen trioxide

H₂S hydrogen sulfide

CS₂ carbon disulfide

B₂H₆ diboron hexahydride

ประเภทของพันธะเคมี (แบ่งตามการใช้วาเลนซ์อิเล็กตรอนระหว่างอะตอมที่เกิดพันธะกัน)

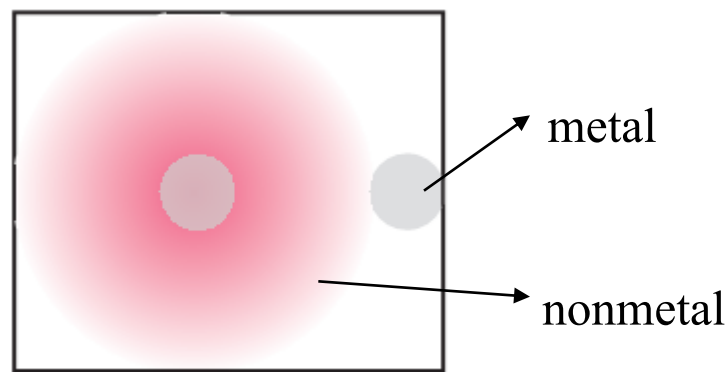
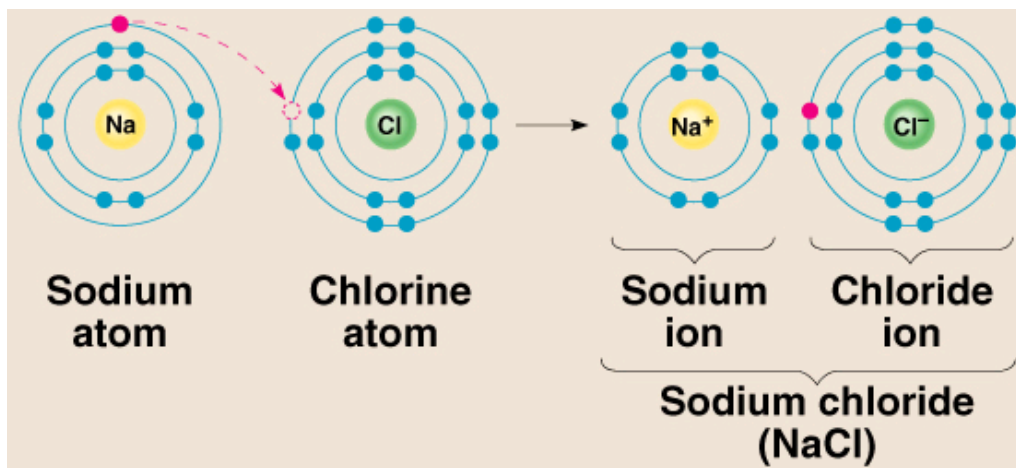
1. พันธะไอออนิก (Ionic bond) บางครั้งเรียก electrovalence bond

หมายถึง พันธะระหว่างไอออนบวกและไอออนลบ ได้สารประกอบไอออนิก

เป็นพันธะในสารประกอบที่ธาตุมีค่า electronegativity ต่างกันมาก มักมีเวเลนซ์อิเล็กตรอนครบแปดเสมอ เป็นไปตาม Octet rule

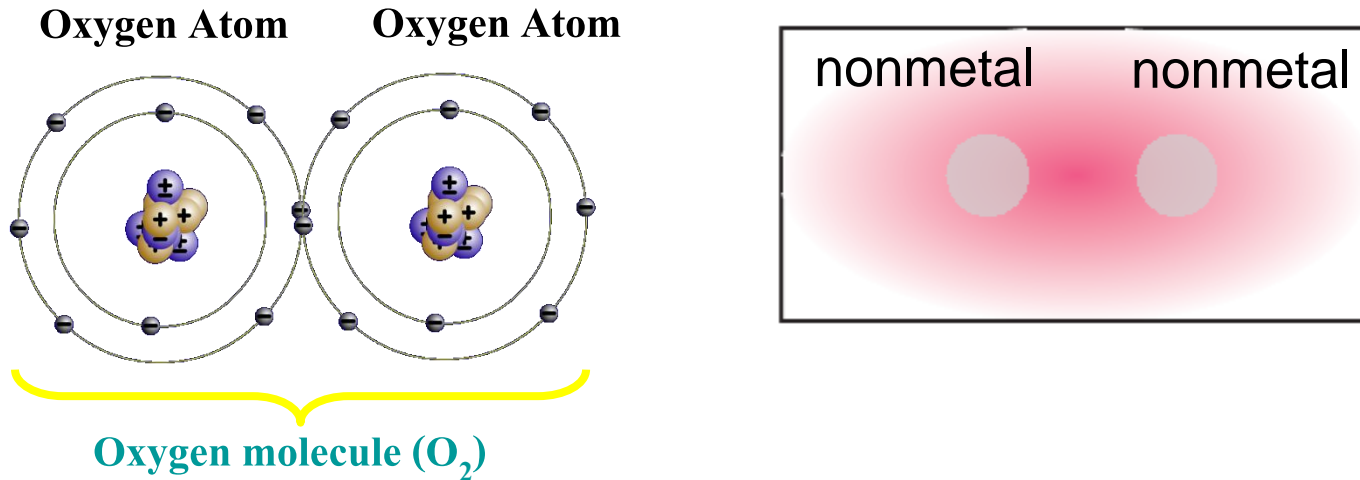
Octet rule “อะตอมมีแนวโน้มที่จะให้หรือรับอิเล็กตรอน จนกระทั่งอิเล็กตรอนวงนอกสุดมีค่าเท่ากับแปด”

โลหะหมู่ IA, IIA และ IIIA เมื่อเกิดไอออนบวก มีประจุเป็น +1, +2 และ +3 ตามลำดับ เกิดเป็นไอออนที่เป็นไปตามกฎชุดแปด

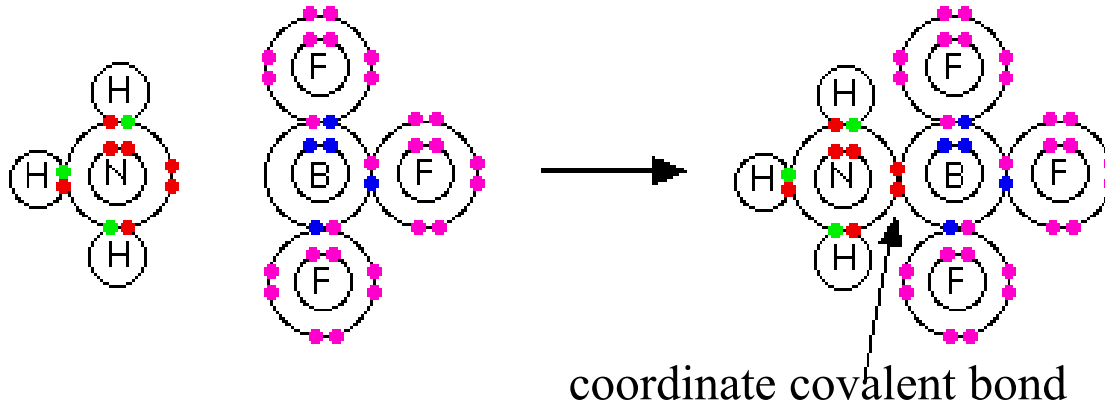


2. พันธะโควาเลนต์ (Covalent bond) เป็นพันธะระหว่างอะตอมที่มีการใช้อิเล็กตรอนร่วมกัน ซึ่งอะตอมทั้งสองมีค่า EN เท่ากันหรือต่างกันไม่มาก เกิดเป็นสารประกอบโควาเลนต์

2.1 พันธะโควาเลนต์แบบธรรมดา คู่อิเล็กตรอนที่ใช้อิเล็กตรอนร่วมกันมาจากแต่ละอะตอม



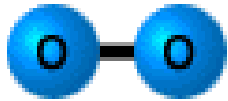
2.2 พันธะโควาเลนต์แบบโคออร์ดิเนต (coordinate covalent bond) คู่อิเล็กตรอนที่ใช้ร่วมกันมาจากอะตอมใดอะตอมหนึ่งเพียงอะตอมเดียว บางครั้งเรียกว่า พันธะเดทีฟ (dative bond)



โมเลกุลโควาเลนต์แบ่งออกเป็น 3 ชนิด

1. โมเลกุลที่พันธะไม่มีขั้วและเป็นโมเลกุลไม่มีขั้ว เช่น H_2 Cl_2 N_2 O_2

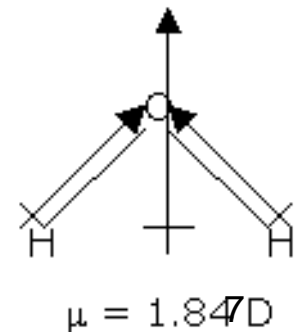
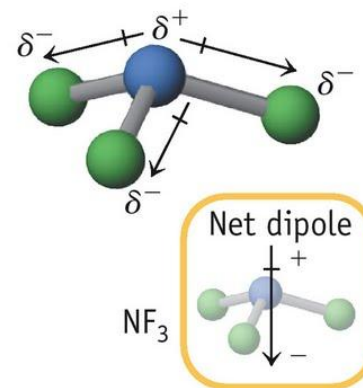
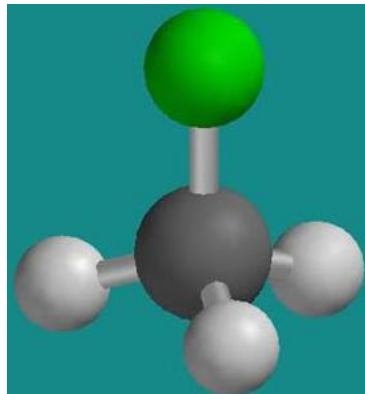
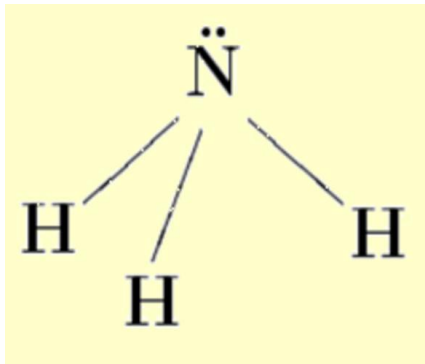
เป็นพันธะโควาเลนต์ที่เกิดจากอะตอมชนิดเดียวกัน จัดเป็นพันธะโควาเลนต์ 100%



2. โมเลกุลที่พันธะมีขั้วและเป็นโมเลกุลมีขั้ว เช่น NH_3 , CH_3Cl , SO_2 , H_2O

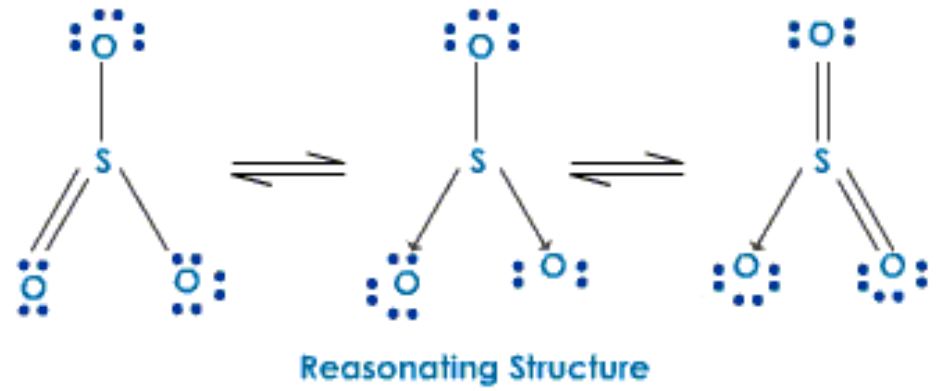
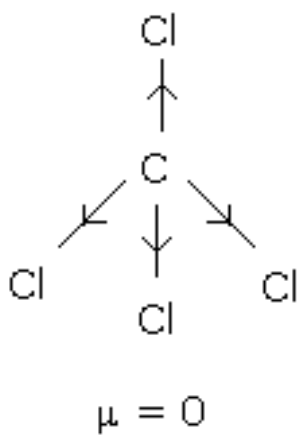
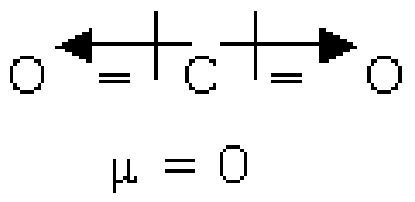
เป็นพันธะโควาเลนต์ที่เกิดจากอะตอมต่างชนิด ซึ่งแต่ละอะตอมมีสภาพไฟฟ้าลบไม่เท่ากัน

เป็นพันธะโควาเลนต์ที่มีความเป็นไอออนิกปนอยู่ด้วย

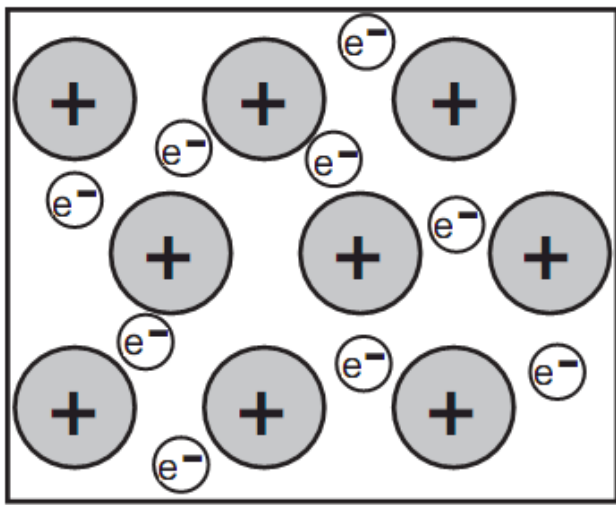


3. โมเลกุลที่พันธะมีขั้วและเป็นโมเลกุลไม่มีขั้ว โดยขั้วคู่หรือโคโพลาร์หักล้างกันหมด

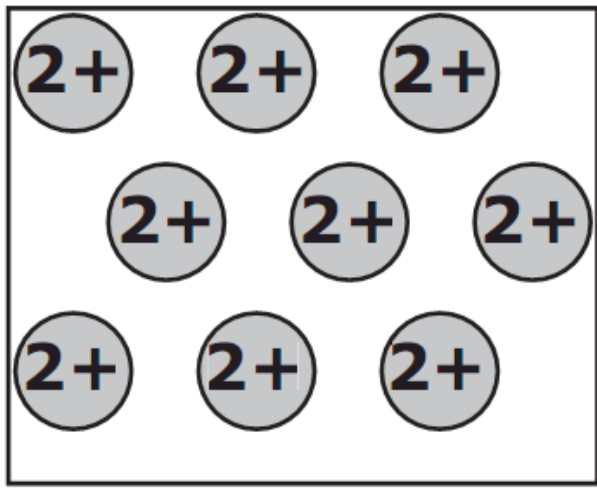
เช่น CO_2 , SO_3 , CCl_4 , CH_4



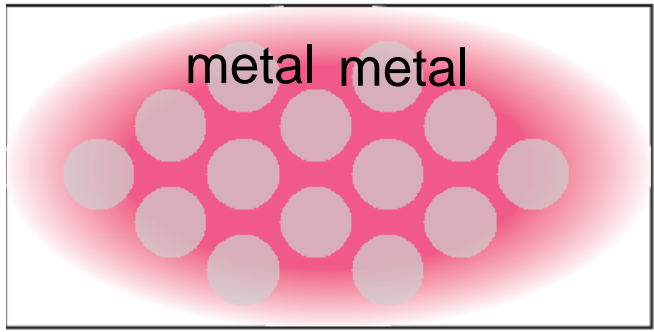
3. Metallic bond เป็นพันธะที่ยึดอะตอมในผลึกโลหะไว้ด้วยกัน โดยที่วาเลนซ์อิเล็กตรอนของแต่ละอะตอมสามารถเคลื่อนไปยังจุดต่างๆในผลึกได้ง่าย และดึงดูดนิวเคลียสของอะตอมเหล่านั้นไว้ด้วยกัน



Valence $e^- = 1$



Valence $e^- = 2$



Intermolecular forces or Intermolecular interaction

1. van der Waals force

London force หรือ London dispersion force

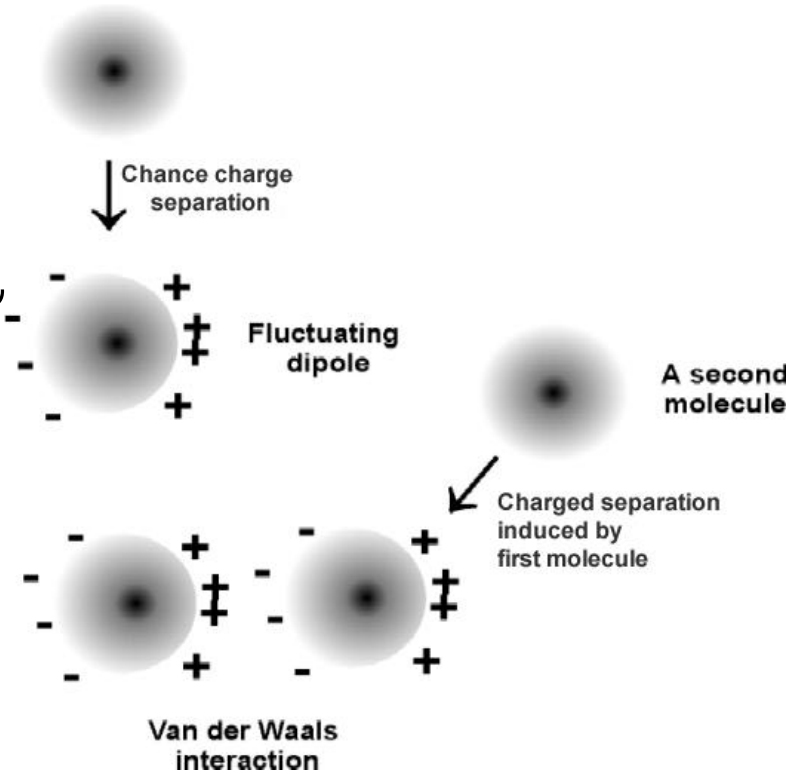
เป็นแรงดึงดูดระหว่างโมเลกุลที่ไม่มีขั้ว เกิดจาก

อิเล็กตรอนมีการเคลื่อนที่รอบนิวเคลียสตลอดเวลา ทำให้
อิเล็กตรอนเกิดการกระจายตัวไม่สม่ำเสมอ ทำให้
อิเล็กตรอนมีความหนาแน่นเพียงด้านใดด้านหนึ่งของ
นิวเคลียส จึงเกิดไดโพลชั่วครา

เช่น แรงดึงดูดระหว่างโมเลกุล He, Ne, Ar, O₂, Cl₂, N₂

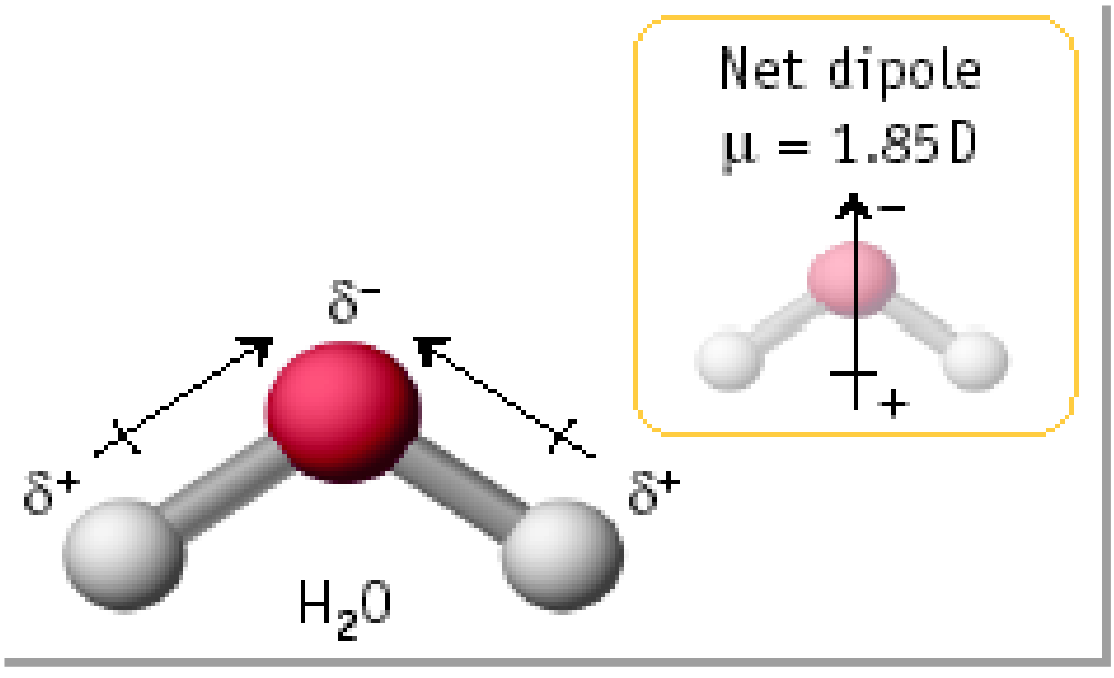
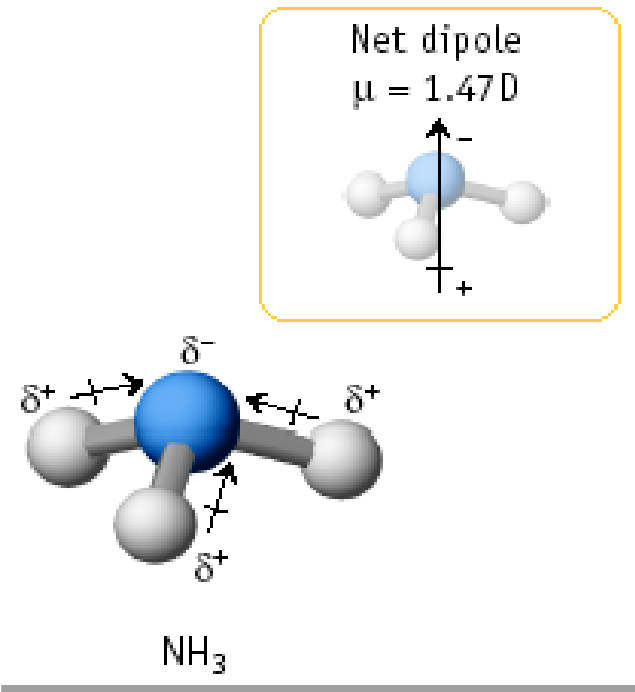
- ความแข็งแรงของแรงลอนดอนเพิ่มขึ้นตามจำนวนอิเล็กตรอน (น้ำหนักโมเลกุลสูง)

- โมเลกุลที่มีน้ำหนักโมเลกุลสูง มักเป็นอะตอมขนาดใหญ่ เกิดการบิดเบนเป็นไดโพลได้ง่าย¹⁰



2. Dipole-dipole force แรงกระทำระหว่างโมเลกุลที่มีขั้ว

โมเลกุลมากมายที่ขั้วไฟฟ้า โดยที่มีขั้วบวกอยู่บนโมเลกุลหนึ่งและมีขั้วลบอยู่อีกโมเลกุล เมื่อมีขั้วที่แตกต่างกันจึงมีทั้งแรงดึงดูดและแรงผลัก ดังนั้น โมเลกุลจึงมีแนวโน้มที่จัดเรียงตัวเองเพื่อให้มีแรงดึงดูดมากกว่าแรงผลัก

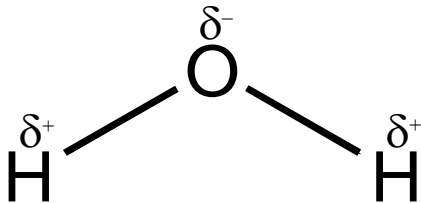
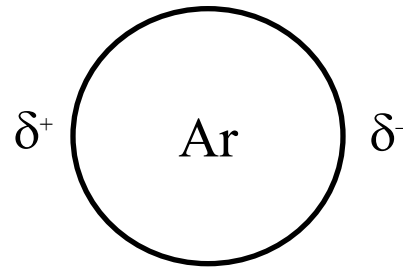
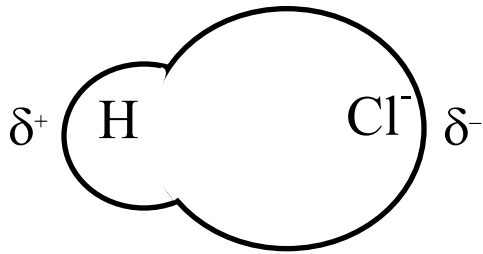


Can homogeneous diatomic molecules such as H2, O2 and N2 have dipole-dipole forces?

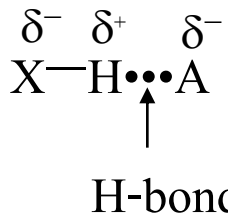
3. Dipole-induced dipole force แรงที่เกิดจากโมเลกุลที่มีขั้วเหนี่ยวนำให้โมเลกุลอื่นมีขั้วด้วย จากนั้นอะตอมหรือ โมเลกุลดังกล่าวก็มีแรงกระทำต่อกันเกิดขึ้น

โมเลกุลมีขั้ว

โมเลกุลที่ถูกเหนี่ยวนำให้มีขั้ว



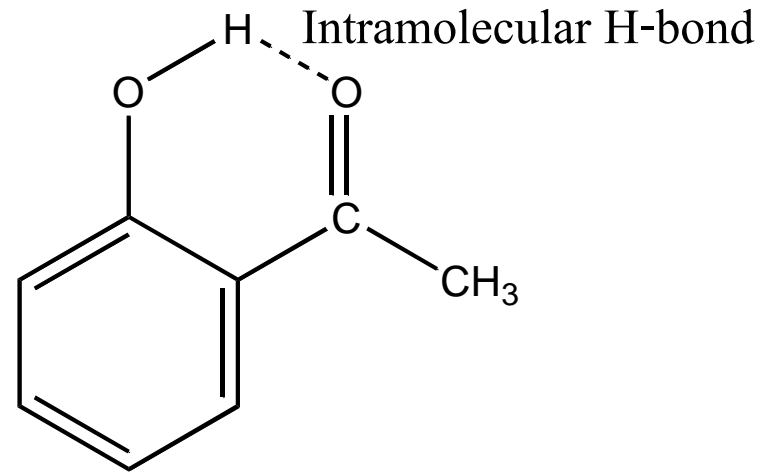
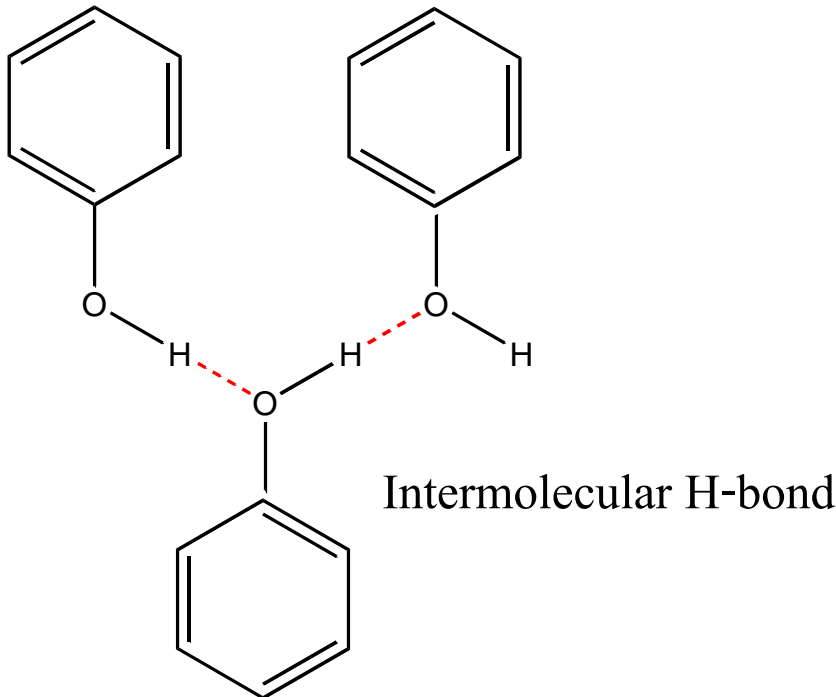
4. Hydrogen bonding พันธะระหว่างไฮโดรเจนกับอะตอมที่มีค่า electronegativity สูง (A)



X = hydrogen donor (D)

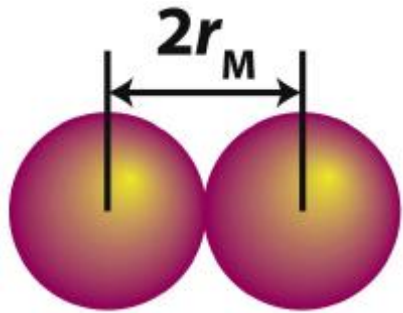
A = hydrogen acceptor (A)

ไฮโดรเจนสร้างพันธะอยู่กับอะตอมที่มีค่าอิเล็กโตรเนกาติวิตีสูง ทำให้เกิดพันธะที่มีสภาพขั้วสูง อะตอมที่มีอิเล็กโตรเนกาติวิตีสูงเหล่านี้จะดึงอิเล็กตรอนเข้าใกล้ตัวเองมาก ทำให้อะตอมไฮโดรเจนมีความเป็นบวกมากและสามารถดึงอิเล็กตรอนโคจรเดี่ยวจากอะตอมข้างเคียงได้

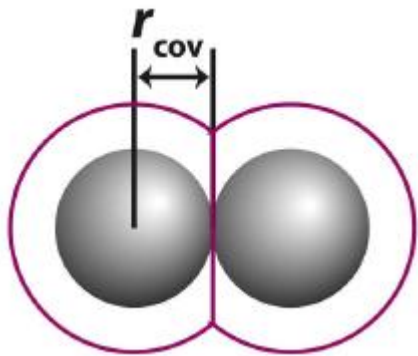


ค่าต่างๆที่เกี่ยวข้องกับการสร้างพันธะและโครงสร้างโมเลกุล

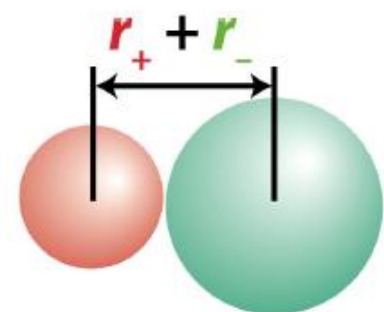
1. ความยาวพันธะ (Bond length) หมายถึงระยะทางระหว่างจุดศูนย์กลางนิวเคลียสของอะตอมสองอะตอมที่เกิดพันธะกัน เป็นค่าเฉลี่ยของระยะที่สองอะตอมอยู่ใกล้กันได้มากที่สุดและเสถียรที่สุด โดยใช้เทคนิค X-ray diffraction



รัศมีโลหะ (metallic radius) มีค่าเท่ากับครึ่งหนึ่งของระยะห่างระหว่างอะตอมโลหะที่อยู่ใกล้กันมากที่สุด



รัศมีโควาเลนต์ (covalent radius) มีค่าเท่ากับครึ่งหนึ่งของระยะห่างระหว่างอะตอมโลหะที่อยู่ใกล้กันมากที่สุด



รัศมีไอออนิก (ionic radius) เป็นรัศมีไอออนของอะตอม

 Li Li ⁺ 152 pm 60 pm	 Be Be ²⁺ 111 pm 31 pm	 F F ⁻ 64 pm 136 pm
 Na Na ⁺ 186 pm 95 pm	 Mg Mg ²⁺ 160 pm 65 pm	 Cl Cl ⁻ 99 pm 181 pm

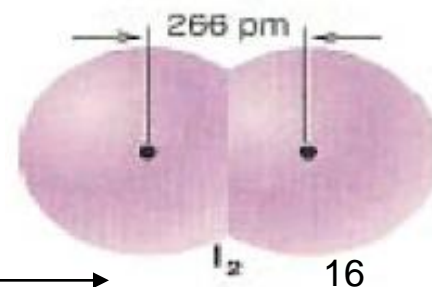
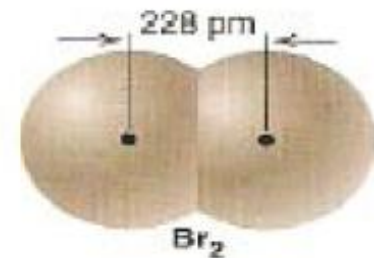
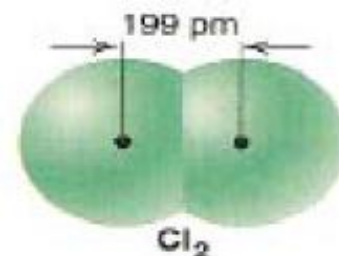
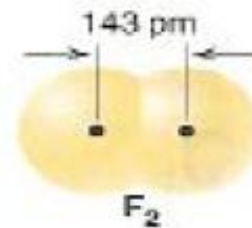
Covalent radii & Crystal radii

Elements	Covalent radii (pm)	Crystal radii (pm)
Li	123	90
Na	154	116
K	203	152
F	71	119
Cl	99	167
Br	114	182

Ion	Protons	Electrons	Radius (pm)
Ti ²⁺	22	20	100
Ti ³⁺	22	19	81
Ti ⁴⁺	22	18	75

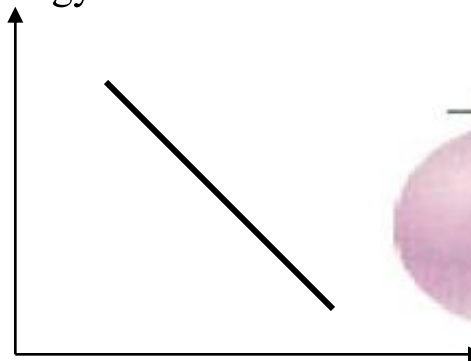
ตาราง ความยาวพันธะ (pm)

N-N	146	C-N	147	C-C	154	C-O	143	O-O	148
N=N	125	C=N	130	C=C	134	C=O	122	O=O	121
N≡N	110	C≡N	116	C≡C	120				
H-H	74	C-H	108			N-H	101	O-H	97
F-F	142	C-F	138	H-F	92				
Cl-Cl	199	C-Cl	177	H-Cl	128				
Br-Br	228	C-Br	194	H-Br	141				
I-I	267	C-I	214	H-I	160				



ชนิดของพันธะ	พลังงานพันธะเฉลี่ย (kJ/mol)	ความยาวพันธะ (pm)
O-O	146	148
O=O	498	121
C-C	348	154
C=C	614	134
C≡C	839	120

bond energy



bond length

พลังงานพันธะ (Bond energy, kJ mol^{-1})

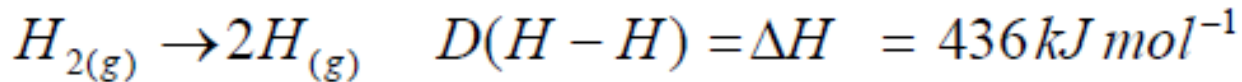
พลังงานพันธะ หมายถึง พลังงานที่ใช้ในการทำลายพันธะระหว่าง 2 อะตอมที่ยึดกันไว้ให้กลายเป็นอะตอมเดี่ยวๆ

พลังงานพันธะเฉลี่ย คือ ค่าของพลังงานที่ได้จากการเฉลี่ยค่าต่างๆของโมเลกุลหลาย

อะตอม บางครั้งเรียกว่า พลังงานพันธะ

พันธะ	พลังงานพันธะ (kJ mol^{-1})	พันธะ	พลังงานพันธะเฉลี่ย (kJ mol^{-1})	พันธะ	พลังงานพันธะเฉลี่ย (kJ mol^{-1})
H—H	436	O—O	138	C—F	485
H—F	565	N—N	159	O—Cl	205
H—Br	431	N=N	418	N—Cl	210
H—I	364	C—C	348	C—Cl	326
H—F	297	C=C	619	P—Cl	329
F—F	155	C≡C	812	S—Cl	276
Cl—Cl	239	O—H	463	C—O	335
Br—Br	190	N—H	389	C=O	707
I—I	149	C—H	413	C≡O	1,070

พลังงานสลายพันธะ (dissociation energy; **D**) เป็นพลังงานที่ใช้ในการทำลายพันธะระหว่างโมเลกุลอะตอมคู่ สลายเป็นอะตอมในสถานะแก๊ส ในทางกลับกัน ถ้าอะตอม 2 อะตอมมารวมกัน และเกิดพันธะเคมีขึ้น จะคายพลังงานออกมาเท่ากับพลังงานการสลายพันธะ



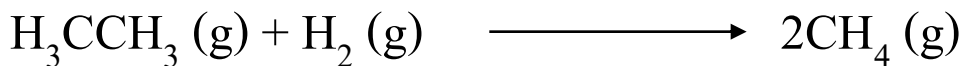
การสลายพันธะเป็นการเปลี่ยนแปลงประเภทดูดพลังงาน (Endothermic reaction) เป็นปฏิกิริยาที่ใช้พลังงานในการสลายพันธะเดิมมากกว่าพลังงานที่คายออกเมื่อเกิดพันธะใหม่



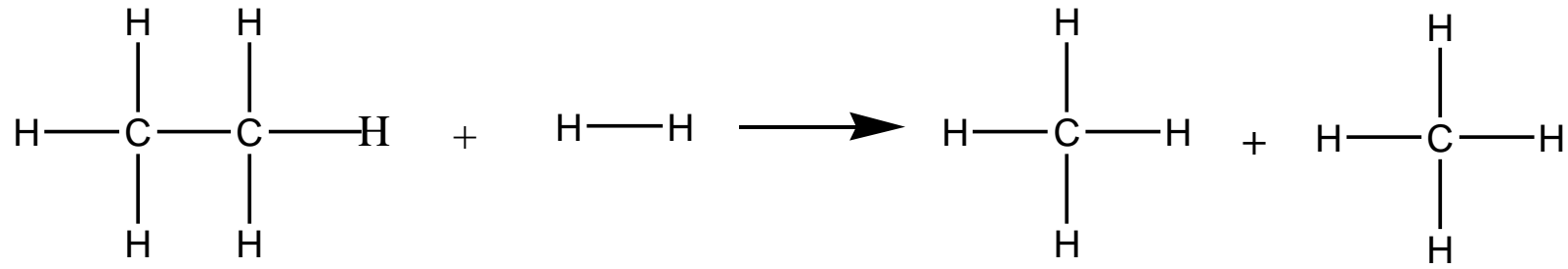
การเกิดพันธะเป็นการเปลี่ยนแปลงประเภทคายพลังงาน (Exothermic reaction) เป็นปฏิกิริยาที่ใช้พลังงานในการสลายพันธะเดิมน้อยกว่าพลังงานที่คายออกเมื่อเกิดพันธะใหม่



ตัวอย่าง จงคำนวณหาค่าพลังงานที่เปลี่ยนแปลงโดยเฉลี่ยของปฏิกิริยา



เนื่องจากการทำลายพันธะระหว่าง C-C ใน H₃C-CH₃ และ H-H ใน H₂ (ระบบต้องการใช้พลังงาน เครื่องหมายข้างหน้าจึงเป็นบวก) และมีการสร้างพันธะระหว่าง C-H ใน CH₄ อีกสองพันธะ (ระบบคายพลังงาน ใช้เครื่องหมายลบ)

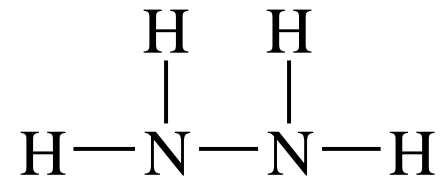


พลังงานที่เปลี่ยนแปลงทั้งหมด (ΔH) เป็นดังนี้

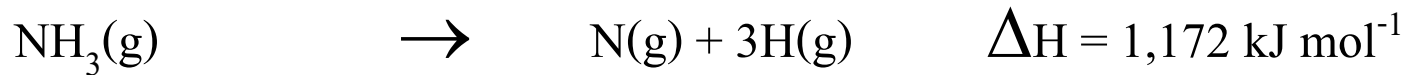
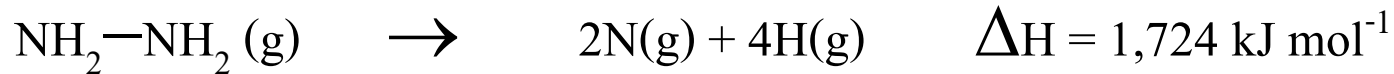
$$\begin{aligned}
 \Delta H &= \text{C-C} + \text{H-H} - 2(\text{C-H}) \\
 &= 348 + 436 - 2(413) \\
 &= -42 \text{ kJ}
 \end{aligned}$$

ปฏิกิริยานี้เป็นปฏิกิริยาคายความร้อน

ตัวอย่าง จงคำนวณหาค่าพลังงานพันธะ N—N ของโมเลกุล $\text{NH}_2\text{—NH}_2$



หากทราบว่า การเปลี่ยนแปลงพลังงานทั้งหมด (ΔH) ของปฏิกิริยารวมเป็น ดังนี้



$$\therefore E(\text{N—H}) = 1,172 \div 3 = 391 \text{ kJ mol}^{-1}$$

ใน $\text{NH}_2\text{—NH}_2$ มีพลังงานพันธะเท่ากับ $E(\text{N—N}) + 4E(\text{N—H}) = 1,724 \text{ kJ mol}^{-1}$

$$\text{ดังนั้น พลังงานพันธะ N—N} = 1,724 - 4(391) \text{ kJ mol}^{-1}$$

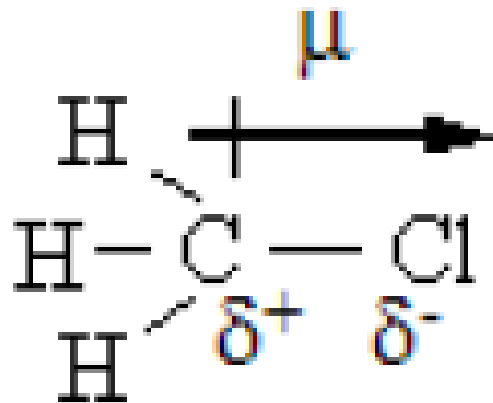
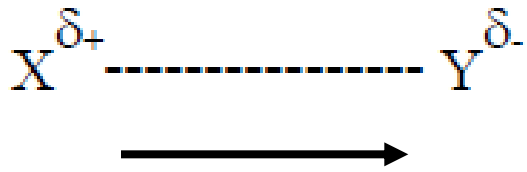
$$= 160 \text{ kJ mol}^{-1}$$

สภาพัฒของโมเลกุล (molecular polarity)

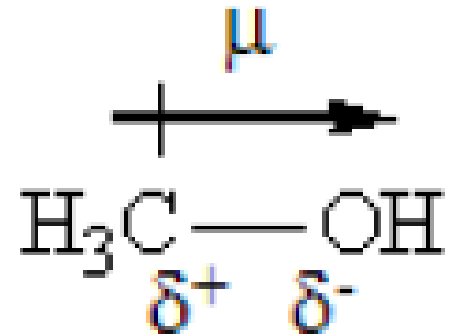
โมเลกุลที่ประกอบด้วยอะตอมต่างชนิดกัน (heterogeneous molecule) ความเป็นขั้วขึ้นกับค่า electronegativity (EN) อะตอมที่มีค่า EN มากกว่าจะมีสมบัติทางไฟฟ้าค่อนข้างเป็นลบมากกว่า

อะตอมที่มีค่า EN สูงกว่าดึงดูดอิเล็กตรอนได้มากกว่า จึงเขียน δ^- มีประจุลบ และ อะตอมที่มีค่า EN น้อยกว่าดึงดูดอิเล็กตรอนได้น้อยกว่า จึงเขียน δ^+ มีประจุบวก

เครื่องหมาย \rightarrow แสดงขั้วของพันธะ โดยหัวลูกศรชี้ไปทางที่อิเล็กตรอนถูกดึงไปยังอะตอมที่มี EN สูงกว่า



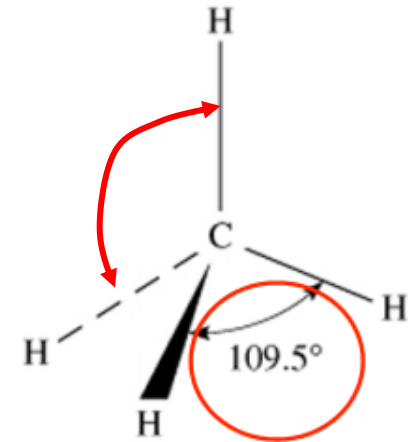
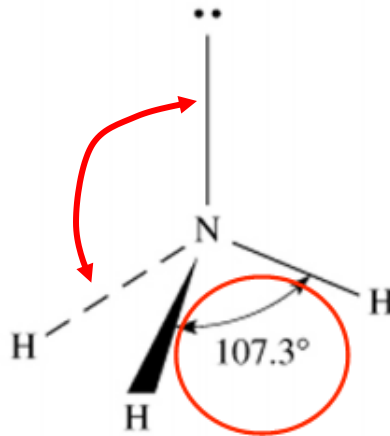
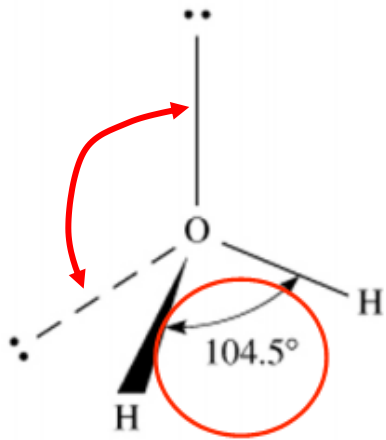
Chloroform



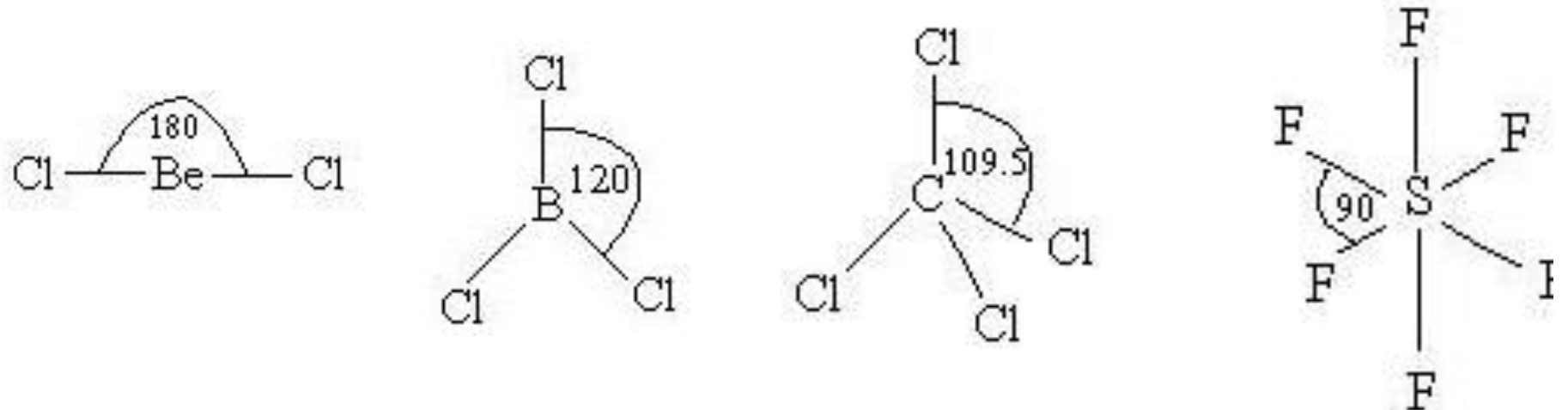
Methanol

มุมพันธะ (Bond angle)

มุมระหว่างพันธะของโมเลกุลโคเวเลนต์ ขึ้นอยู่กับจำนวนอิเล็กตรอนคู่โดดเดี่ยวรอบอะตอมกลางเป็นเกณฑ์ ถ้าอะตอมกลางมีอิเล็กตรอนคู่โดดเดี่ยวไม่เท่ากัน โมเลกุลโคเวเลนต์อะตอมกลางมีอิเล็กตรอนคู่โดดเดี่ยวมาก จะผลักกันมากทำให้มุมระหว่างพันธะแคบ



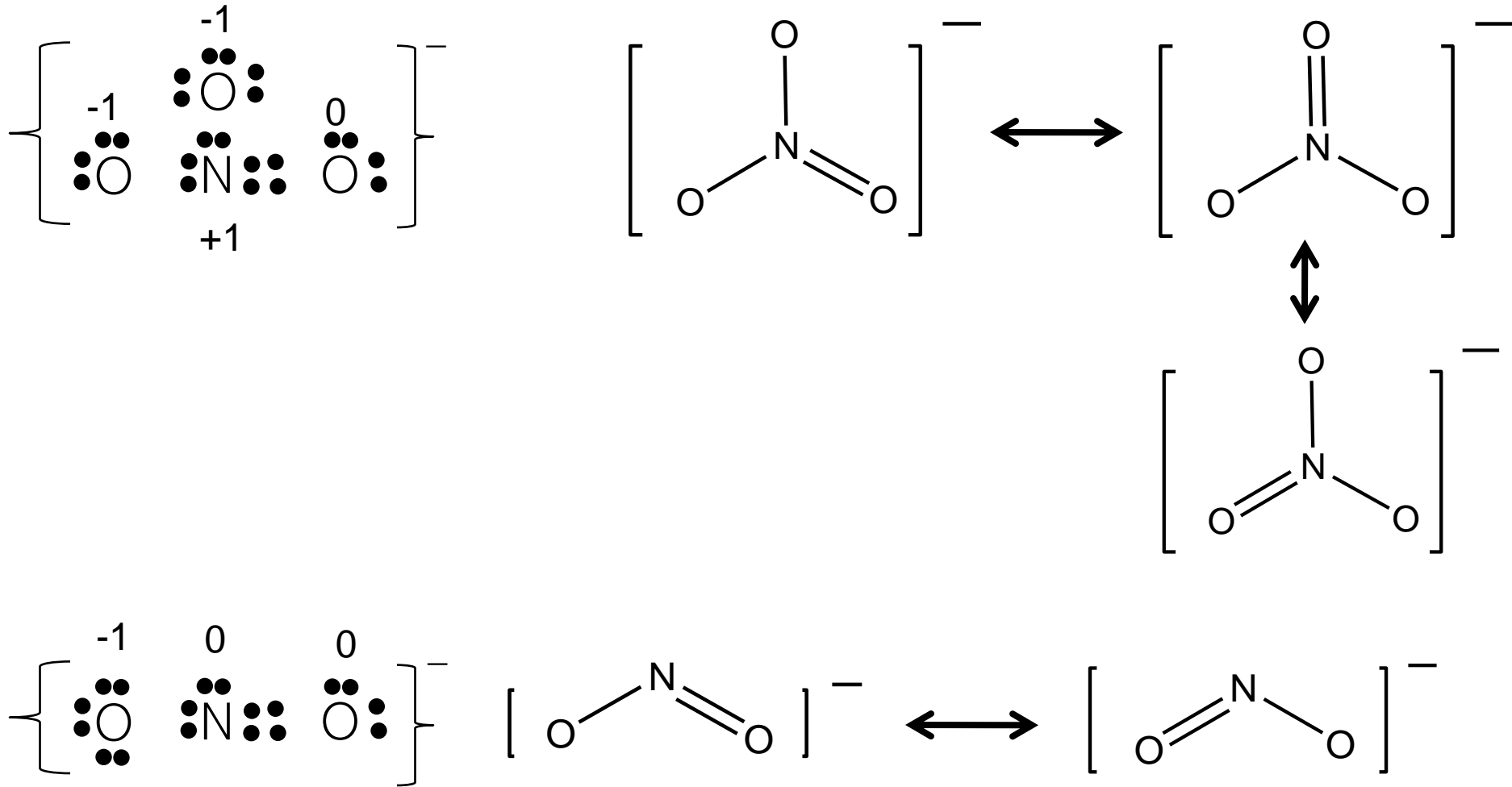
โมเลกุลโคเวเลนต์ใดๆ ถ้าอะตอมกลางไม่มีอิเล็กตรอน โมเลกุลใดมีจำนวนพันธะมาก มุมจะแคบกว่าโมเลกุลที่มีจำนวนพันธะน้อย



สารประกอบ	รูปร่าง	จำนวนพันธะ	มุมพันธะ
BeCl ₂	Linear	2	180°
BCl ₃	Trigonal planar	3	120°
CCl ₄	Tetrahedral	4	109.5°
SF ₆	Octahedral	6	90°

เรโซแนนซ์ (Resonance)

เรโซแนนซ์ คือปรากฏการณ์ที่สารชนิดหนึ่งมีโครงสร้างลิวอิสได้หลายรูปแบบ ทุกแบบไม่เป็นโครงสร้างที่แท้จริงของสารนั้น เช่น

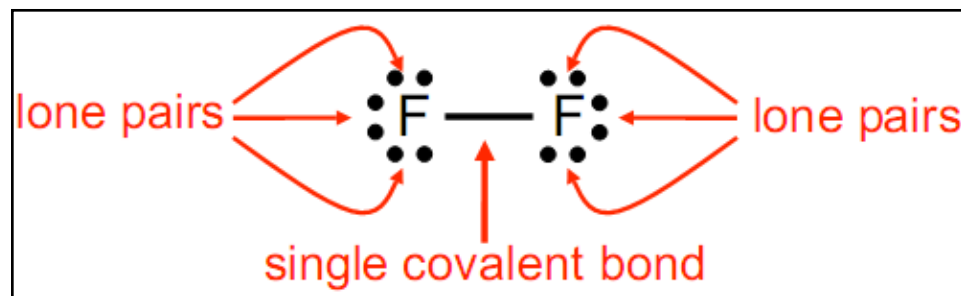
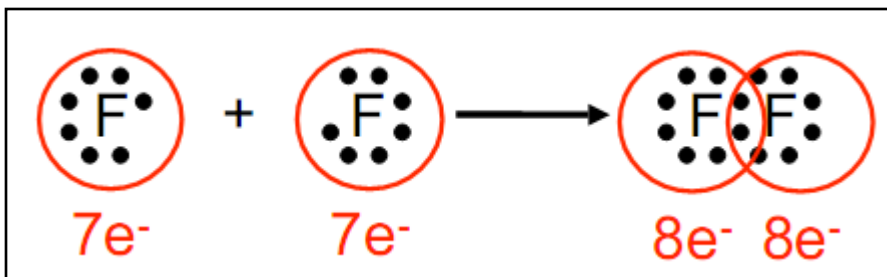
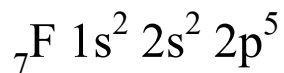


ทฤษฎีที่ใช้อธิบายพันธะโควาเลนต์

1. Lewis electron dot structure G. N. Lewis (1875 – 1946)

Octet rule: อะตอมใด ๆ มีแนวโน้มที่จะสร้างพันธะจำนวนหนึ่งเพื่อให้อะตอมมีเวเลนซ์อิเล็กตรอนครบ 8

- สัญลักษณ์พันธะ
- แทน 1 อิเล็กตรอน
 - แทน 2 อิเล็กตรอน (1 พันธะ)



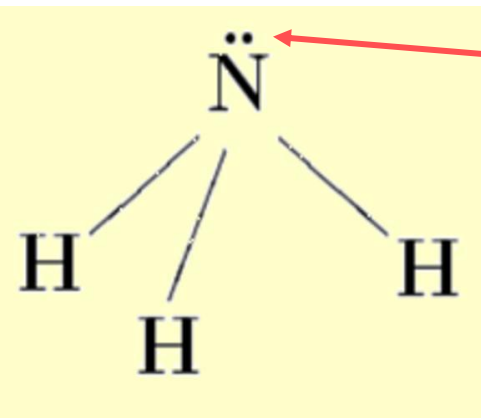
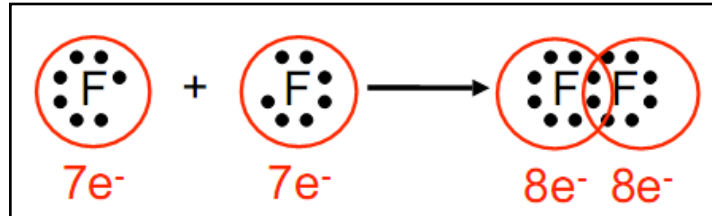
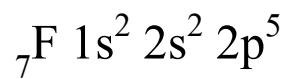
Octet rule ใช้ได้ดีกับธาตุในคาบที่ 2 (Li → Ne) ของตารางธาตุเท่านั้น

สารประกอบโควาเลนต์มีลักษณะเป็น โมเลกุล จากสูตร โมเลกุลนำมาเขียนเป็นสูตรลิวอิส
กฎทั่วไปของ Lewis structure

1. พันธะเกิดจากอิเล็กตรอนหนึ่งคู่
2. อะตอมใด ๆ มีแนวโน้มที่จะสร้างพันธะจำนวนหนึ่งเพื่อให้อะตอมมีเวเลนซ์อิเล็กตรอนครบ 8
3. โมเลกุลพยายามอยู่ในสภาพที่ทำให้พลังงานต่ำที่สุดที่ทำให้เกิดพันธะมากที่สุด พันธะ
 แข็งแรงที่สุด เสถียรที่สุด การจัดเรียงตัวของอะตอมทำให้เกิดแรงผลักร้อยที่สุด

สัญลักษณ์พันธะ • แทน 1 อิเล็กตรอน

— แทน 2 อิเล็กตรอน (1 พันธะ)



อิเล็กตรอนคู่โดดเดี่ยว (lone pair electron)

ในสูตรโครงสร้างมักไม่เขียน อิเล็กตรอนคู่โดดเดี่ยว
 ของอะตอมที่ไม่ใช่อะตอมกลาง

หลักการเขียนสูตรลิวิสหรือสูตรจุดอิเล็กตรอน

-ธาตุแรกในสูตรมักเป็นอะตอมกลางซึ่งมีสภาพไฟฟ้าลบน้อยที่สุด

-ยกเว้น HClO_4 (Cl เป็นอะตอมกลาง) SCN^- (C เป็นอะตอมกลาง)

1. บวกจำนวนเวเลนซ์อิเล็กตรอนของแต่ละอะตอม ถ้าสารเป็นไอออนบวกให้ลบด้วยประจุบวก แต่สารเป็นไอออนลบให้บวกด้วยประจุลบ

2. เติมอิเล็กตรอนหนึ่งคู่ระหว่างอะตอมที่ใกล้กัน

3. เติมอิเล็กตรอนให้กับอะตอมที่ไม่ใช่อะตอมกลางให้ครบแปดก่อน

4. ถ้ามีอิเล็กตรอนเหลืออยู่ ให้เติมที่อะตอมกลางเป็นคู่ๆ จนหมด

5. เมื่อใช้อิเล็กตรอนหมดแล้ว แต่อะตอมกลางมีอิเล็กตรอนไม่ครบแปด แสดงว่าไอออนนั้นต้องมีพันธะคู่หรือพันธะสาม

6. เมื่อเขียนเสร็จแล้วให้นำจำนวนอิเล็กตรอนในสูตรทั้งหมดอีกครั้ง ให้เท่ากับที่นับไว้ในข้อ 1

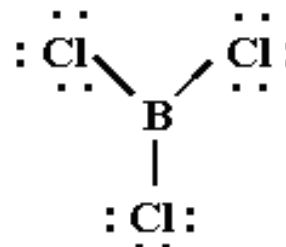
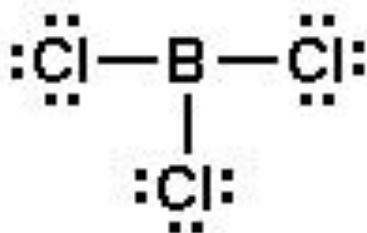
ข้อยกเว้นของกฎออกเตต

1. อะตอม H มีอิเล็กตรอนล้อมรอบ 2 อิเล็กตรอน

2. Be และ B เป็นอะตอมที่มีอิเล็กตรอนไม่ครบแปด

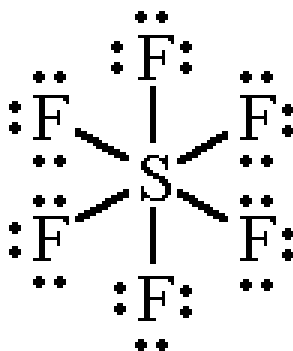
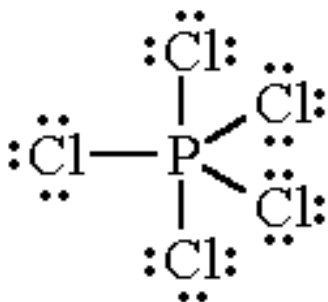
Be หมู่ IIA มีอิเล็กตรอนล้อมรอบเพียง 4 และเกิดเป็นสารประกอบโควาเลนต์

B หมู่ IIIA มีอิเล็กตรอนล้อมรอบเพียง 6



http://dec.fq.edu.uy/catedra_inorganica/general1/geometria/bcl3.html

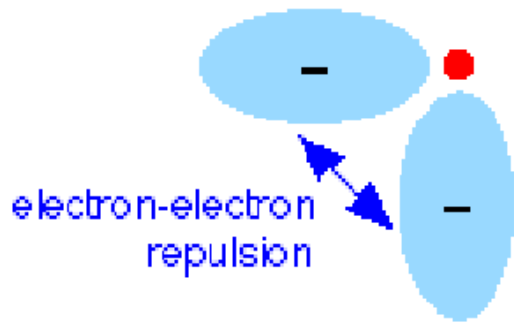
3. สารที่อะตอมกลางมีเวเลนซ์อิเล็กตรอนมากกว่าแปด ได้แก่ อโลหะหมู่ 5, 6 คาบ 3 เช่น P, S ได้แก่ สารประกอบ PCl_5 , SF_6

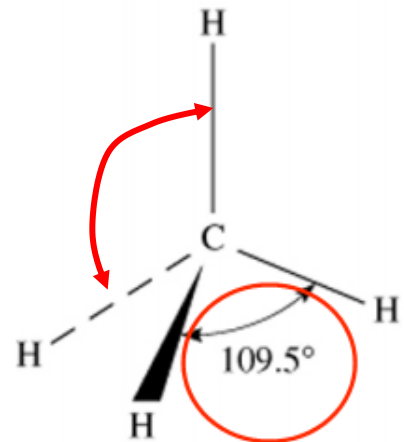
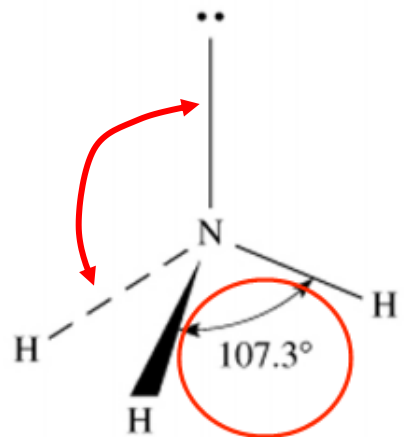
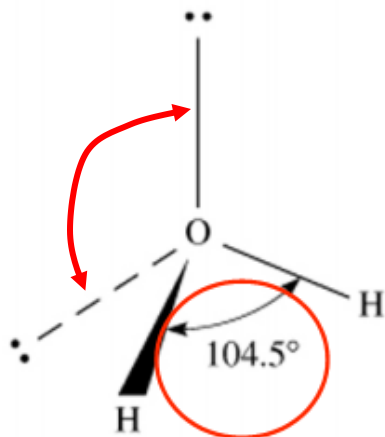


<http://www.chem.purdue.edu/gchelp/vsepr/rule2ex2.html>

2. Valence Shell Electron Pair Repulsion Theory, VSEPR

ทฤษฎีการผลักคู่อิเล็กตรอนในวงเวเลนซ์ เป็นทฤษฎีที่ใช้ทำนายรูปร่างของโมเลกุลโดยอาศัยการผลักกันทางไฟฟ้า (electrostatic repulsion) ของอิเล็กตรอนคู่ และมีการใช้ Lewis electron-dot structure ร่วมด้วย เป็นวิธีที่ใช้ทำนายรูปร่างอย่างคร่าวๆ โดยเปรียบเทียบกับ การทดลอง อิเล็กตรอนมีการผลักกันเพราะมีประจุลบ แต่ละคู่อิเล็กตรอนก็เกิดแรงผลักกับอิเล็กตรอนคู่อื่นๆ ได้ โมเลกุลจึงมีการคัดแปลงโครงสร้าง (geometry) เพื่อให้ตำแหน่งของคู่อิเล็กตรอนวงนอกสุด (valence electron) อยู่ห่างจากกันเท่าที่จะเป็นไปได้ โดยแรงผลักระหว่างอิเล็กตรอนคู่โดดเดี่ยวมีค่ามากที่สุด รองลงมาคือแรงผลักระหว่างอิเล็กตรอนคู่โดดเดี่ยวและอิเล็กตรอนที่ใช้ในการเกิดพันธะ แรงผลักลที่น้อยที่สุดคือแรงผลักระหว่างอิเล็กตรอนคู่ที่ใช้ในการเกิดพันธะ





lone-pair vs. lone pair
repulsion

>

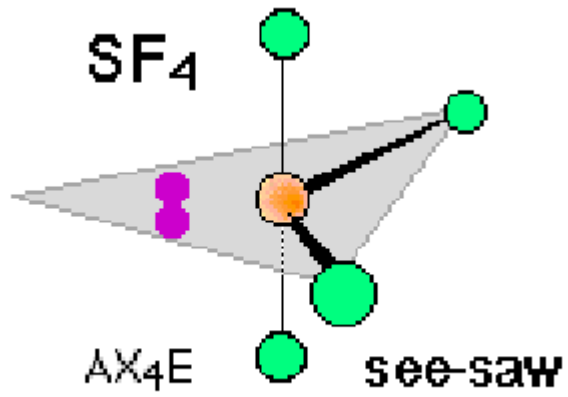
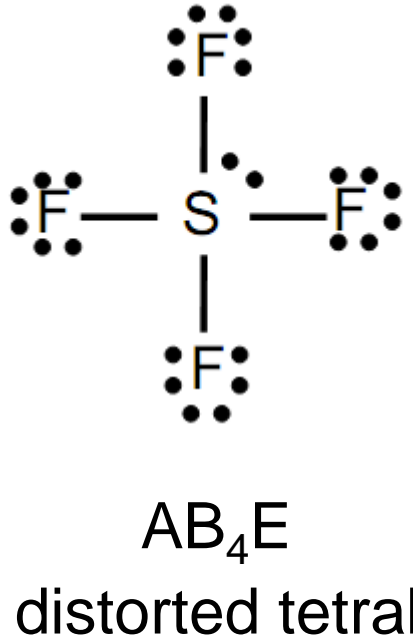
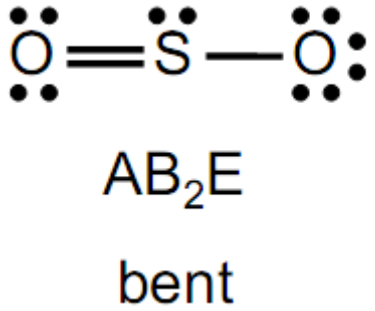
lone-pair vs. bonding
pair repulsion

>

bonding-pair vs. bonding
pair repulsion

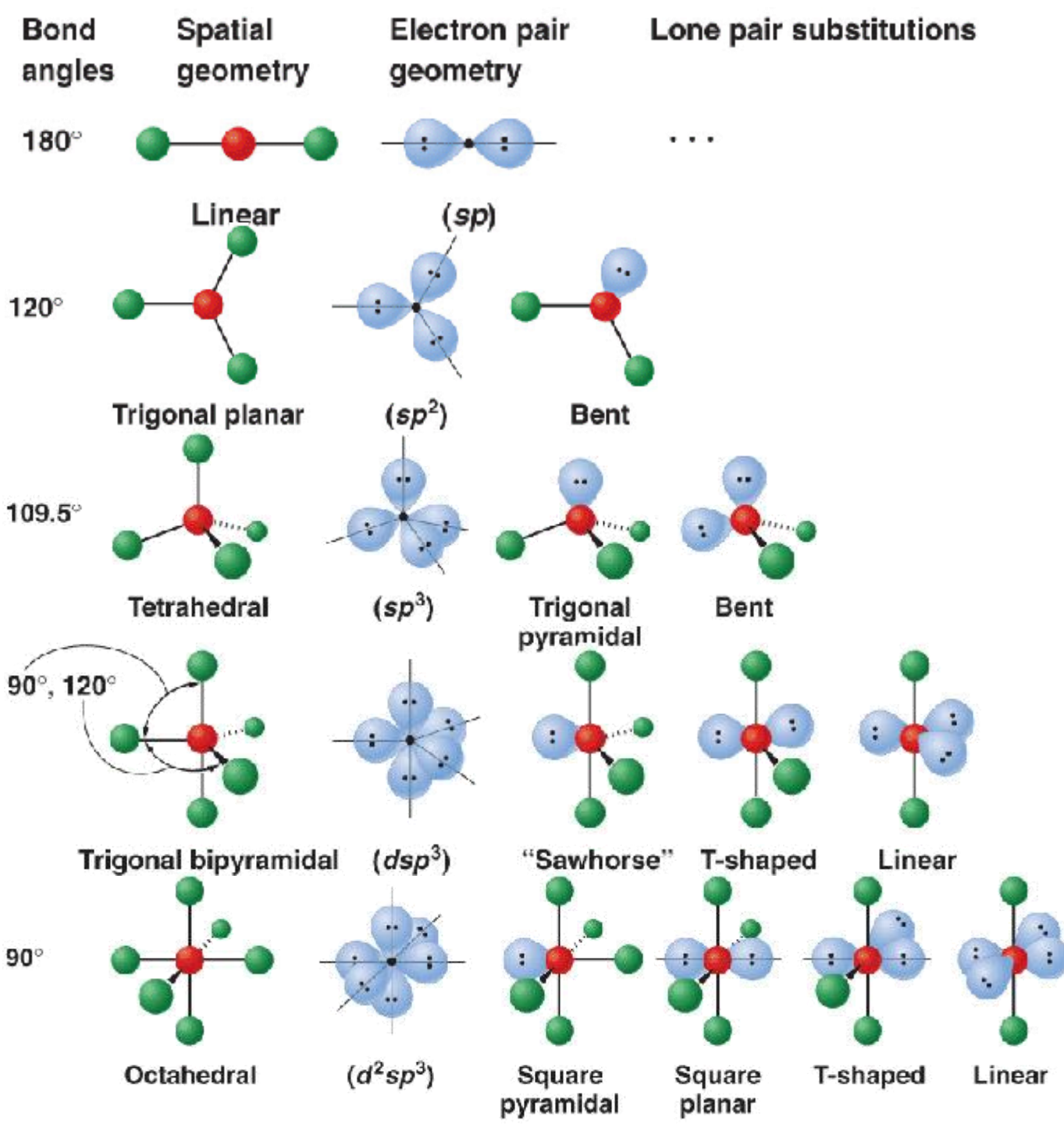
การทำนายรูปร่างเรขาคณิตของโมเลกุล

- 1. วาดโครงสร้างลิวอิสของโมเลกุล
- 2. นับจำนวนอิเล็กตรอนคู่โดดเดี่ยวที่อะตอมกลางและจำนวนของอะตอมที่สร้างพันธะกับอะตอมกลาง
- 3. ใช้ VSEPR ทำนายรูปร่างของโมเลกุล



Molecular shape by VSEPR model

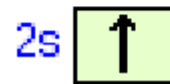
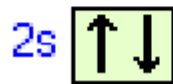
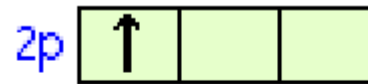
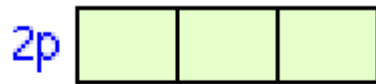
Coordination number	VSEPR model	Molecular shape	Example
2	AB_2	Linear	CO_2 , $BeCl_2$
	AB_2E	Bent (V-shape)	SO_2 , $SnCl_2$
	AB_2E_2	Bent (V-shape)	H_2O , SCl_2
	AB_2E_3	Linear	XeF_2
3	AB_3	Trigonal planar	BF_3
	AB_3E	Trigonal pyramidal	NH_3
	AB_3E_2	T-shape	ClF_3 , BrF_3
4	AB_4	Tetrahedral	CH_4 , $SiCl_4$
	AB_4E	Distorted tetrahedral (see saw)	SF_4
	AB_4E_2	Square planar	XeF_4
5	AB_5	Trigonal bipyramidal	PF_5 , PCl_5 , SbF_5
	AB_5E	Square pyramidal	IF_5 , BrF_5 , ClF_5
6	AB_6	Octahedral	SF_6



3. Valence Bond Theory (VBT) and Hybridization

เป็นการผสมระหว่างออร์บิทัลต่างชนิดกัน เช่น s orbital และ p orbital ได้ออร์บิทัลใหม่ เรียก hybrid orbital

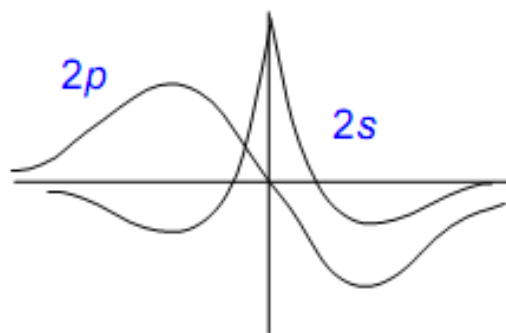
กระบวนการสร้าง hybrid orbital เรียก hybridization



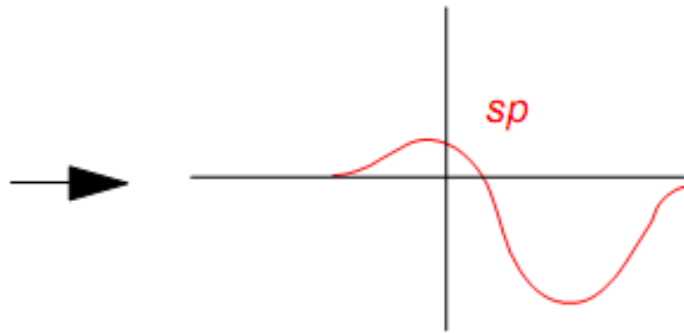
Be atom in ground state

Be atom in excited state

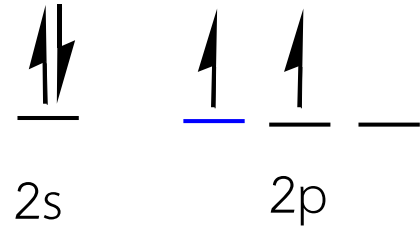
atomic orbitals



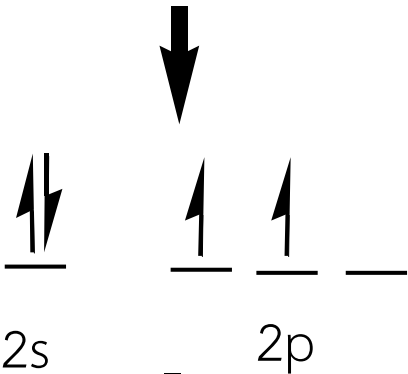
hybrid orbitals



sp^3 hybridization ได้แก่ CH_4

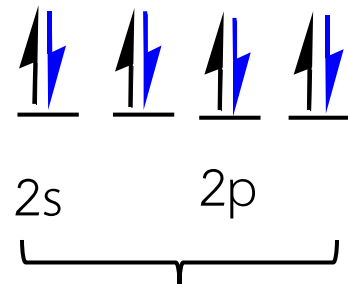


ground state



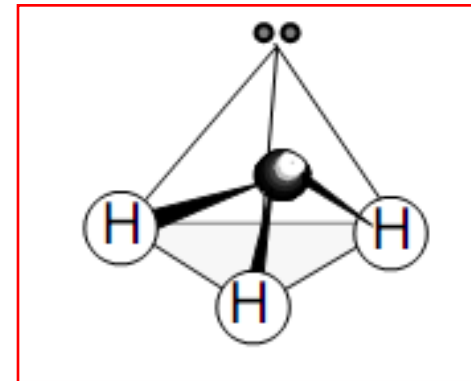
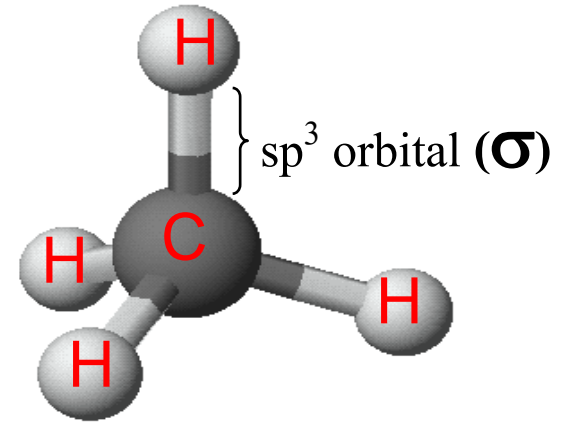
excited state

+ 4 e^- จากไฮโดรเจน 4 อะตอม

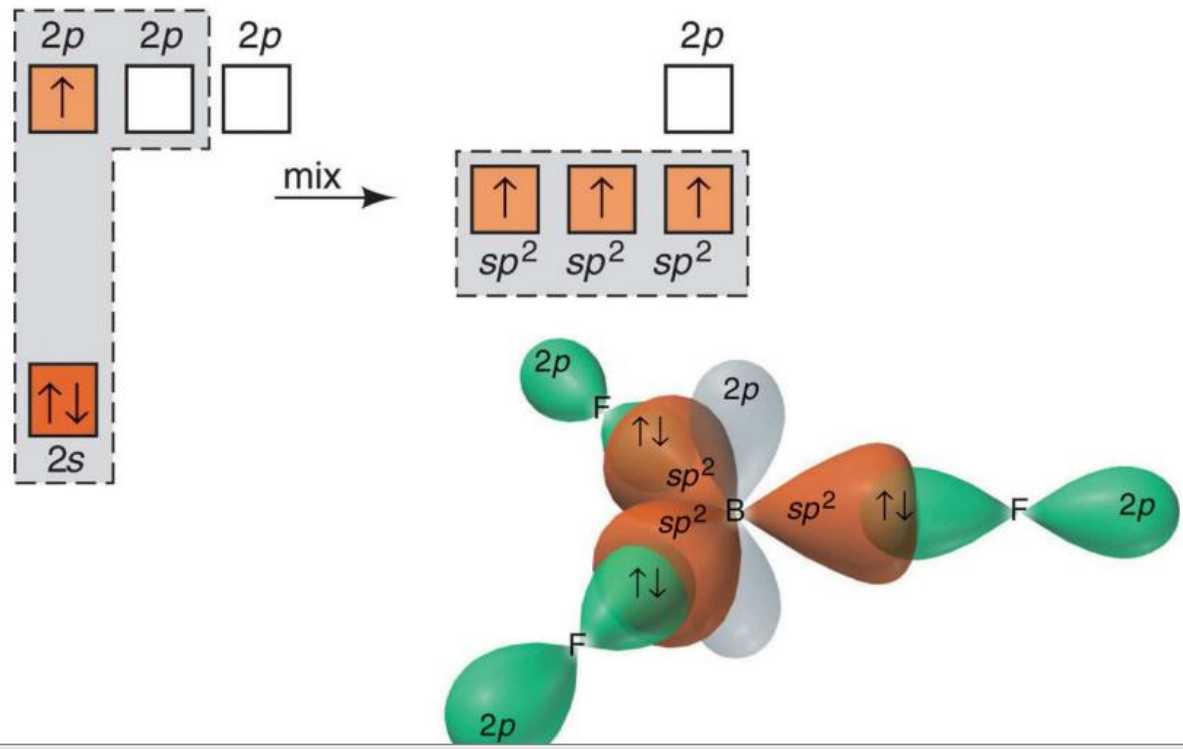
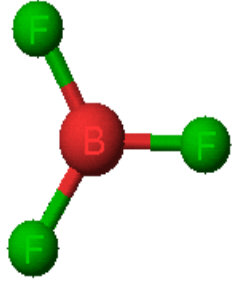


hybrid state

sp^3 ไฮบริดออร์บิทัล



sp^2 hybridization ใ้แก่ BF_3



sp^2 ($1\pi+1\sigma$)

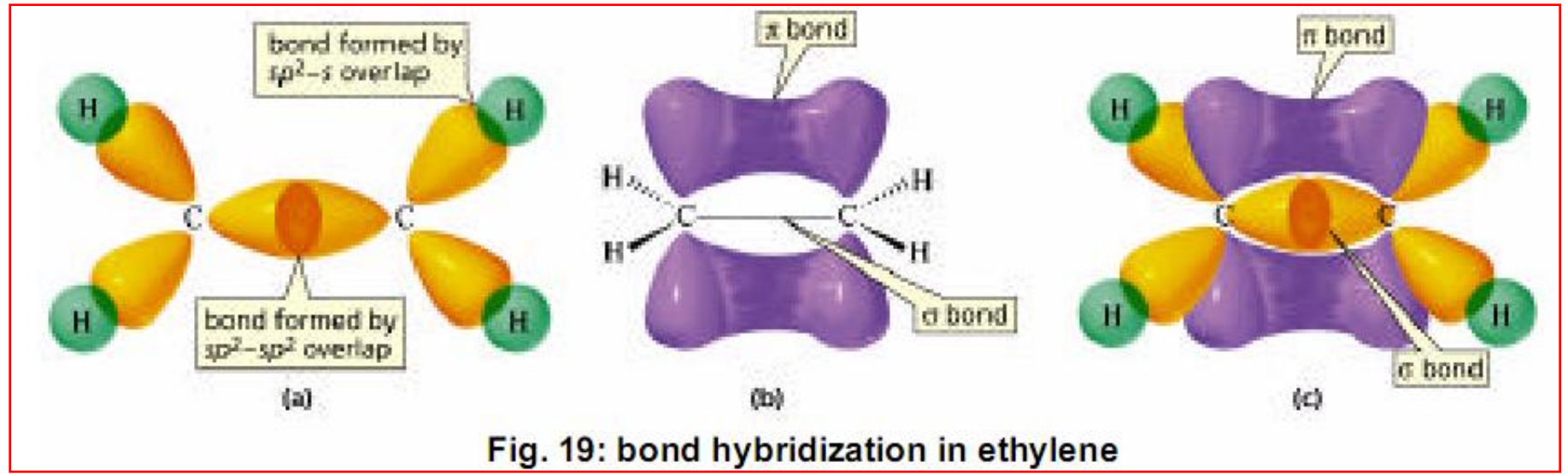
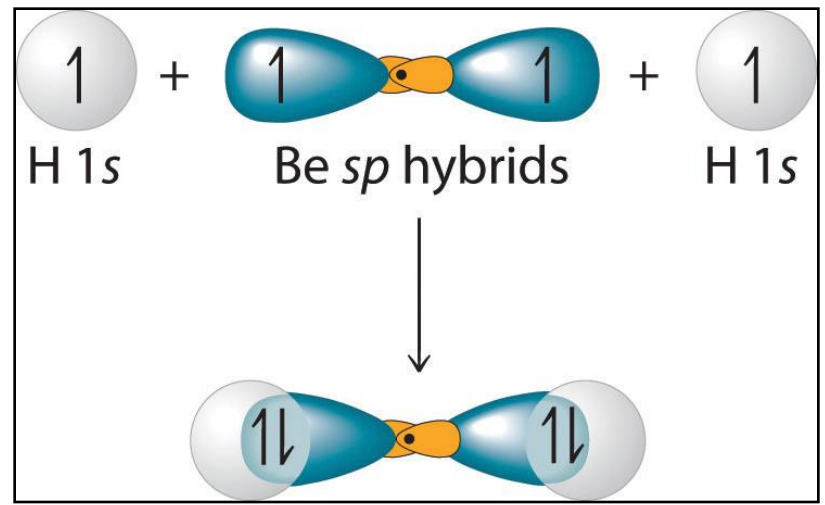
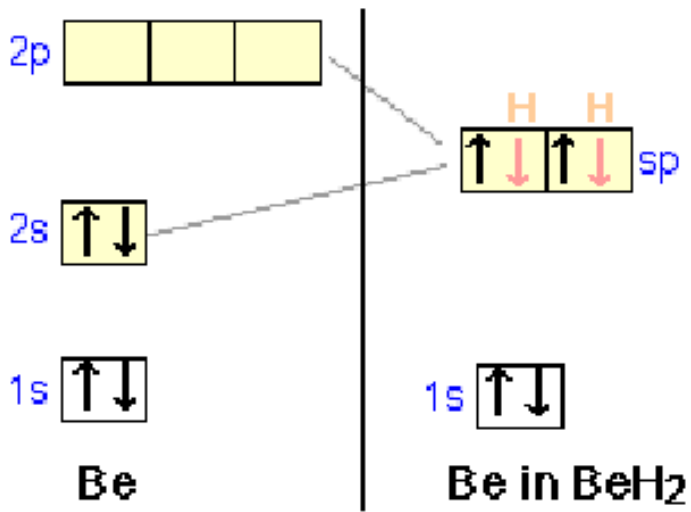
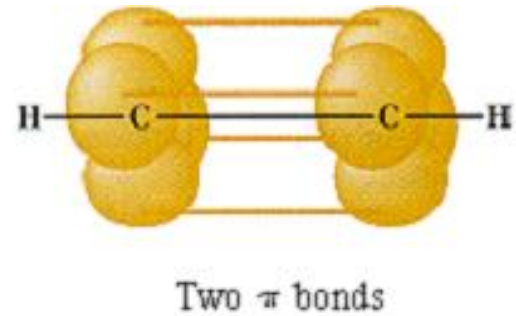
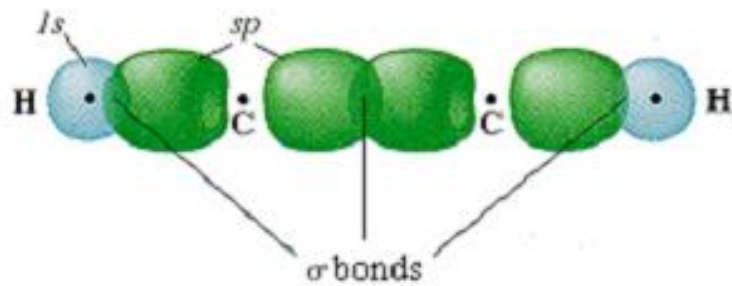


Fig. 19: bond hybridization in ethylene

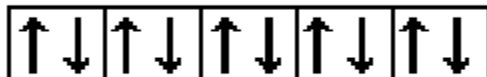
sp hybridization ได้แก่ BeH₂



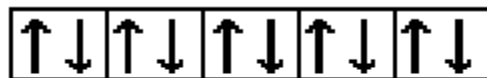
sp (1σ+2π)



Zn(II) in ZnCl₂



Zn²⁺ ion



3d

Cl-

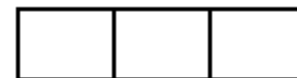


sp hybrid orbitals

(linear)



4s

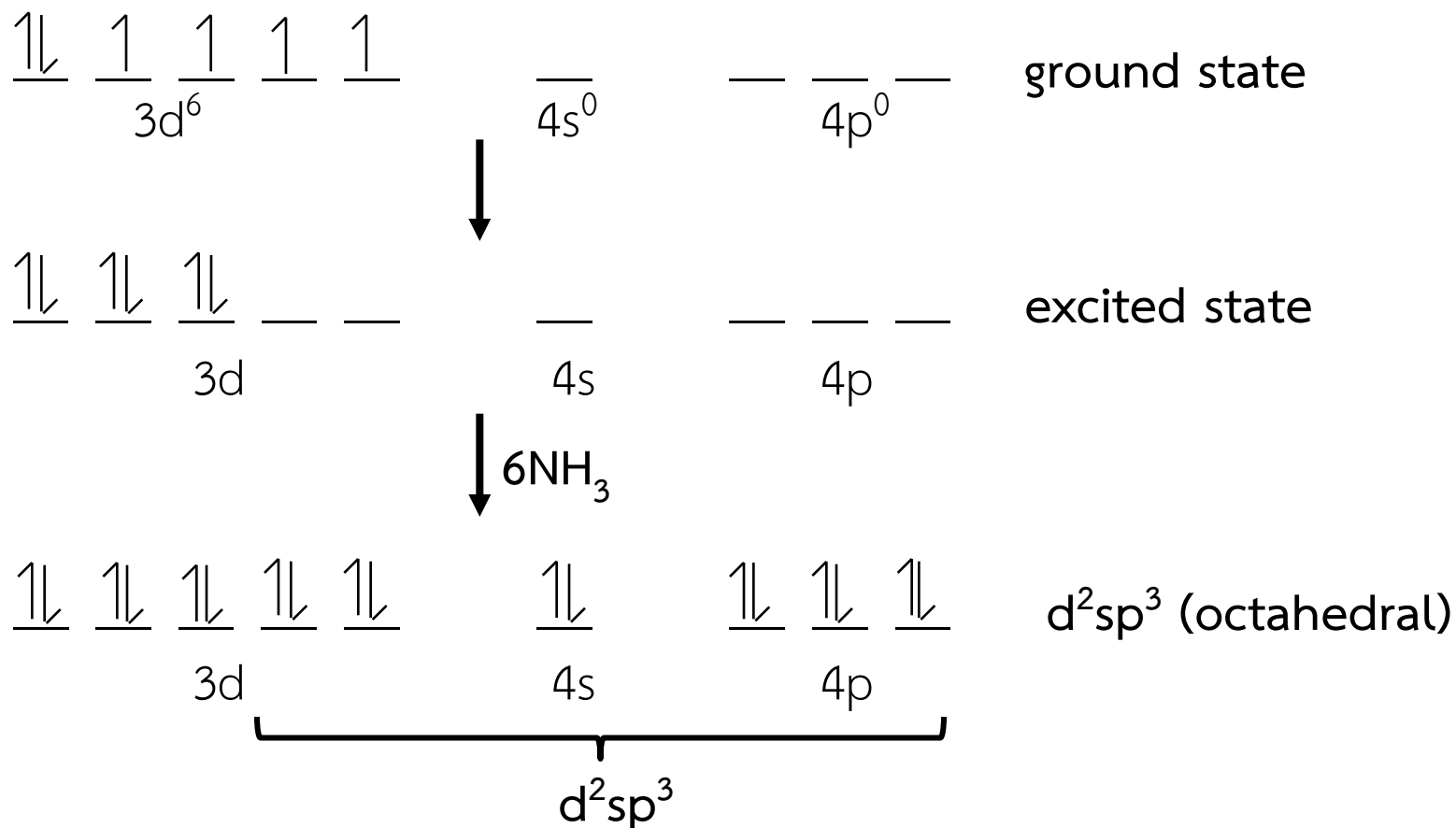


4p

d^2sp^3 and sp^3d^2 hybridization of $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$

$_{27}\text{Co}$ electron configuration = $[\text{Ar}] 4s^2 3d^7$

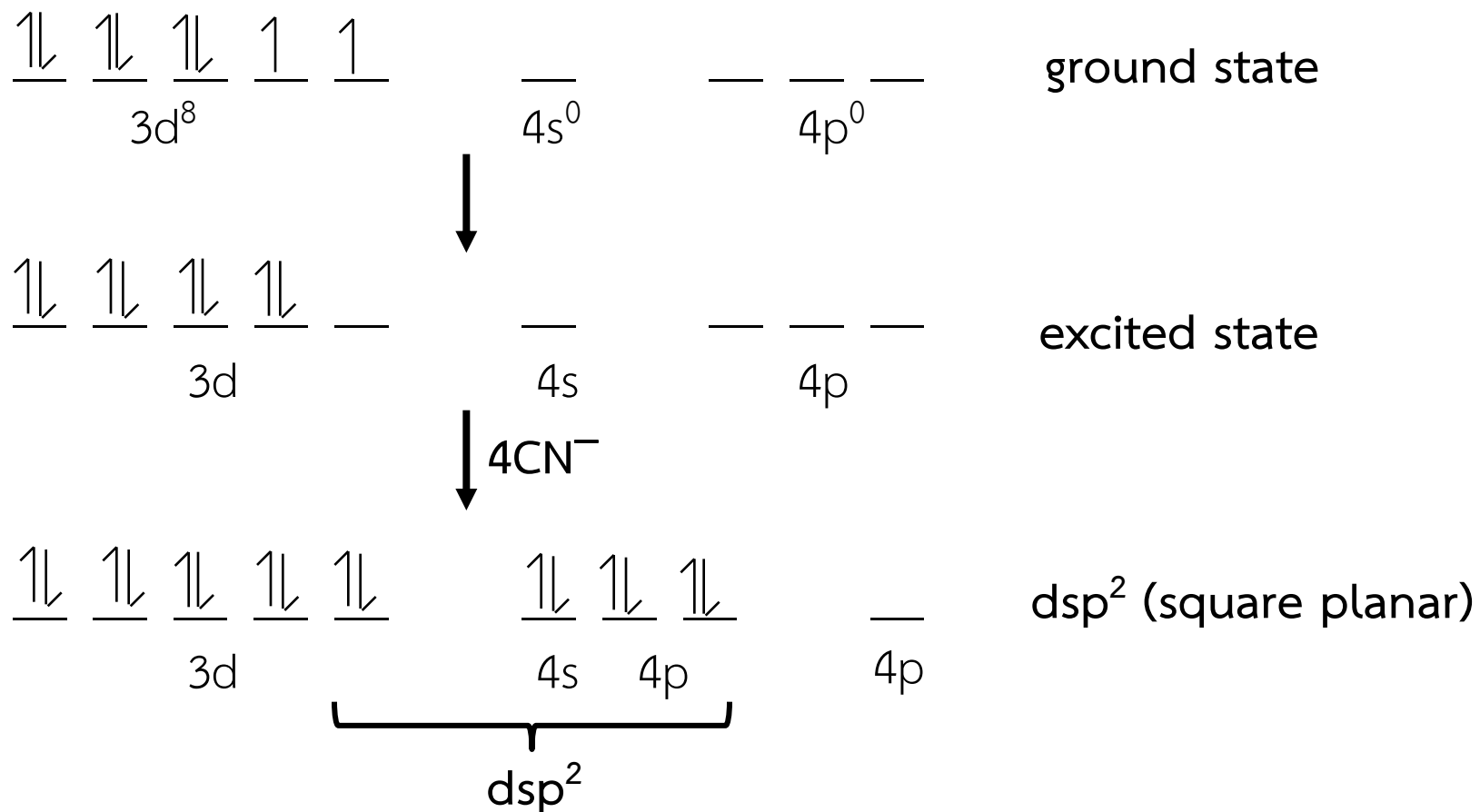
$\text{Co}^{3+} = [\text{Ar}] 3d^6$



dsp^2 and sp^2d hybridization of $[\text{Ni}(\text{CN})_4]^{2-}$

^{28}Ni electron configuration = $[\text{Ar}] 4s^2 3d^8$

$\text{Ni}^{2+} = [\text{Ar}] 3d^8$



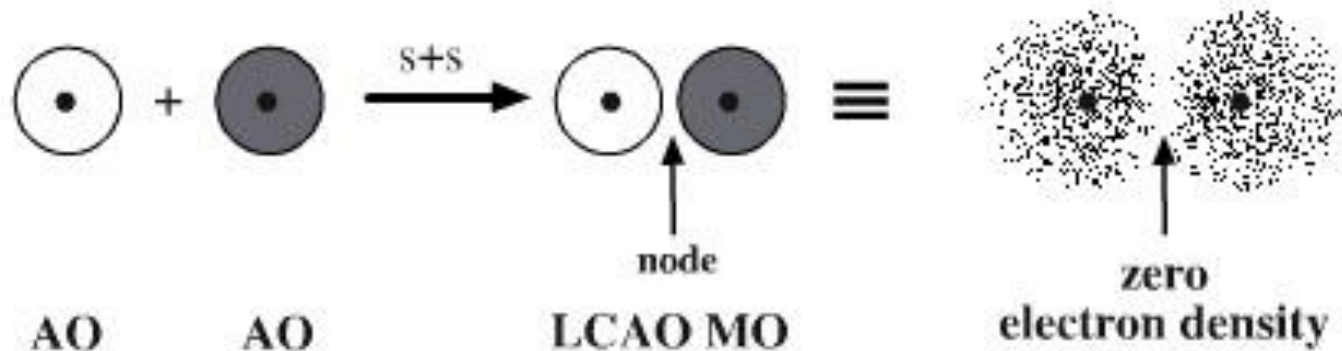
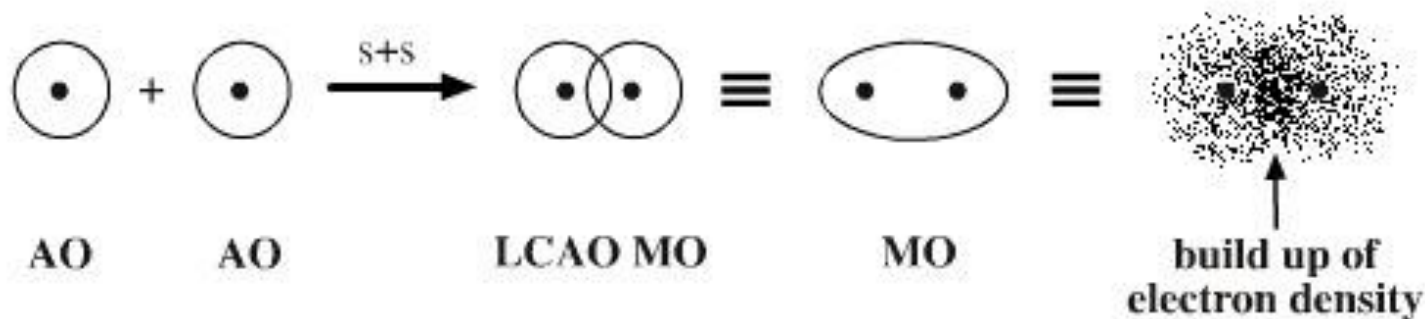
Some hybridization schemes

Coordination number	Arrangement	Composition
2	Linear	sp, pd, sd
	Angular	sd
3	Trigonal planar	sp^2, p^2d
	Trigonal pyramidal	pd^2
4	Tetrahedral	sp^3, sd^3
	Square planar	p^2d^2, sp^2d
5	Trigonal bipyramidal	sp^3d, spd^3
	Tetragonal pyramidal	$sp^2d^2, sd^4, pd^4, p^3d^2$
6	Octahedral	sp^3d^2
	Trigonal prismatic	spd^4, pd^6

Molecular Orbital Theory (MOT)

เป็นการรวม atomic orbital (AO) เป็นแบบ Linear combination of atomic orbital (LCAO)

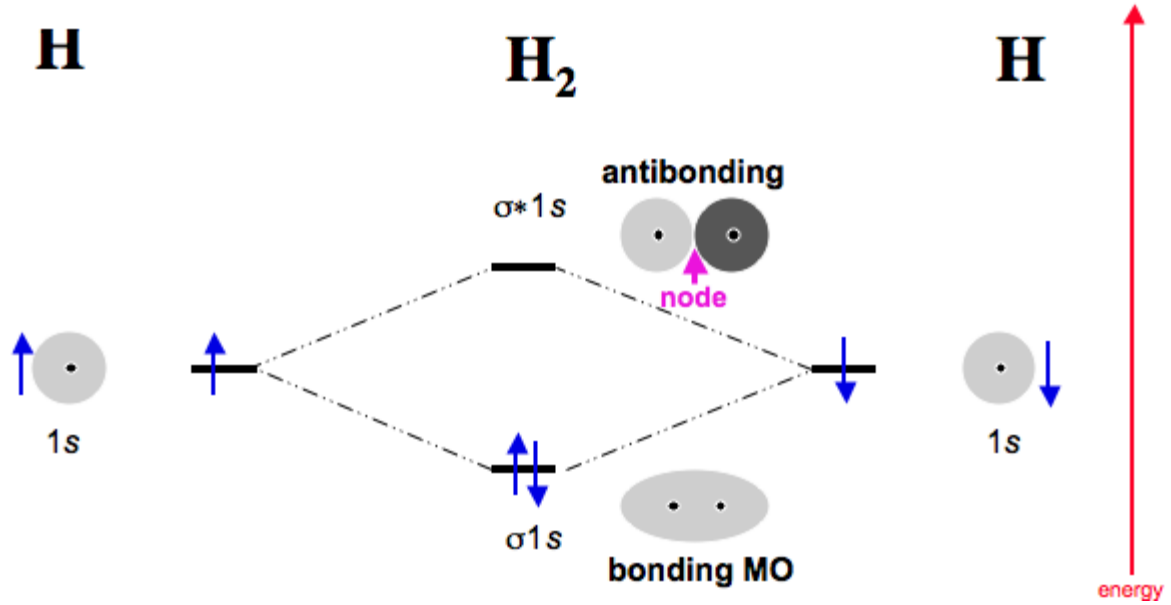
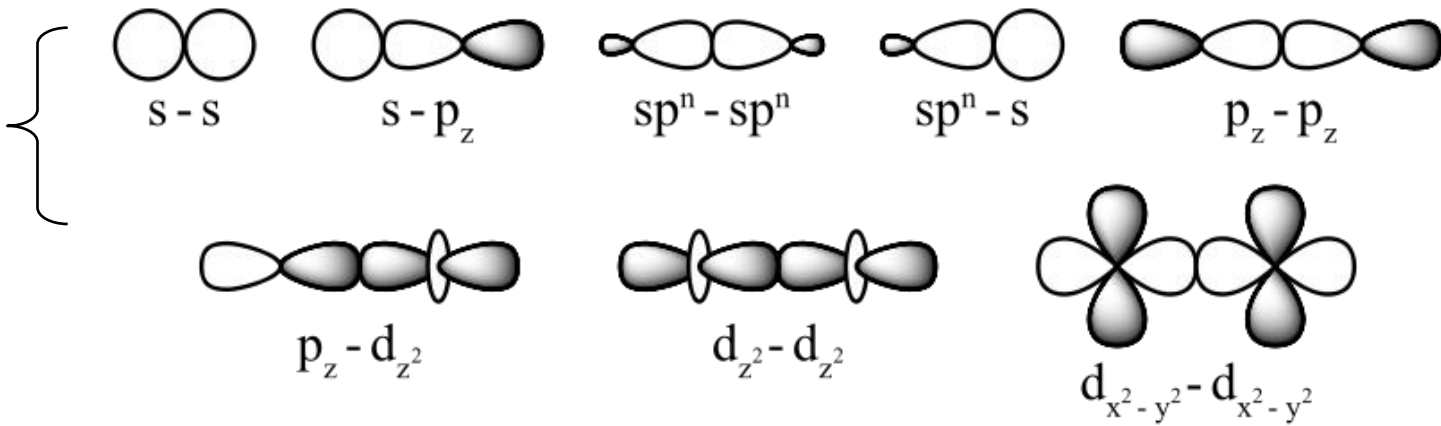
จำนวน molecular orbital (MO) ที่เกิดขึ้น เท่ากับ จำนวน atomic orbital (AO) ทั้งหมดรวมกัน



การรวมของ s orbital

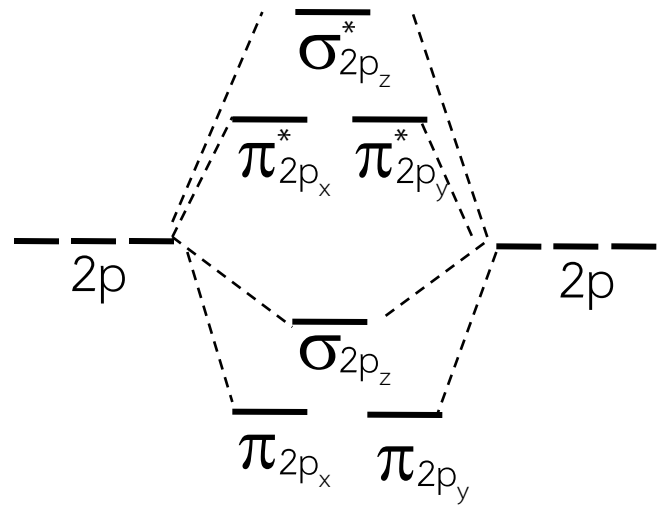
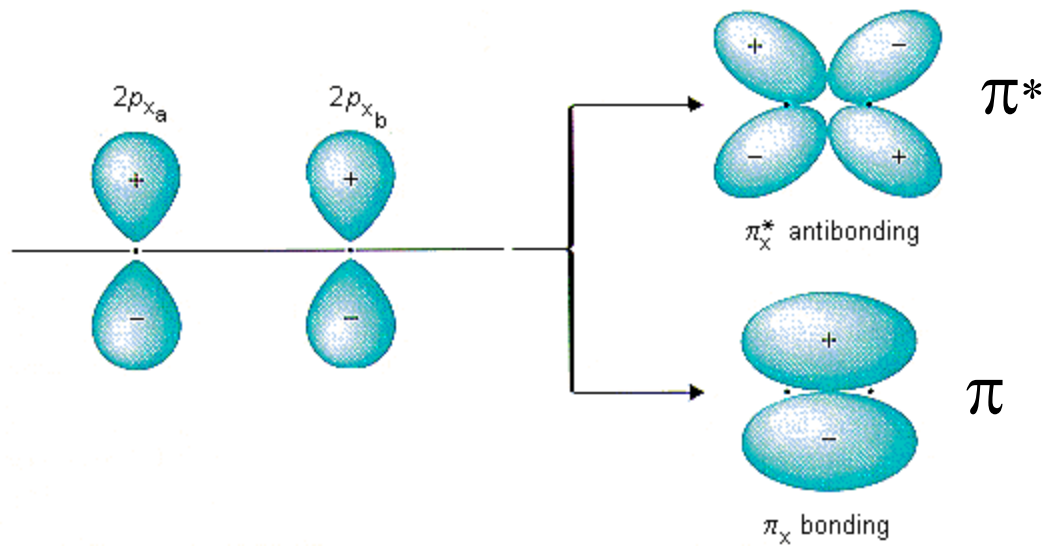
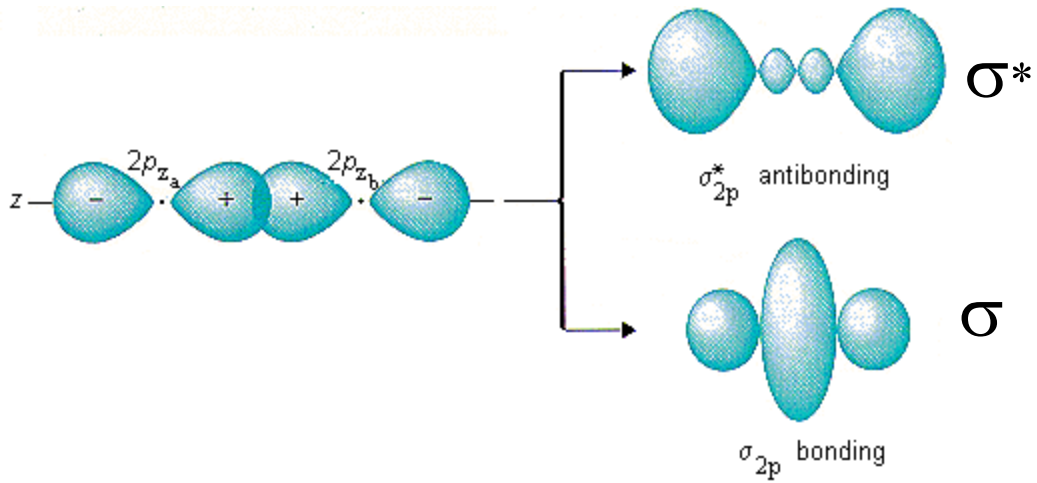
- constructive (σ_s) \longrightarrow bonding
- destructive (σ_s^*) \longrightarrow antibonding

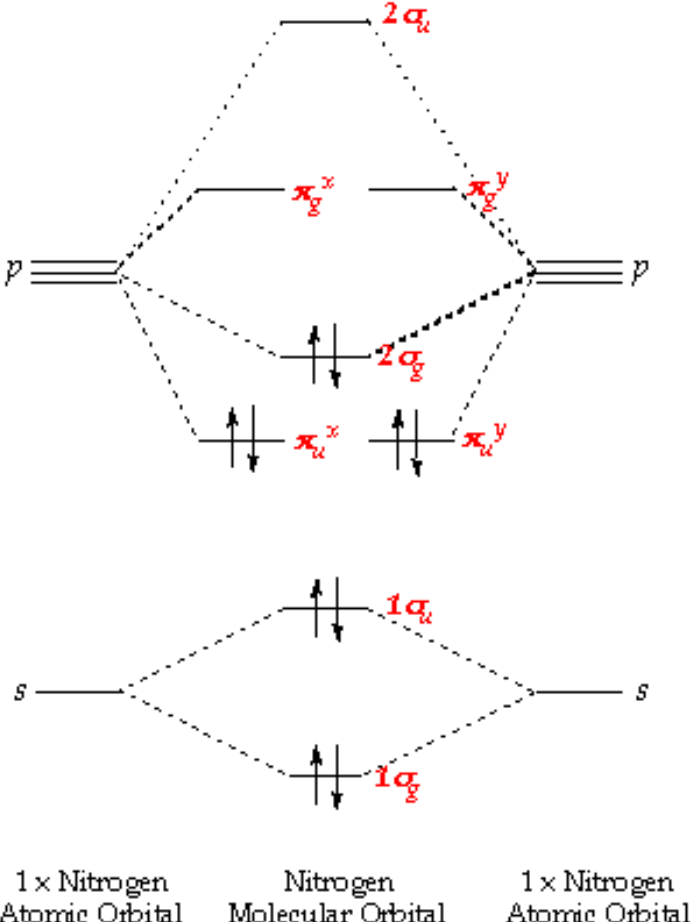
การเกิด σ bond



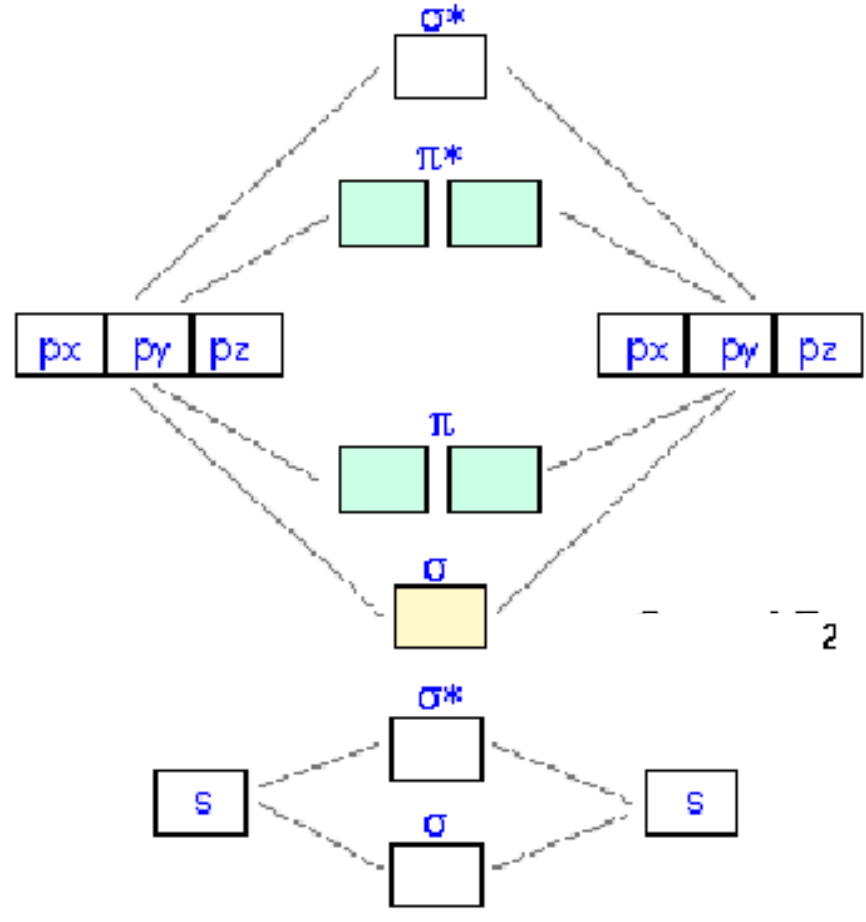
การรวมของ p orbital

การรวมของ 2p_z orbital



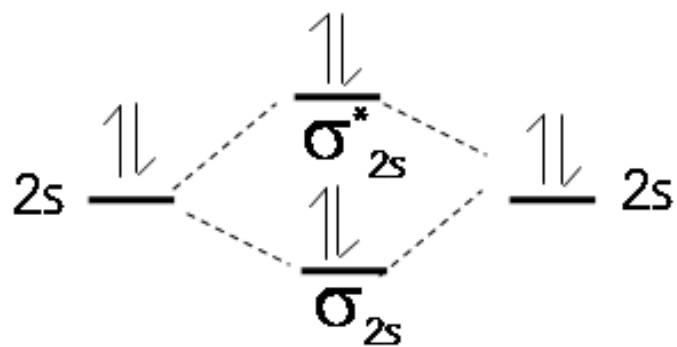
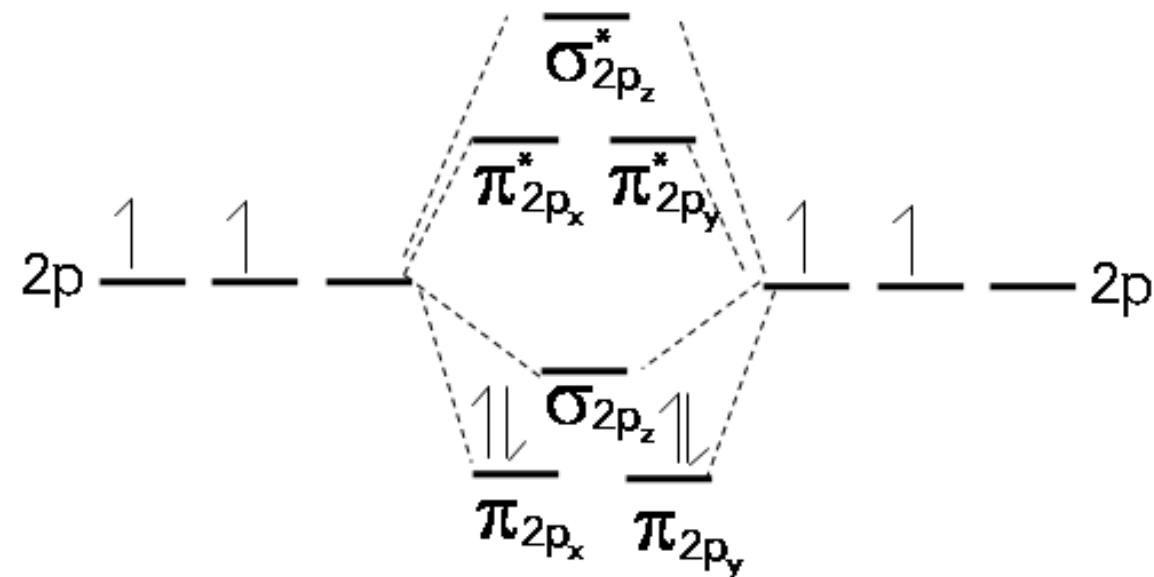
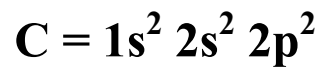
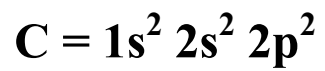


Li₂ to N₂



O₂ and F₂

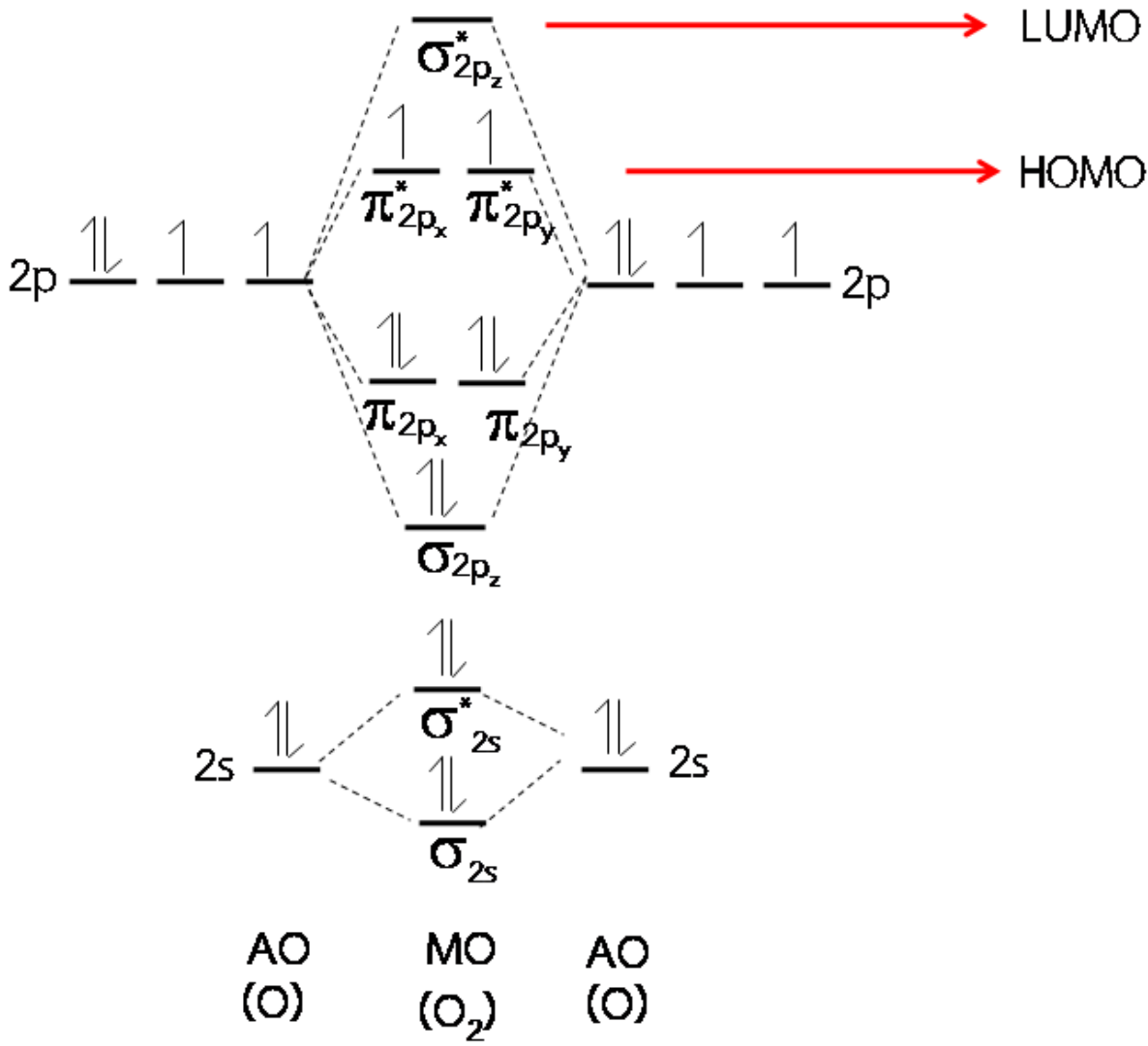
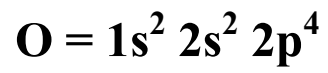
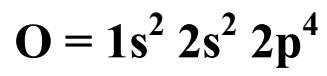
พลังงานของ σ_z สูงกว่า π_x และ π_y ใน molecular orbital ของ N₂ (และโมเลกุลที่เบากว่า) เพราะ 2s และ 2p อยู่ใกล้กันมาก อิเล็กตรอนจึงผลักกันมาก ทำให้ σ_z ถูกผลักให้มีระดับพลังงานสูงกว่า π_x และ π_y แต่ใน O₂ และ F₂ ทั้ง 2s และ 2p อยู่ห่างกันจึงไม่มีผล ทำให้ σ_z ถูกผลักขึ้นไปอยู่เหนือ π_x และ π_y



AO
(C)

MO
(C₂)

AO
(C)



Bond order = $\frac{\text{number of electrons in bonding MO} - \text{number of electrons in antibonding MO}}{2}$

$$\text{Bond order of } C_2 = \frac{6-2}{2} = 2$$

$$\text{Bond order of } O_2 = \frac{8-4}{2} = 2$$

Exercise

1. วาดโครงสร้าง Lewis: O, Al, Na, I, Xe ธาตุตัวใดมีความเสถียรและบอกจำนวน valence electron
2. ระบุโมเลกุลต่อไปนี้เป็น ionic หรือ covalent: a) CO_2 , b) NaCl , c) FeCl_2 , d) CCl_4 , e) Al_2SO_3
3. ระบุว่าโมเลกุลต่อไปนี้เป็น ionic, covalent หรือ polar covalent: H_2 , CH_4 , LiF , H_2O . และเรียงค่า boiling points จากมากไปหาน้อย.
4. สารประกอบ AB_4 โดยที่ธาตุ A เป็นธาตุหมู่ 8 คาบที่ 5 และ ธาตุ B เป็นธาตุหมู่ 7 คาบที่ 2 จงเขียนสูตร โครงสร้างโดยใช้ VSEPR theory โดยระบุจำนวน coordination number ของธาตุ A และจำนวน lone pair electron ของสารประกอบนี้
5. จงวาด Molecular orbital diagram ของ CO และหาจำนวน bond order