

เอกสารประกอบการบรรยาย

วิชา คม331 เคมีอินทรีย์ 1

โครงสร้างอะตอม (Atomic structure)

- ☐ การค้นพบอนุภาคมูลฐาน
- ☐ ทฤษฎีควอนตัม
- ☐ เลขควอนตัมและออร์บิทัลอะตอม
- ☐ การจัดเรียงอิเล็กตรอนของอะตอมที่มีอิเล็กตรอนมากกว่าหนึ่ง
- ☐ การกัมมันต์
- ☐ ตารางธาตุและสมบัติของธาตุตามตารางธาตุ

อาจารย์ ดร. วีรินทร์ดา ทะปะละ

สาขาวิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยแม่โจ้

(<http://www.chemistry.mju.ac.th>)

1. การค้นพบอนุภาคมูลฐาน

อะตอม อนุภาคที่เล็กที่สุดของธาตุที่สามารถทำปฏิกิริยาเคมีได้



อะตอม ประกอบด้วย โปรตอน (proton) นิวตรอน (neutron) และ อิเล็กตรอน (electron)

$\underbrace{\hspace{10em}}$
นิวคลีออน (nucleon)

- จำนวนโปรตอนภายในนิวเคลียส เรียกว่า **เลขอะตอม** (atomic number) : Z
- ผลบวกของจำนวนโปรตอนกับนิวตรอน เรียกว่า **เลขมวล** (mass number): $A = Z + N$
- อะตอมที่เป็นกลาง จำนวนโปรตอนจะเท่ากับจำนวนอิเล็กตรอน

สัญลักษณ์ของอะตอม



โปรตอน = 13

นิวตรอน = $27 - 13 = 14$

อิเล็กตรอน = 13

- อะตอมของธาตุชนิดเดียวกัน แต่มีมวลอะตอมต่างกัน เรียกว่า ไอโซโทป (isotope)
เช่น ไฮโดรเจน มี 3 ไอโซโทป คือ ${}_1^1\text{H}$, ${}_1^2\text{H}$, ${}_1^3\text{H}$

❑ เดโมเครติส (Democritus, 460 BC)

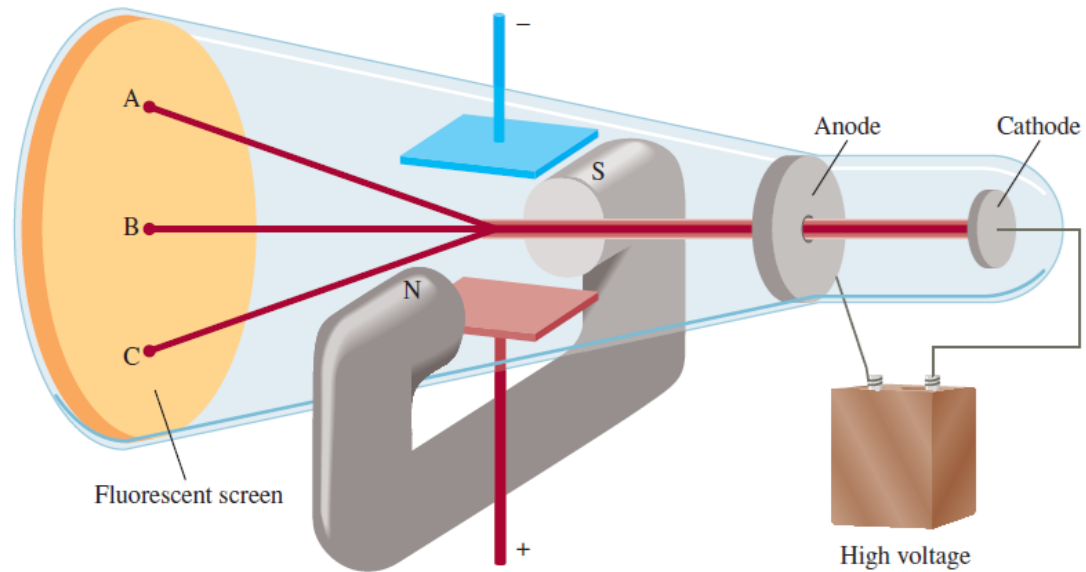
- สสารประกอบขึ้นด้วยอนุภาคขนาดเล็กที่สุดที่แบ่งต่อไปอีกไม่ได้ เรียกว่า อะตอม
(Atomos = uncuttable or indivisible)

❑ จอห์น ดาลตัน (John Dalton, 1808)

- ธาตุ ประกอบด้วยอนุภาคที่มีขนาดเล็กที่สุด เรียกว่า อะตอม
- อะตอมของธาตุหนึ่งๆ จะมีลักษณะเฉพาะตัว มีขนาด มวล และคุณสมบัติทางเคมีที่เหมือนกัน
- สารประกอบ เกิดจากอะตอมของธาตุตั้งแต่ 2 ชนิดรวมกัน โดยมีจำนวนอะตอมของธาตุแต่ละชนิดเป็นจำนวนแน่นอน
- ปฏิกิริยาเคมีเกี่ยวข้องกับการแยก การรวม และการจัดเรียงตัวใหม่ของอะตอม ไม่เกี่ยวข้องกับการสร้างหรือทำลายอะตอม

การค้นพบอิเล็กตรอน (electron)

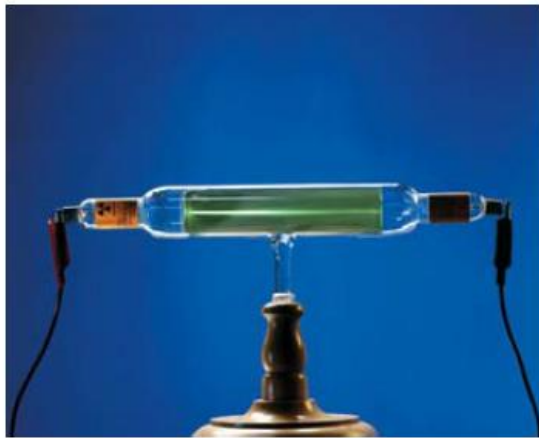
หลอดรังสีแคโทด



- เมื่อให้สนามแม่เหล็ก โดยปิดสนามไฟฟ้า → รังสีแคโทดตกกระทบบจุด A
- เมื่อให้เฉพาะสนามไฟฟ้า → รังสีแคโทดตกกระทบบจุด C
- เมื่อเปิดหรือปิดสนามแม่เหล็กและสนามไฟฟ้าพร้อมกัน → รังสีแคโทดตกกระทบบจุด B

↓
รังสีแคโทดถูกดึงดูดเข้าหาขั้วที่เป็นประจุบวก และผลักกับแผ่นขั้วที่เป็นประจุลบ

↓
ดังนั้นรังสีแคโทดต้องเป็นประจุลบ “อิเล็กตรอน”



หลอดรังสีแคโทดเมื่อจ่ายกระแสไฟฟ้าเข้าไป รังสีที่เกิดขึ้นไม่สามารถมองเห็นได้โดยปกติ แต่ ZnS ที่เคลือบไว้ที่ผิวหลอด จะเกิดการเรืองแสง ทำให้มองเห็นเป็นสีเขียวได้



รังสีแคโทดถูกเหนี่ยวนำให้หักเหลงข้างล่าง เมื่อเอาข้าวแม่เหล็กทางทิศเหนือวางใกล้กับตำแหน่งที่สว่าง



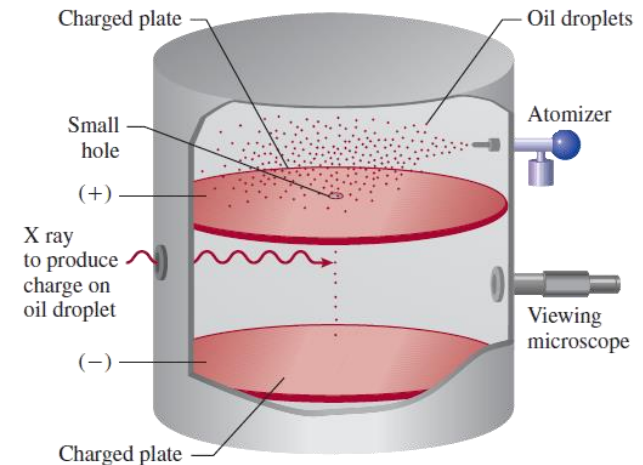
เมื่อกลับข้าวแม่เหล็ก รังสีแคโทดจะมีทิศทางที่ตรงกันข้าม

❑ เจ เจ ทอมสัน (J.J. Thomson, 1897)

- ตั้งสมมติฐานว่ารังสีแคโทดประกอบด้วยอนุภาคที่มีชื่อว่า อิเล็กตรอน
- ทำการทดลองหาอัตราส่วนระหว่างประจุและมวล (e/m) ของอิเล็กตรอนในหลอดรังสีแคโทดในสนามแม่เหล็กไฟฟ้า ซึ่งได้ค่า $e/m = -1.76 \times 10^8 \text{ C/g}$ และค่านี้จะคงที่เสมอ ไม่ว่าจะใช้ขั้วไฟฟ้าเป็นโลหะชนิดใด และบรรจุแก๊สชนิดใด

❑ อาร์ เอ มิลลิแกน (R.A. Milligan, 1909)

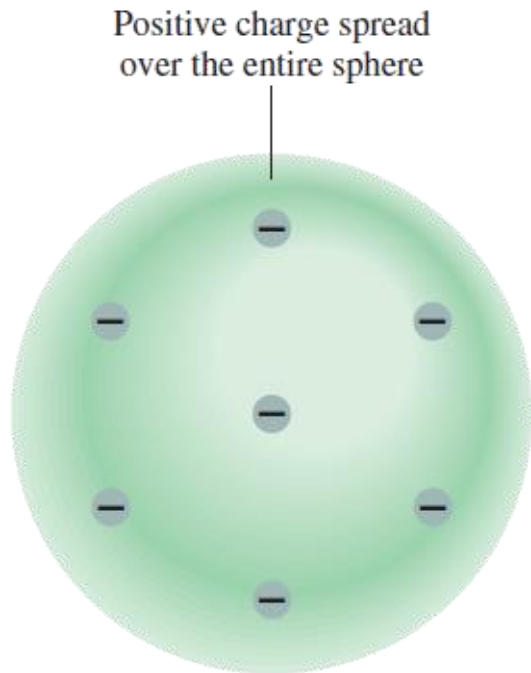
- ประจุของอิเล็กตรอน มีค่าเท่ากับ $-1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$
- คำนวณมวลของอิเล็กตรอน $= 9.1 \times 10^{-28} \text{ g}$
ซึ่งเบากว่าอะตอมที่เบาที่สุดคือไฮโดรเจนประมาณ $1/1836$ เท่า (มวลไฮโดรเจน $= 1.67 \times 10^{-24} \text{ g}$)



อะตอมไม่ใช่สิ่งที่เล็กที่สุด แต่ประกอบด้วยอิเล็กตรอน (และอนุภาคอื่น)

การค้นพบโปรตอน

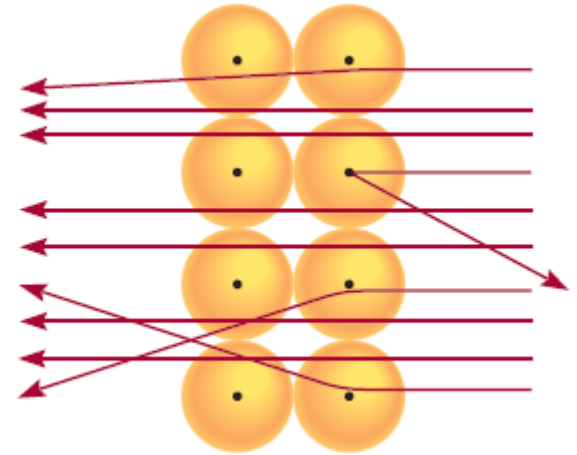
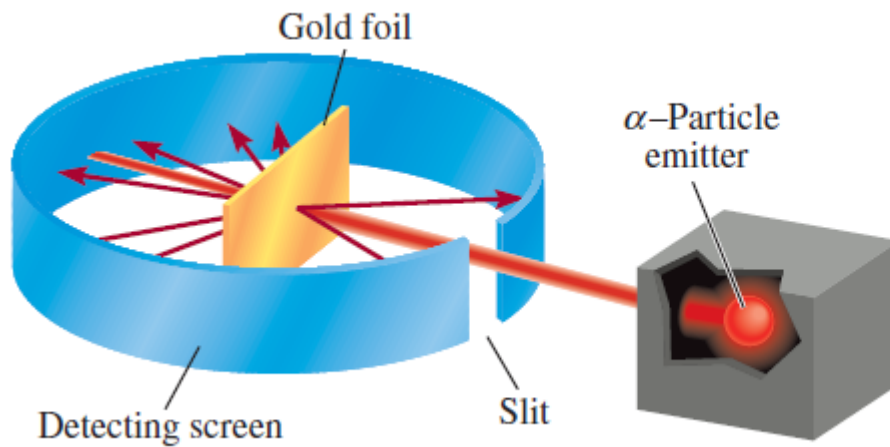
อะตอมประกอบด้วยอิเล็กตรอน และอะตอมมีค่าประจุเป็นกลางทางไฟฟ้า
ดังนั้น จะต้องมียจำนวนประจุบวก = จำนวนประจุลบ



แบบจำลองอะตอมของทอมสัน
หรือ พลัม-พุดดิ้ง (plum-pudding)

- อะตอมเป็นทรงกลมที่มีประจุบวก
- มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ภายใน

❑ เอิร์นสท์ รัทเทอร์ฟอร์ด (Ernest Rutherford, 1910)

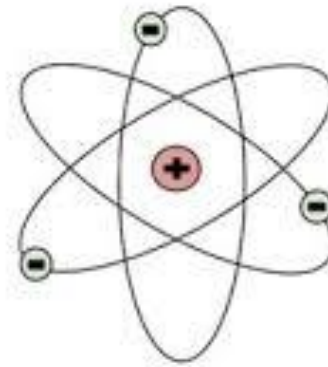
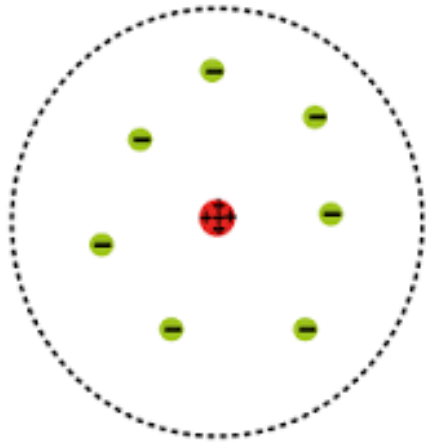


- ใช้แผ่นทองคำบางๆ และโลหะอื่นๆ มาเป็นเป้าให้กับอนุภาคอัลฟา (มีประจุบวก) ที่มาจากแหล่งกำเนิดรังสี
- อนุภาคส่วนใหญ่ทะลุผ่านแผ่นโลหะได้โดยไม่มีการเบี่ยงเบน หรือมีการเบี่ยงเบนเพียงเล็กน้อยเท่านั้น มีส่วนน้อยที่จะกระเจิงหรือเบี่ยงเบนด้วยมุมที่กว้าง และพบน้อยมากที่จะสะท้อนกลับ

ตามแบบจำลองของทอมสัน $\Rightarrow$ รังสีทั้งหมดควรจะเบี่ยงเบนเล็กน้อยเท่านั้น

แบบจำลองอะตอมของรัทเทอร์ฟอร์ด

อะตอมส่วนใหญ่จะมีพื้นที่ว่างอยู่ โดยอนุภาคประจุบวกของอะตอมรวมตัวกันอยู่เป็นกลุ่มเล็กๆ ตรงกลาง เรียกว่า นิวเคลียส



Rutherford Model of the Atom



- อะตอมประกอบด้วยนิวเคลียส ซึ่งเป็นอนุภาคประจุบวกอยู่ตรงกลาง และมีอิเล็กตรอนเคลื่อนที่เป็นวงล้อมรอบ
- จำนวนอิเล็กตรอนเท่ากับจำนวนประจุบวกในนิวเคลียส
- อนุภาคประจุบวก เรียกว่า โปรตอน มีมวล 1.67×10^{-24} g (~ 1840 เท่าของมวลอิเล็กตรอน)
มวลของนิวเคลียสเกือบเท่ากับมวลของอะตอม

การค้นพบนิวตรอน

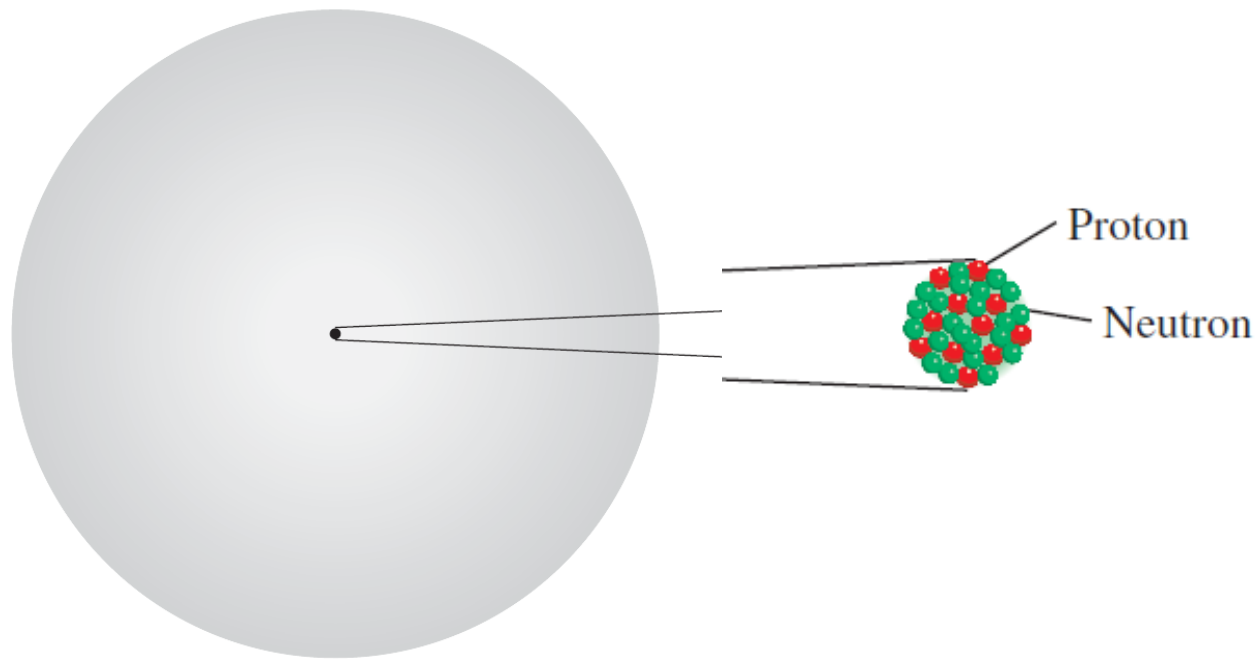
H มี 1 โปรตอน และ He มี 2 โปรตอน ดังนั้น มวล He : H ควรมีค่าเท่ากับ 2 : 1
แต่ในความเป็นจริง มวล He : H เท่ากับ 4 : 1



น่าจะมีอนุภาคชนิดอื่นอยู่ภายในนิวเคลียสอีก นอกเหนือจาก โปรตอน

□ เจมส์ แชดวิก (James Chadwick, 1932)

- ยิงแผ่นแบริลเลียมบางๆ ด้วยอนุภาคอัลฟา แล้วได้อนุภาคพลังงานสูง และไม่มีประจุไฟฟ้าออกมาจากโลหะ
- อนุภาคชนิดใหม่นี้มีมวลประมาณ 1 amu ซึ่งใกล้เคียงกับมวลของโปรตอน เรียกว่า นิวตรอน



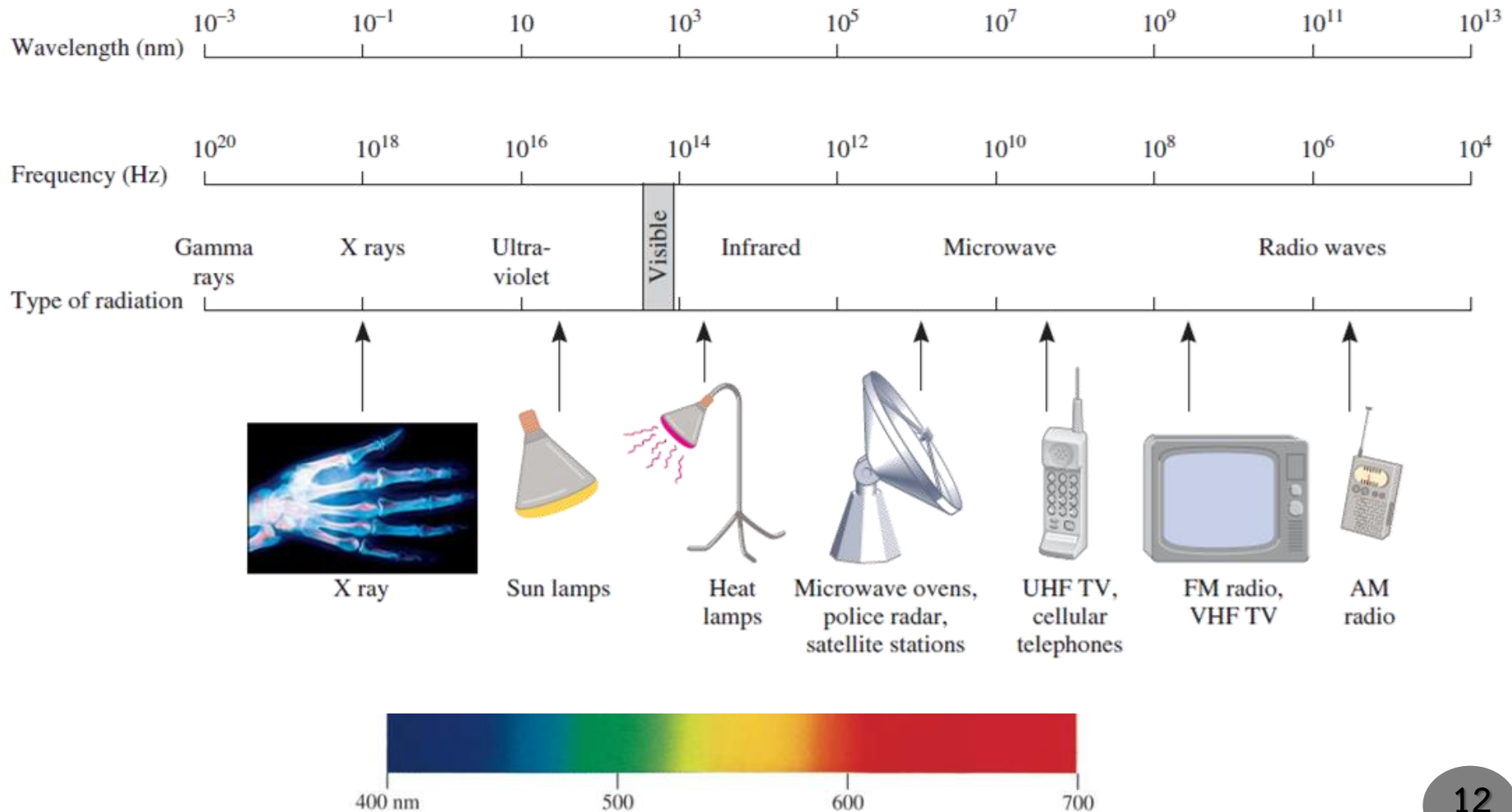
มวลและประจุของอิเล็กตรอน โปรตรอน และนิวตรอน

อนุภาค	สัญลักษณ์	ประจุ		มวล	
		ค่าประจุ	คูลอมบ์	g	amu
อิเล็กตรอน	e^-	-1	1.6×10^{-19}	9.1094×10^{-28}	0.000549
โปรตรอน	p	+1	1.6×10^{-19}	1.67262×10^{-24}	1.007277
นิวตรอน	n	0	0	1.67493×10^{-24}	1.008665

$$1 \text{ amu} = 1.6605 \times 10^{-24} \text{ g}$$

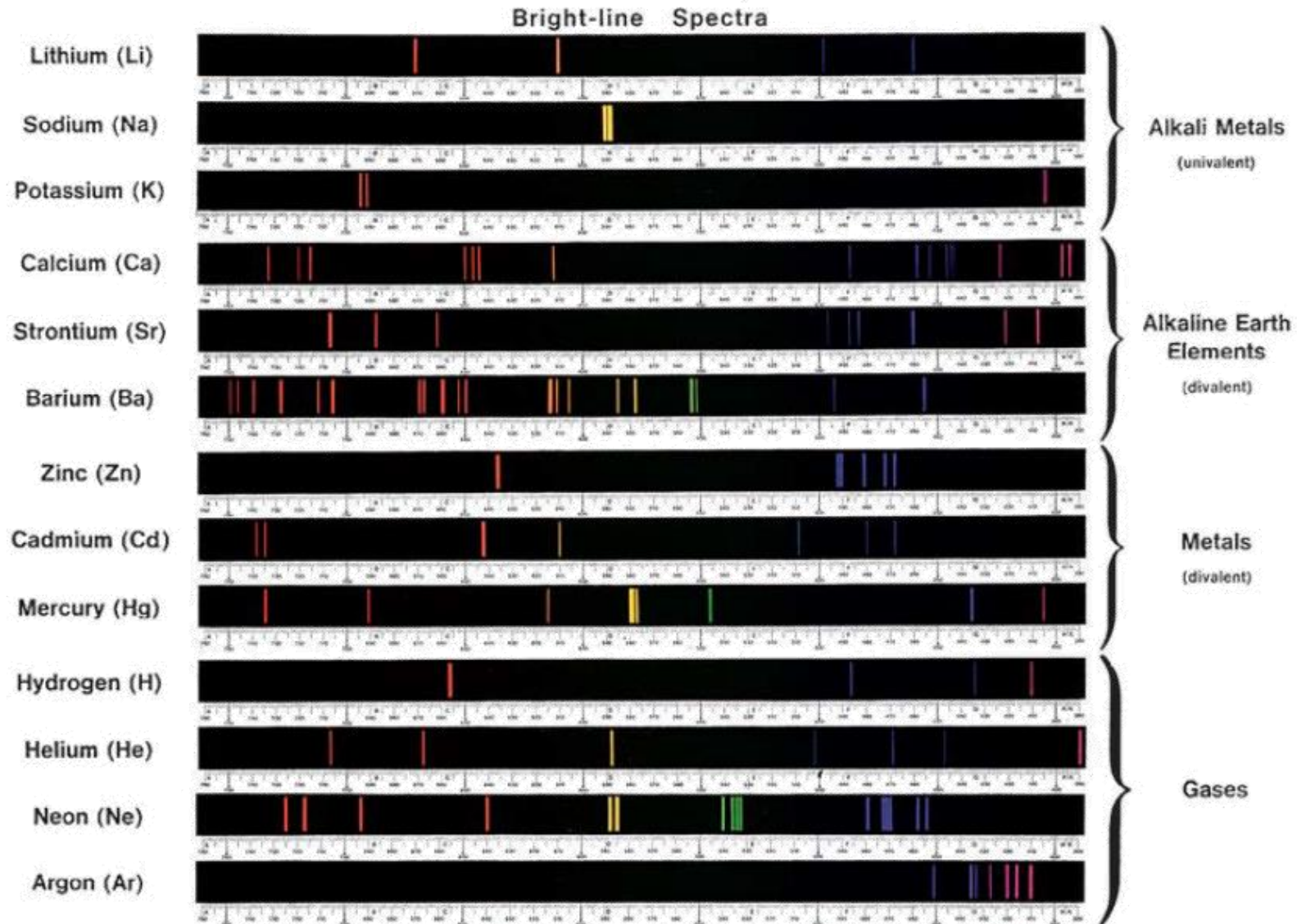
2. ทฤษฎีควอนตัม

“Electromagnetic radiation”



แม็ก แพลงค์ (Max Planck, 1900)

ศึกษาข้อมูลการแผ่รังสีของของแข็งเมื่อได้รับความร้อน พบว่าอะตอมหรือโมเลกุลจะปล่อยพลังงานออกมาทีละจำนวน ซึ่งเป็นปริมาณที่ไม่ต่อเนื่อง เรียกว่า ควอนตัม (quantum)



ขนาดของควอนตัมจะขึ้นกับความถี่ของรังสีแม่เหล็กไฟฟ้า แสดงความสัมพันธ์ได้ดังสมการ

พลังงาน (E) ของ 1 ควอนตัม; $E = h\nu$

โดย E = quantum energy of photon (หน่วย J)

h = Plank's constant = 6.63×10^{-34} J s

ν = frequency of radiation บางครั้งเขียนในรูปของ f (หน่วย s^{-1} หรือ Hz)

เนื่องจาก $\nu = \frac{c}{\lambda}$ เมื่อ c = ความเร็วของแสง = 3×10^8 m/s
 λ = ความยาวคลื่น

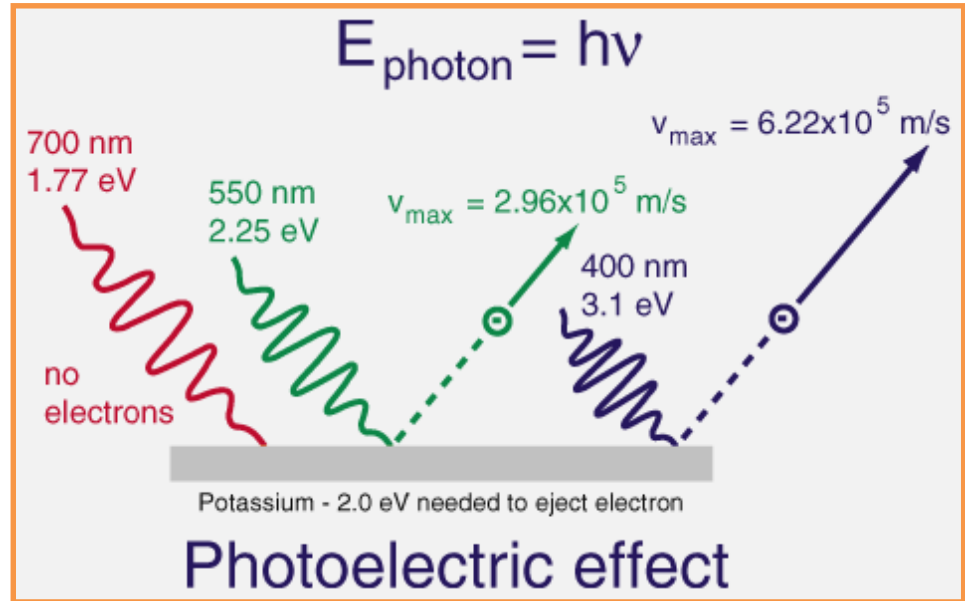
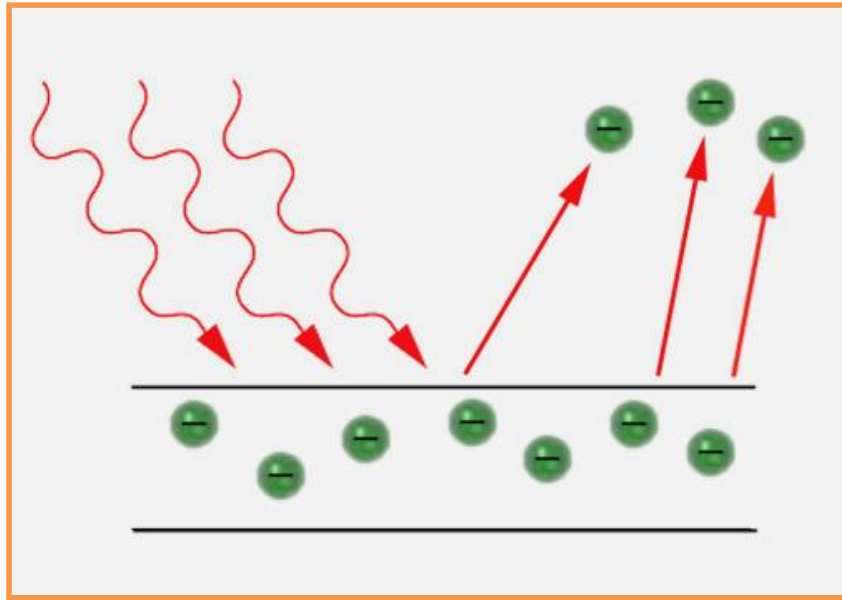
ดังนั้น $E = h\nu = h \frac{c}{\lambda}$

ตัวอย่าง 1 จงหาพลังงาน (J) และความถี่ (Hz) ของแสงสีเขียวซึ่งมีความยาวคลื่น 520 nm

ตัวอย่าง 2 จงหาพลังงาน (J) และความยาวคลื่น (nm) ของคลื่นไมโครเวฟที่มีความถี่ 2.4×10^{12} Hz

อัลเบิร์ต ไอน์สไตน์ (Albert Einstein, 1905)

ศึกษาปรากฏการณ์โฟโตอิเล็กทริก (photoelectric effect) ซึ่งเป็นปรากฏการณ์ที่แสงที่มีความถี่ที่เหมาะสมตกกระทบผิวหน้าของโลหะ และทำให้อิเล็กตรอนหลุดออกมา เรียกอิเล็กตรอนนั้นว่า โฟโตอิเล็กตรอน (photoelectron)



- แสงควรมีสสมบัติเป็นอนุภาคด้วยและเคลื่อนที่ในอากาศประกอบด้วยหน่วยเล็กๆ เป็นควอนตัมแสงที่เรียกว่า โฟตอน (photon) และใช้ทฤษฎีของ Max Planck กำหนดค่าพลังงานของโฟตอน โดยอนุภาคแสง 1 โฟตอนที่มีความถี่(ν) จะมีพลังงาน (E) = $h\nu$ คิดเป็น 1 ควอนตัม (ค่าพลังงานของโฟตอนจะเป็นค่าเฉพาะสำหรับแสง ที่มีความถี่หนึ่งๆ เท่านั้น)

Photoelectric effect

- Photoelectron จะเกิดขึ้นได้ เมื่อแสงที่ตกกระทบ มีความถี่มากกว่าหรือเท่ากับ ความถี่ขีดเริ่ม (threshold-frequency) หรือโฟตอนต้องมีพลังงานอย่างน้อย $\mathcal{E}$ เพื่อให้ e^- แยกตัวออกจากโลหะ
- ถ้าแสงที่ตกกระทบมีความถี่มากกว่าความถี่ขีดเริ่ม Photoelectron ที่หลุดออกมาจะมีพลังงานจลน์ค่าหนึ่ง แต่ถ้าหากความถี่ของแสงที่ตกกระทบมีค่าเท่ากับความถี่ขีดเริ่ม Photoelectron จะหลุดออกมาแล้วหยุดนิ่ง ไม่มีการเคลื่อนที่ทำให้มีพลังงานจลน์เป็นศูนย์
- ถ้าความเข้มของแสงที่ตกกระทบ เพิ่มขึ้น จำนวน Photoelectron ก็เพิ่มขึ้นด้วย

Photon energy

- เมื่อโฟตอนกระทบผิวโลหะจะถ่ายพลังงานให้กับอิเล็กตรอนของโลหะ พลังงานส่วนหนึ่งทำให้อิเล็กตรอนแยกจากโลหะ และส่วนที่เหลือทำให้อิเล็กตรอนพุ่งหลุดออกจากผิวโลหะเป็นพลังงานจลน์ของอิเล็กตรอนแสดงได้ดังนี้

พลังงานโฟตอน = พลังงานที่ทำให้ e^- แยกตัวออกจากโลหะ + พลังงานจลน์ของ e^-

$$h\nu = W + KE$$

เมื่อ $W = h\nu_0$ (W = work function)

$$\text{ดังนั้น } KE = h\nu - h\nu_0 = h\nu - W$$

h = Planck's constant 6.626×10^{-34} J.s

ν = frequency of photon, Hz, s^{-1}

ν_0 = ความถี่ขีดเริ่มที่ทำให้ e^- หลุดออกจากโลหะ, Hz

KE = Kinetic energy of $e^- = \frac{1}{2} mv^2$

ตัวอย่าง 3 ฟังก์ชันงาน (W) ของพื้นผิวโลหะซีเซียม (Ce) มีค่า $3.42 \times 10^{-19} \text{ J}$ จงหา

ก. ความถี่ขีดเริ่มที่ทำให้ e^- หลุดออกจากโลหะซีเซียมนี้

ข. พลังงานจลน์ของ e^- เมื่อใช้แสงที่มีความถี่ $1 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$

จาก

$$KE = h\nu - W$$

ก. ความถี่ขีดเริ่มที่ทำให้ e^- หลุดออกจากโลหะซีเซียมนี้ $\rightarrow KE = 0$

$$\therefore h\nu = W$$

$$\nu = \frac{3.42 \times 10^{-19} \text{ J}}{6.626 \times 10^{-34} \text{ J.s}}$$

$$\nu = 5.16 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$$

ข. พลังงานจลน์ของ e^- เมื่อใช้แสงที่มีความถี่ $1 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$

จาก

$$KE = h\nu - W$$

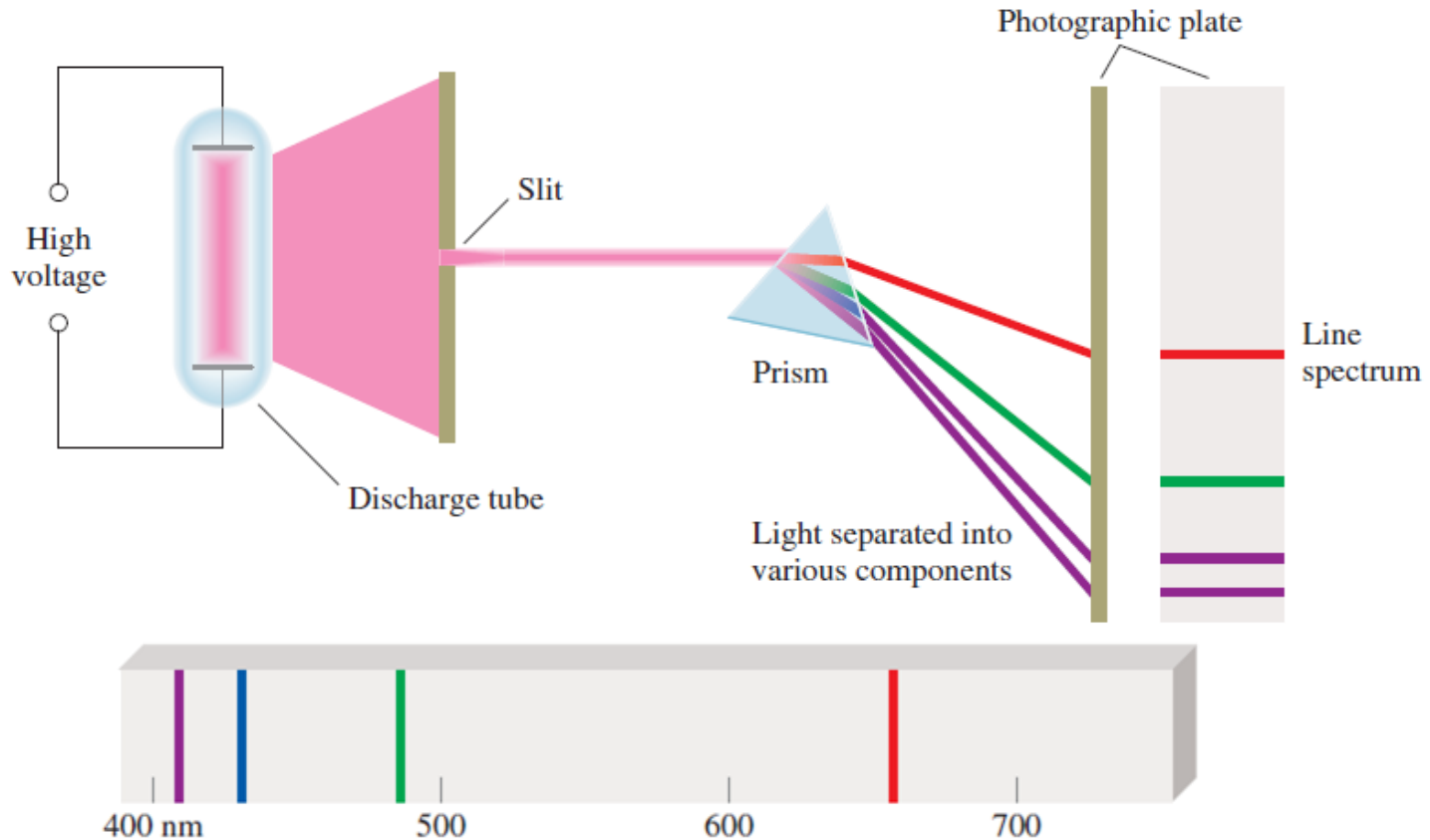
$$KE = (6.626 \times 10^{-34} \text{ J.s} \times 1 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}) - 3.42 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$= 3.21 \times 10^{-19} \text{ J}$$

ตัวอย่าง 4 เมื่อฉายแสงที่มีความถี่ $2.5 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$ ลงบนพื้นผิวโลหะไทเทเนียม (Ti) ที่มีฟังก์ชันงาน (W) ของพื้นผิวโลหะ $6.93 \times 10^{-19} \text{ J}$ จงคำนวณพลังงานจลน์ของ e^- ($9.64 \times 10^{-19} \text{ J}$)

นิลส์ บอห์ร (Niels Bohr, 1913)

ศึกษาสเปกตรัมการเปล่งแสง (emission spectrum) ของอะตอมไฮโดรเจน



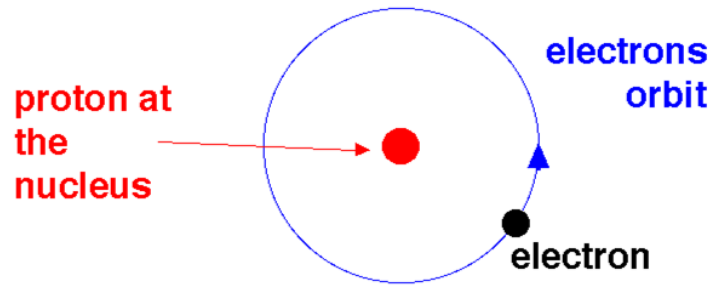
สเปกตรัมการเปล่งแสงของอะตอมในสถานะแก๊ส ไม่มีลักษณะสเปกตรัมที่ต่อเนื่อง แต่
อะตอมจะให้เส้นสเปกตรัมสว่างในบางตำแหน่งของสเปกตรัมย่านตามองเห็น



สเปกตรัมแบบเส้น (line spectra) คือ แสงที่ปล่อยออกมาที่ความยาวคลื่นเฉพาะค่าหนึ่ง

สมมติฐานของบอร์

“ อิเล็กตรอนในอะตอมไฮโดรเจนอยู่ได้ในวงโคจรเฉพาะที่มีพลังงานจำเพาะ ”



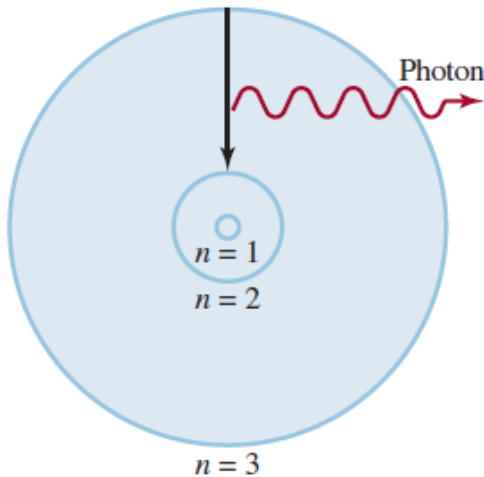
พลังงานของอิเล็กตรอนในอะตอมไฮโดรเจน

$$E_n = -R_H \left(\frac{1}{n^2} \right)$$

โดย R_H = Rydberg constant = 2.18×10^{-18} J

n = principle quantum number = 1, 2, 3, ...

$$1 \text{ J} = 6.242 \times 10^{34} \text{ eV}$$

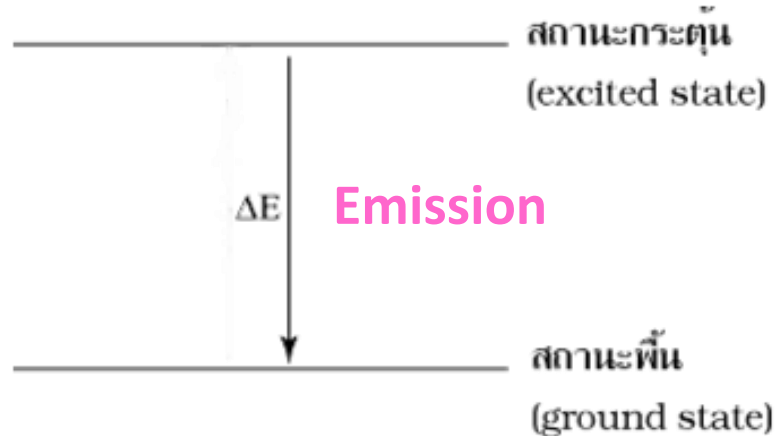
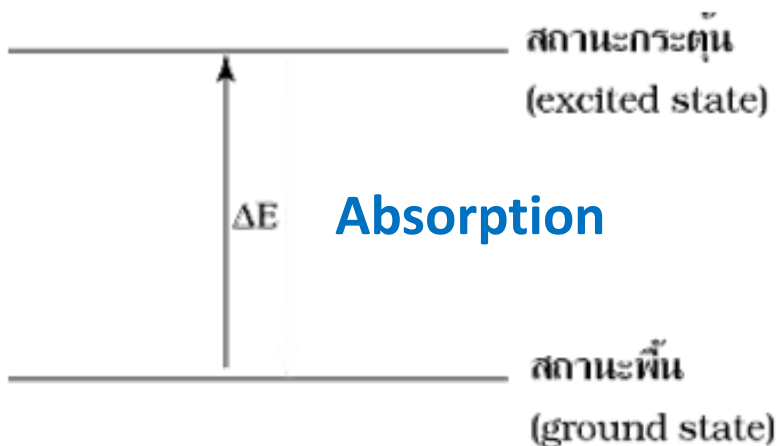


การปล่อยรังสีในอะตอมไฮโดรเจน เกิดจากอิเล็กตรอนตกลงจากวงโคจรระดับพลังงานสูงสู่วงโคจรระดับพลังงานต่ำ และปล่อยควอนตัมของพลังงาน (โฟตอน) ในรูปแบบแสง

เครื่องหมายลบ $\Rightarrow$ พลังงานของอิเล็กตรอนในอะตอมมีค่าต่ำกว่าพลังงานของอิเล็กตรอนอิสระ

ข้อสรุปของบอร์

- อิเล็กตรอนเคลื่อนที่เป็นวงโคจร (orbit) อยู่รอบนิวเคลียส ด้วยรัศมีคงที่มีพลังงานแน่นอนในแต่ละวงโคจร และอิเล็กตรอนมีโมเมนตัมเชิงมุมที่มีค่าเฉพาะตัว
- เมื่อได้รับพลังงานเพิ่มขึ้น จะทำให้อิเล็กตรอนเคลื่อนที่ไปอยู่ในวงโคจรที่สูงขึ้น ดังนั้น ถ้าอิเล็กตรอนจะกลับเข้าสู่วงโคจรเดิม ต้องแผ่รังสีออกมาเรียกว่า photon แสดงเป็นเส้น spectrum ซึ่งเป็นลักษณะเฉพาะตัวของแต่ละธาตุ
- สถานะพื้น (ground state) คือ สภาวะของอะตอมที่อิเล็กตรอนอยู่ในระดับพลังงานต่ำสุด (มีเสถียรภาพมากที่สุด) และสถานะกระตุ้น (excited state) คือ สภาวะของอะตอมที่อิเล็กตรอนอยู่ในระดับพลังงานที่สูงกว่าสถานะพื้นเมื่อได้รับพลังงาน ไม่เสถียรจึงต้องคายพลังงานออกมา เพื่อจะกลับมาสู่สภาวะพื้น



กระบวนการเปล่งแสงในอะตอมไฮโดรเจน

พิจารณาผลต่างระหว่างพลังงานของสถานะเริ่มต้นและสถานะสุดท้าย $\Delta E = E_f - E_i$

โดย $E_f = -R_H \left(\frac{1}{n_f^2} \right)$ n_f คือ เลขควอนตัมหลักของชั้นพลังงานสุดท้าย (finished)

และ $E_i = -R_H \left(\frac{1}{n_i^2} \right)$ n_i คือ เลขควอนตัมหลักของชั้นพลังงานเริ่มต้น (initial)

ดังนั้น

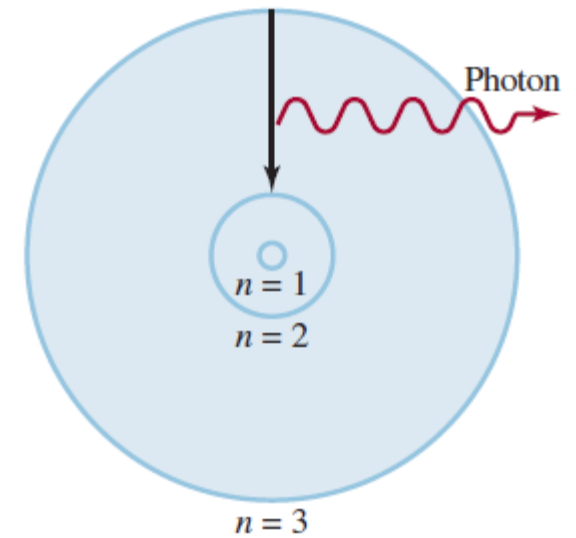
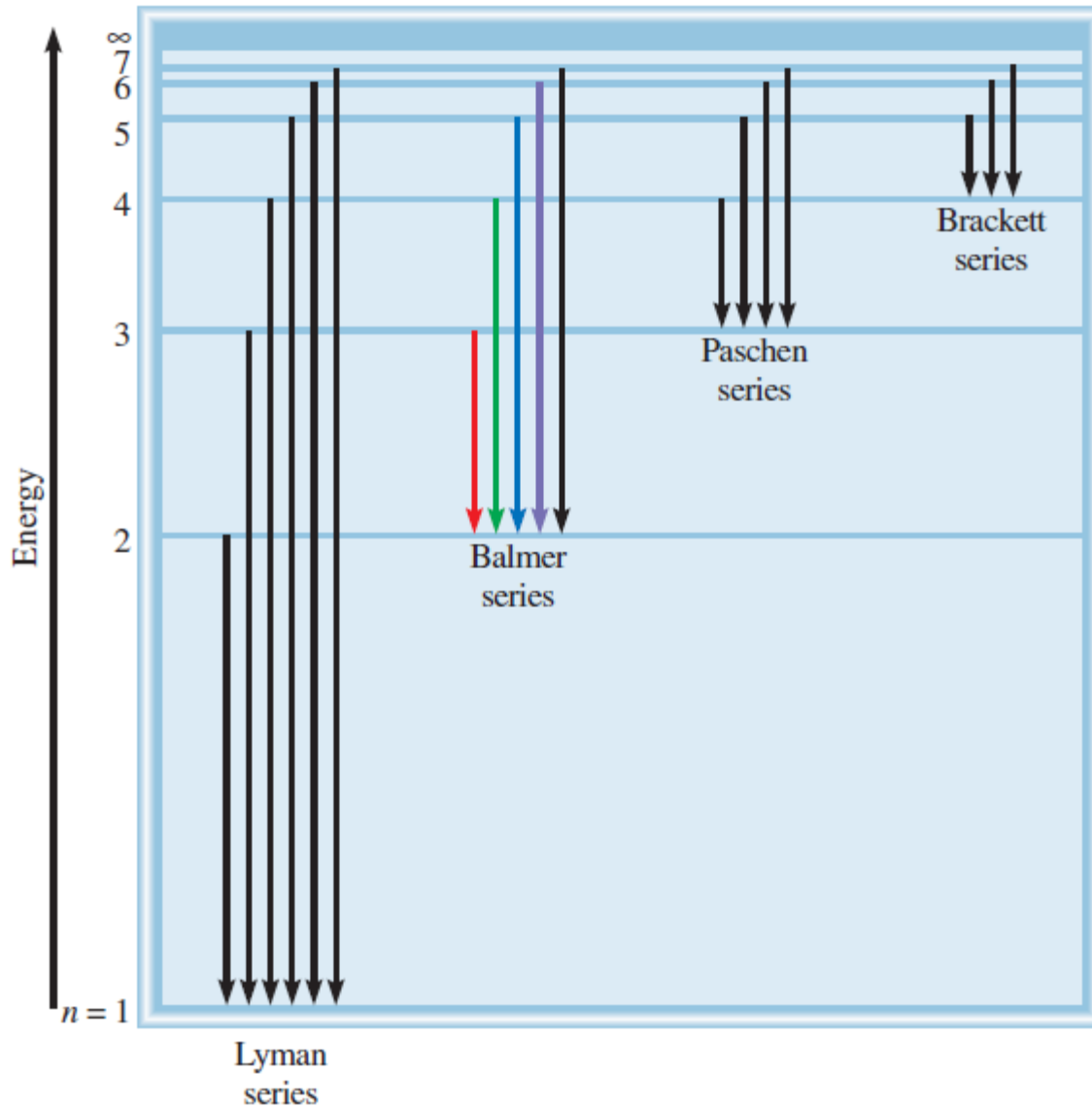
$$\Delta E = \left(\frac{-R_H}{n_f^2} \right) - \left(\frac{-R_H}{n_i^2} \right)$$
$$= R_H \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right)$$

เพราะการทรานซิชันทำให้เกิดการปล่อยโฟตอนความถี่ ν และ พลังงาน $h\nu$

$$\Delta E = h\nu = R_H \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right)$$

$n_i > n_f$ โฟตอนถูกปล่อย $\Rightarrow \Delta E (-)$ เสียพลังงานสู่สิ่งแวดล้อม
 $n_i < n_f \Rightarrow \Delta E (+)$ ระบบดูดกลืนพลังงาน

ระดับพลังงานของอะตอมไฮโดรเจน และอนุกรมการเปล่งแสงแต่ละระดับพลังงาน



อนุกรมในสเปกตรัมการเปล่งแสงของอะตอมไฮโดรเจน

อนุกรม	n_f	n_i	ย่านสเปกตรัม
ไลมาน (Lyman)	1	2, 3, 4, ...	อัลตราไวโอเล็ต
บาลเมอร์ (Balmer)	2	3, 4, 5, ...	ตามองเห็น และอัลตราไวโอเล็ต
พาสเชน (Paschen)	3	4, 5, 6, ...	อินฟราเรด
แบรคเกต (Brackett)	4	5, 6, 7, ...	อินฟราเรด

ตัวอย่าง 5 จงคำนวณความยาวคลื่น (nm) ของโฟตอน เมื่ออิเล็กตรอนทรานซิชั่นจากชั้นระดับพลังงานที่ 5 ($n_i = 5$) สู่ชั้นระดับพลังงานที่ 2 ($n_f = 2$) ในอะตอมไฮโดรเจน

ทวิภาพของอิเล็กตรอน (Dual nature of electron)

ไอน์สไตน์

- แสงมีสมบัติเป็นคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าและเป็นอนุภาค
- อนุภาคของแสง เรียกว่า โฟตอน (Photon)
- พลังงานของโฟตอนสัมพันธ์กับความยาวคลื่นของคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้า ($E = h\nu$)
- พลังงานของโฟตอนสัมพันธ์กับมวล (m) ของอนุภาคโฟตอนและความเร็วแสง ($E = mc^2$)
- ค่าโมเมนตัมของโฟตอน ($p = mc$)

$$\text{ดังนั้น } (E = pc)$$

หลุยส์ เดอ เบรย (Louis de Broglie, 1924)

อิเล็กตรอนมีคุณสมบัติเป็นได้ทั้งคลื่นและอนุภาค ในกรณีของไฮโดรเจนอะตอม อิเล็กตรอนจะเคลื่อนที่เป็นวงโคจรรอบนิวเคลียส และมีพลังงานคงที่ โดยอิเล็กตรอนสามารถเป็นได้ทั้งอนุภาคและคลื่นเช่นกัน เรียกปรากฏการณ์นี้ว่า ทวิภาพของคลื่นและอนุภาค (wave-particle duality)

■ เดอ เบรย หาความยาวคลื่นของสารต่างๆ โดยใช้ทฤษฎีของไอน์สไตน์

$$h\nu = mc^2 = pc$$

$$\nu = pc / h \quad (\nu = c / \lambda)$$

และ $\lambda = c / \nu$

ดังนั้น $\lambda = h / p = h / mv$

เมื่อ v คือ ความเร็วของอนุภาค หน่วย $m s^{-1}$

m คือ มวลของอนุภาค หน่วย kg

λ คือ ความยาวคลื่น หน่วย m

h คือ ค่าคงที่ของพลังค์ $= 6.6262 \times 10^{-34} J s$

■ การเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนรอบนิวเคลียสมีลักษณะเป็นคลื่นนิ่ง (standing wave)

$$2\pi r = n\lambda = nh / mv$$

เมื่อ n คือ เลขจำนวนเต็มของคลื่นนิ่ง = เลขควอนตัมของชั้นวงโคจร

r คือ รัศมีวงโคจร

λ คือ ความยาวคลื่นของอิเล็กตรอน

โมเมนตัมเชิงมุม (angular momentum) ของอิเล็กตรอนที่มีสมบัติเป็นคลื่น $= \omega$

$$\omega = mvr = nh / 2\pi$$

หลักความไม่แน่นอนของไฮเซนเบิร์ก (Heisenberg uncertainty principle)

- การที่อนุภาคแสดงสมบัติเป็นทั้งอนุภาคและคลื่น ดังนั้นจึงไม่สามารถที่จะบอกตำแหน่งที่แน่นอน และโมเมนตัมที่ถูกต้องได้พร้อมกัน
- เขียนความสัมพันธ์ทางสมการคณิตศาสตร์ได้ดังนี้

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{h}{4\pi}$$

เมื่อ Δx คือ ความไม่แน่นอนของการวัดตำแหน่ง

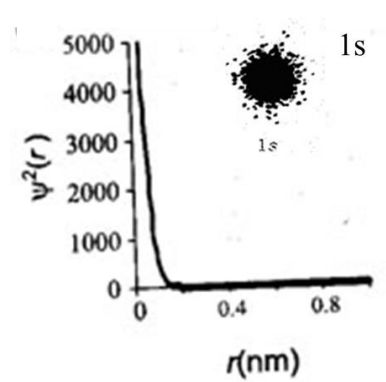
Δp คือ ความไม่แน่นอนของการวัดโมเมนตัม

- เนื่องจากอิเล็กตรอนมีขนาดเล็ก การหารตำแหน่งต้องใช้แสงที่มีความยาวคลื่นสั้นมากๆ ที่มีขนาดใกล้เคียงหรือเท่ากับอิเล็กตรอน ทำนองเดียวกันถ้าต้องการวัดความเร็วของการเคลื่อนที่หรือค่าโมเมนตัมที่มีความถูกต้องมากต้องใช้แสงที่มีความยาวคลื่นมาก
- จาก uncertainty principle ไม่สามารถบอกวงโคจรที่แน่นอนของอิเล็กตรอนรอบนิวเคลียสได้ ตำแหน่งของอิเล็กตรอนเป็นเพียงความน่าจะเป็นที่จะพบอิเล็กตรอนในตำแหน่งหนึ่งๆ เท่านั้น

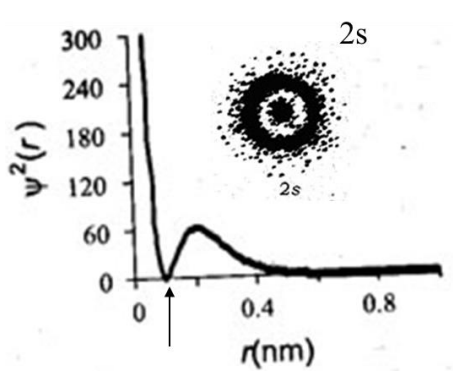
กลศาสตร์คลื่นของชโรดิงเงอร์ (Schrödinger)

- ปี 1926 เออร์วิน ชโรดิงเงอร์ (Erwin Schrödinger) ได้เสนอสมการทางคณิตศาสตร์ที่เรียกว่า “สมการของชโรดิงเงอร์ (Schrödinger equation)” เพื่อใช้อธิบายการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอน ที่อยู่รอบๆนิวเคลียส
- อิเล็กตรอนมีการเคลื่อนที่เป็นแบบคลื่น และค่าที่ได้จากการแก้สมการของชโรดิงเงอร์ จะเรียกว่า “ฟังก์ชันคลื่น (Wave function)” แทนด้วยสัญลักษณ์ Ψ (psi)
- ค่าฟังก์ชันคลื่นยกกำลังสอง (Ψ^2) เป็นค่าที่แปรผันโดยตรงกับความน่าจะเป็นที่จะพบอิเล็กตรอน ณ ตำแหน่งใดๆ ในอะตอม โดยบริเวณที่มีโอกาสพบอิเล็กตรอนมากที่สุด คือ บริเวณที่จะมีความหนาแน่นของอิเล็กตรอนมากที่สุด และมีค่า Ψ^2 สูงสุด
- นอกเหนือจากข้อมูลในเชิงของตำแหน่งที่จะพบอิเล็กตรอนแล้ว ค่าฟังก์ชันคลื่นยังให้ข้อมูลเกี่ยวกับระดับพลังงานของอิเล็กตรอนในอะตอม โดยที่ระดับพลังงานของอิเล็กตรอนที่อยู่ในอะตอมนั้นจะมีค่าเฉพาะ และมีลักษณะไม่ต่อเนื่อง

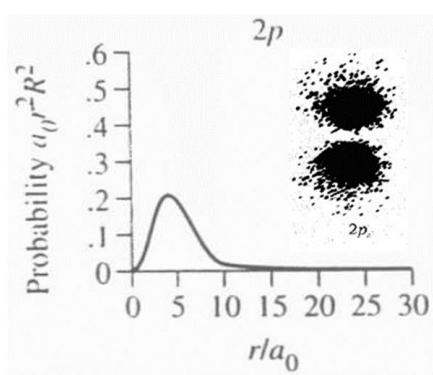
■ ในกลศาสตร์ควอนตัม (Quantum mechanics) ค่าฟังก์ชันคลื่นของอิเล็กตรอนในอะตอม ψ อาจเทียบเคียงได้กับ “ออร์บิทัล (Orbital)” ในอะตอม



โอกาสที่พบอิเล็กตรอนมากอยู่ใกล้นิวเคลียสและโอกาสที่พบอิเล็กตรอนลดลงจนเป็นศูนย์เมื่อ r มีค่ามากขึ้น จึงกล่าวได้ว่าสามารถพบอิเล็กตรอนได้ทุกหนทุกแห่ง แต่ส่วนใหญ่อิเล็กตรอนจะอยู่ในลักษณะที่เป็นกลุ่มหมอกใกล้ๆ กับนิวเคลียส



สำหรับ 2s orbital ที่ตำแหน่งห่างจากนิวเคลียส ความหนาแน่นของอิเล็กตรอนลดลงจนเป็นศูนย์แล้วเพิ่มขึ้นอีกครั้ง บริเวณที่ความหนาแน่นของอิเล็กตรอนลดลงจนเป็นศูนย์ เรียกว่า node ถ้าเขียนผิวของบริเวณที่มีโอกาสที่จะพบอิเล็กตรอน จะได้ผิวเป็นรูปทรงกลม ดังนั้น s orbital มีรูปร่างเป็นทรงกลม (spherical)



p orbital มีการกระจายตัวของอิเล็กตรอนหนาแน่นบริเวณหนึ่งตามแนวเส้นตรงที่ลากผ่านนิวเคลียสดังนั้นรูปร่างของ p orbital จึงเป็นแบบ dumbell 2 อัน ซี่งออกจากนิวเคลียสในทิศทางตรงกันข้าม แต่ p orbital ประกอบด้วย 3 orbital (หรือ 3 subshell) ที่มีพลังงานและรูปร่างเหมือนกัน แต่ต่างกันในทิศทางที่พบความหนาแน่นของอิเล็กตรอน ซึ่งพบได้ใน 3 ทิศทาง คือ ทิศตามแกน x , y , z จึงเขียนแต่ละออร์บิทัลได้เป็น p_x , p_y , p_z

3. เลขควอนตัมและออร์บิทัลอะตอม

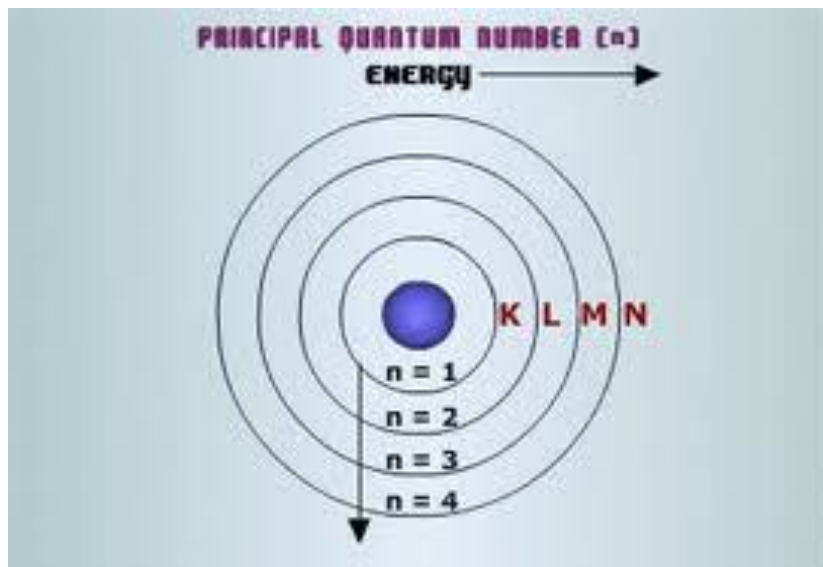
เลขควอนตัม (Quantum number) $\Rightarrow (n, l, m_l, m_s)$

“ชุดตัวเลขที่ใช้ในการระบุระดับพลังงานและโอกาสที่จะพบอิเล็กตรอนในออร์บิทัลของอะตอม”

1. เลขควอนตัมหลัก (Principle quantum number, n)
2. เลขควอนตัมโมเมนตัมเชิงมุม (Angular momentum quantum number, l)
3. เลขควอนตัมแม่เหล็ก (Magnetic quantum number, m_l)
4. เลขควอนตัมสปิน (Spin quantum number, m_s)

1. เลขควอนตัมหลัก (Principle quantum number, n)

แสดง “ระดับพลังงานของออร์บิทัล” และยังสัมพันธ์กับระยะทางเฉลี่ยของอิเล็กตรอนจากนิวเคลียสในออร์บิทัลหนึ่งๆ (ยิ่ง n มากขึ้น ระยะทางเฉลี่ยระหว่างอิเล็กตรอนในออร์บิทัลถึงนิวเคลียสจะมีค่าเพิ่มขึ้น ทำให้ออร์บิทัลมีขนาดใหญ่ขึ้น)



n	Shell
1	K
2	L
3	M
4	N
5	O

n น้อย ----> มีพลังงานต่ำ ----> อยู่ใกล้นิวเคลียส

2. เลขควอนตัมโมเมนตัมเชิงมุม (Angular momentum quantum number, l)

แสดง “ วงโคจรย่อย ” (subshell หรือ sublevel) ซึ่งบอก “ รูปร่าง ” ของออร์บิทัล

- ใช้บอกรูปร่างของ orbital และบอกถึงโมเมนตัมเชิงมุมของอิเล็กตรอน ถ้า l สูงแสดงว่าอิเล็กตรอนเคลื่อนที่ด้วยโมเมนตัมเชิงมุมสูงและมีพลังงานสูงด้วย

- l เป็นจำนวนเต็ม มีค่าตั้งแต่ 0 ถึง $n - 1$

เช่น $n = 1 \Rightarrow l = 0$

$$n = 2 \Rightarrow l = 0, 1$$

$$n = 3 \Rightarrow l = 0, 1, 2$$

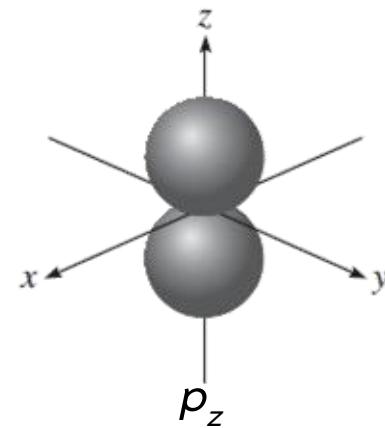
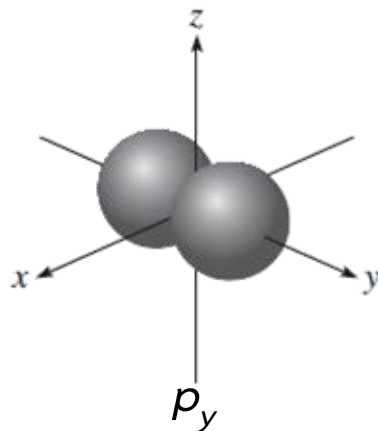
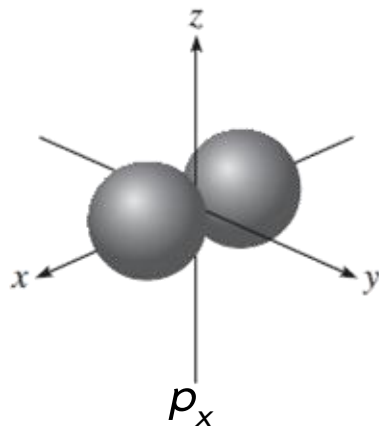
- การเขียนสัญลักษณ์ของ subshell จะเขียนค่า n ไว้ด้านหน้า เช่น $3p$ (คือ $n=3, l=1$)
- ที่ระดับพลังงานเดียวกัน $\rightarrow$ พลังงานของอิเล็กตรอนใน $s < p < d < f$

l	ชื่อออร์บิทัล	
0	s	sharp
1	p	principal line
2	d	diffuse
3	f	fundamental
4	g	-

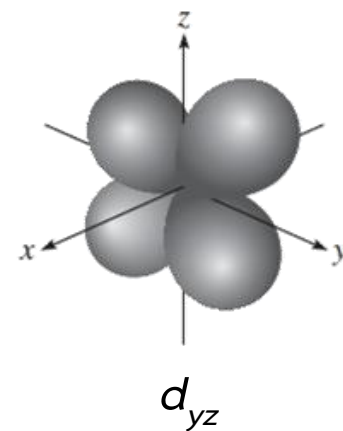
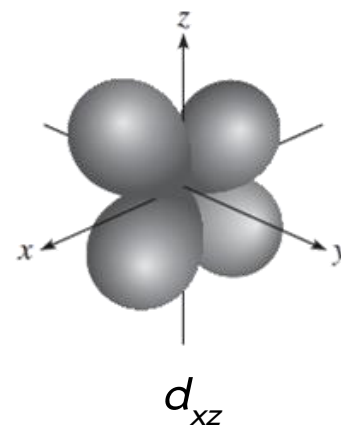
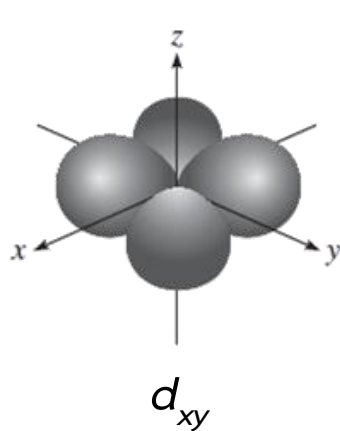
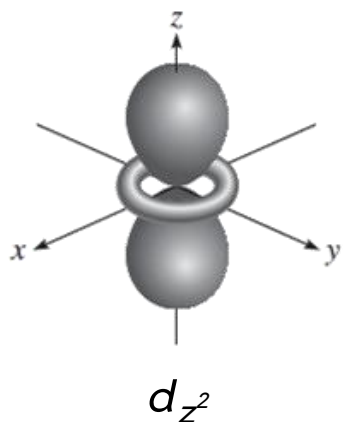
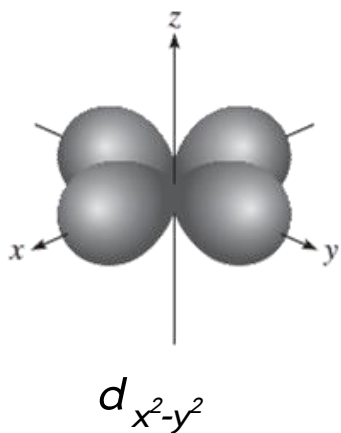
$l = 0$, s-orbital



$l = 1$, p-orbital



$l = 2$, d-orbital



3. เลขควอนตัมแม่เหล็ก (Magnetic quantum number, m_l)

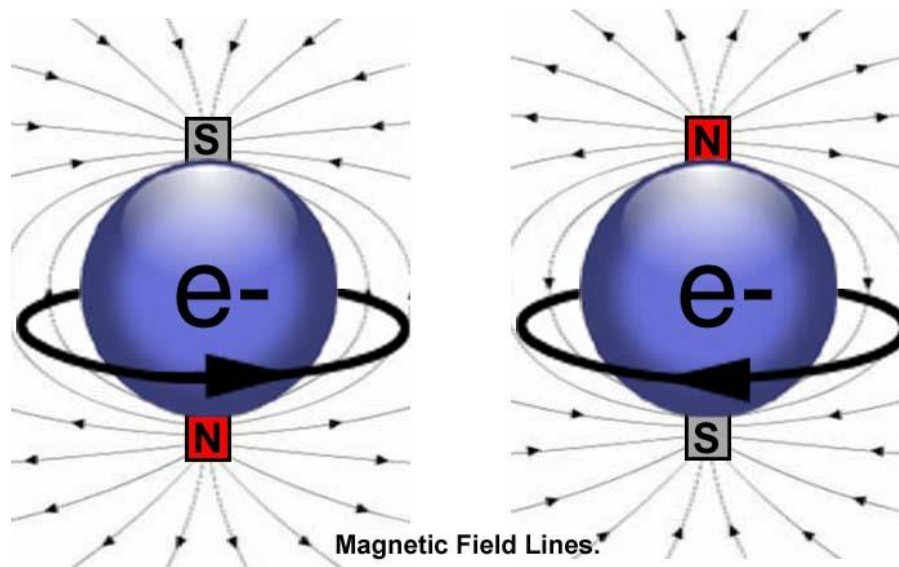
“ แสดงทิศทางของออร์บิทัล ” ในชั้นย่อย

- สำหรับ l ค่าหนึ่ง จะมี m_l อยู่ $2l + 1$ ค่า โดยเป็นจำนวนเต็มตั้งแต่ $-l, \dots, 0, \dots, +l$
เช่น $l = 0, m_l = 0$ (1 orbital)
 $l = 1, m_l = -1, 0, +1$ (3 orbital)
 $l = 2, m_l = -2, -1, 0, +1, +2$ (5 orbital)
 $l = 3, m_l = -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3$ (7 orbital)
- ค่า m_l จะแสดงจำนวน orbital ทั้งหมดที่มีในแต่ละ subshell โดย orbital ที่อยู่ใน subshell เดียวกัน จะมีระดับพลังงานเท่ากัน (degeneracy) เรียกว่า degenerate orbital
 - s -orbital ----> มี 1 degeneracy
 - p -orbital ----> มี 3 degeneracy
 - d -orbital ----> มี 5 degeneracy
 - f -orbital ----> มี 7 degeneracy

n	l	m_l	จำนวนออร์บิทัล
1	0	0	s-subshell ประกอบด้วย 1 orbital
2	0	0	s-subshell ประกอบด้วย 1 orbital
	1	-1, 0, 1	p-subshell ประกอบด้วย 3 orbital
3	0	0	s-subshell ประกอบด้วย 1 orbital
	1	-1, 0, 1	p-subshell ประกอบด้วย 3 orbital
	2	-2, -1, 0, 1, 2	d-subshell ประกอบด้วย 5 orbital
4	0	0	s-subshell ประกอบด้วย 1 orbital
	1	-1, 0, 1	p-subshell ประกอบด้วย 3 orbital
	2	-2, -1, 0, 1, 2	d-subshell ประกอบด้วย 5 orbital
	3	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3	f-subshell ประกอบด้วย 7 orbital

4. เลขควอนตัมสปิน (Spin quantum number, m_s)

- อิเล็กตรอนมีการหมุนรอบแกนตัวเอง เมื่ออยู่ในสนามแม่เหล็กภายนอกจะมีการจัดตัวเป็นสองแบบที่ต่างกัน คือ หมุนทวนเข็มนาฬิกาและหมุนตามเข็มนาฬิกา
- แสดงด้วยตัวเลข 2 ค่า คือ $+1/2$ เมื่อ e^- หมุนทวนเข็มนาฬิกา (แทนด้วย $\uparrow$ สปินขึ้น) และ $-1/2$ เมื่อ e^- หมุนตามเข็มนาฬิกา (แทนด้วย $\downarrow$ สปินลง)



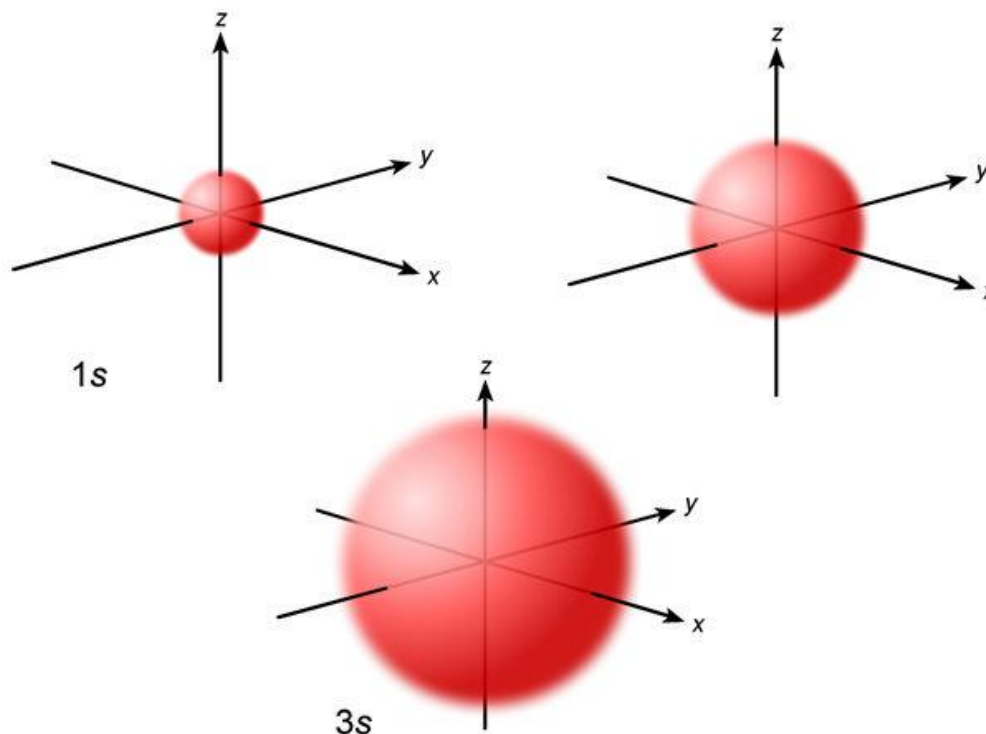
$$m_s = +1/2 \text{ (spin up)}$$

$$m_s = -1/2 \text{ (spin down)}$$

อะตอมมิกออร์บิทัล (Atomic orbital)

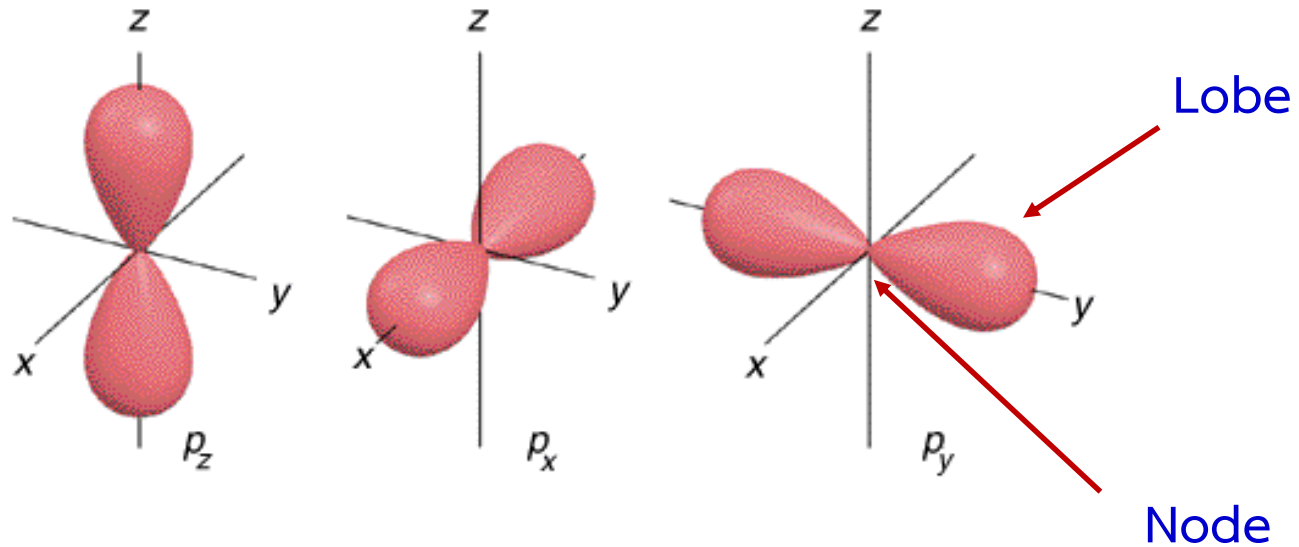
❖ s -orbital ($l = 0, m_l = 0$)

การกระจายของอิเล็กตรอนในออร์บิทัลนี้ จะไม่ขึ้นอยู่กับทิศทาง x, y หรือ z ซึ่งอิเล็กตรอนจะกระจายเป็นทรงกลมดังนี้



❖ p -orbital ($l = 1, m_l = -1, 0, +1$)

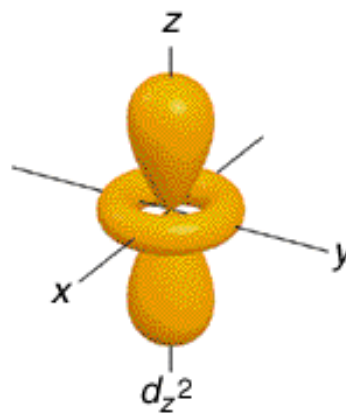
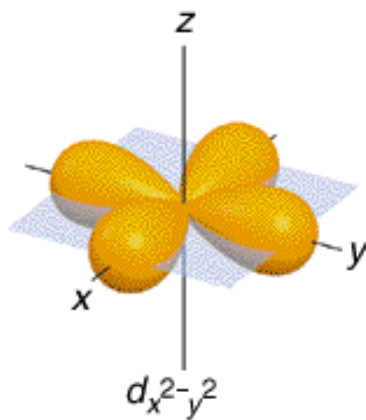
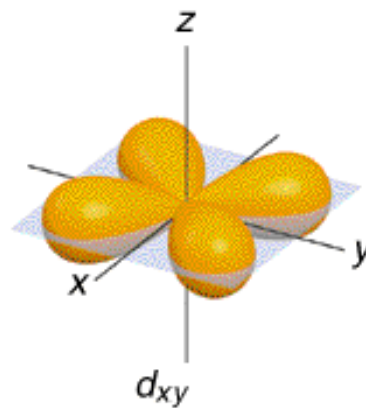
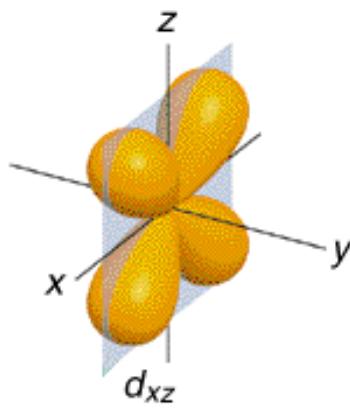
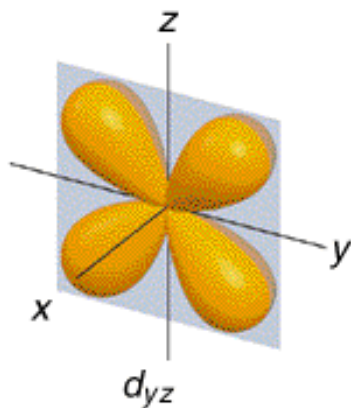
จะมีทั้งหมด 3 ออร์บิทัล ซึ่งทั้ง 3 ออร์บิทัลนี้จะอยู่ตามแกน x, y, z จึงเรียกว่า p_x, p_y และ p_z โดย ทั้งหมดจะมีพลังงานเท่ากัน (degeneracy) และ มีลักษณะเป็นพู (lobe) ดังนี้



Node เป็นบริเวณที่ไม่พบอิเล็กตรอน เช่น นิวเคลียส

❖ d -orbital ($l = 2, m_l = -2, -1, 0, +1, +2$)

มีทั้งหมด 5 ออร์บิทัล คือ $d_{yz}, d_{xz}, d_{xy}, d_{x^2-y^2}$ และ d_{z^2} ซึ่งจัดตัวในทิศทางต่างกัน แต่ทั้งหมดจะมีพลังงานเท่ากัน (degeneracy) และมีลักษณะดังนี้



ความสัมพันธ์ระหว่างเลขควอนตัมกับอะตอมมิกออร์บิทัล

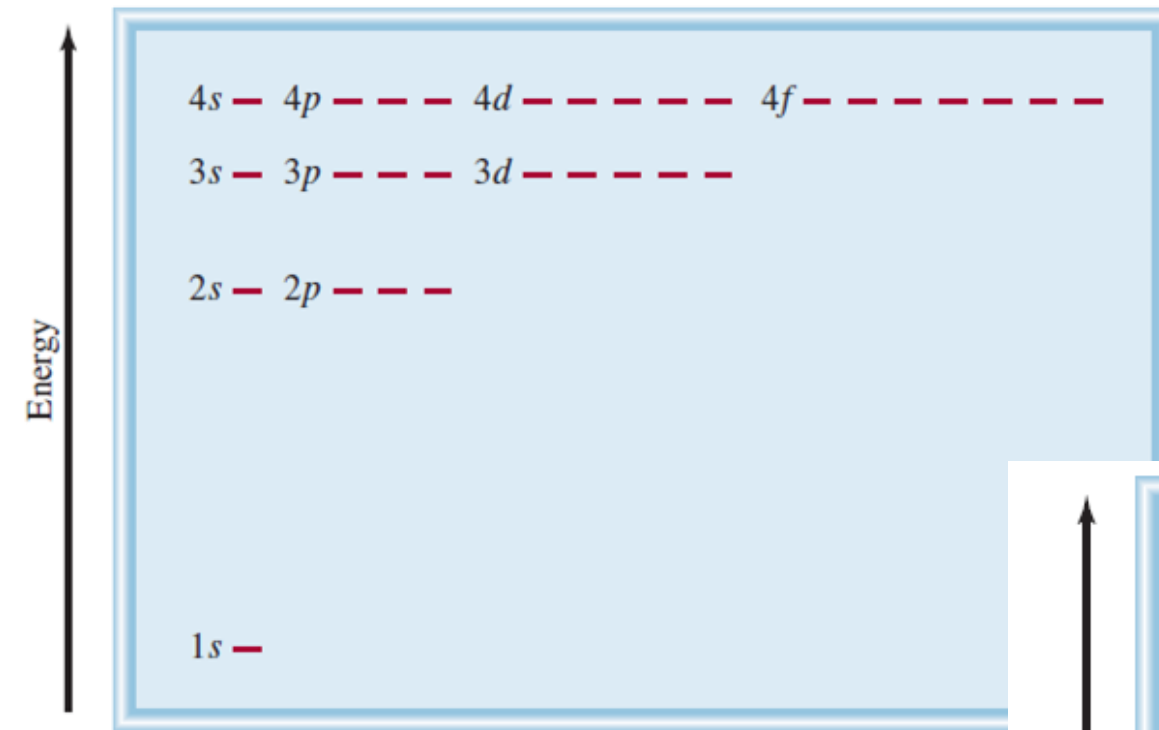
n	ℓ	m_ℓ	Number of Orbitals	Atomic Orbital Designations
1	0	0	1	1s
2	0	0	1	2s
	1	-1, 0, 1	3	2p _x , 2p _y , 2p _z
3	0	0	1	3s
	1	-1, 0, 1	3	3p _x , 3p _y , 3p _z
	2	-2, -1, 0, 1, 2	5	3d _{xy} , 3d _{yz} , 3d _{xz} , 3d _{x²-y²} , 3d _{z²}
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

ตัวอย่าง 6 จงบอกค่า n , l และ m_l ของออร์บิทัลในชั้นย่อย $4d$

ตัวอย่าง 7 จงคำนวณจำนวนออร์บิทัลทั้งหมดที่สัมพันธ์กับเลขควอนตัมหลัก $n = 3$

ตัวอย่าง 8 จงเขียนชุดเลขควอนตัมที่เป็นไปได้ทั้งหมดของอิเล็กตรอนใน $3d$ ออร์บิทัล

พลังงานของออร์บิทัล

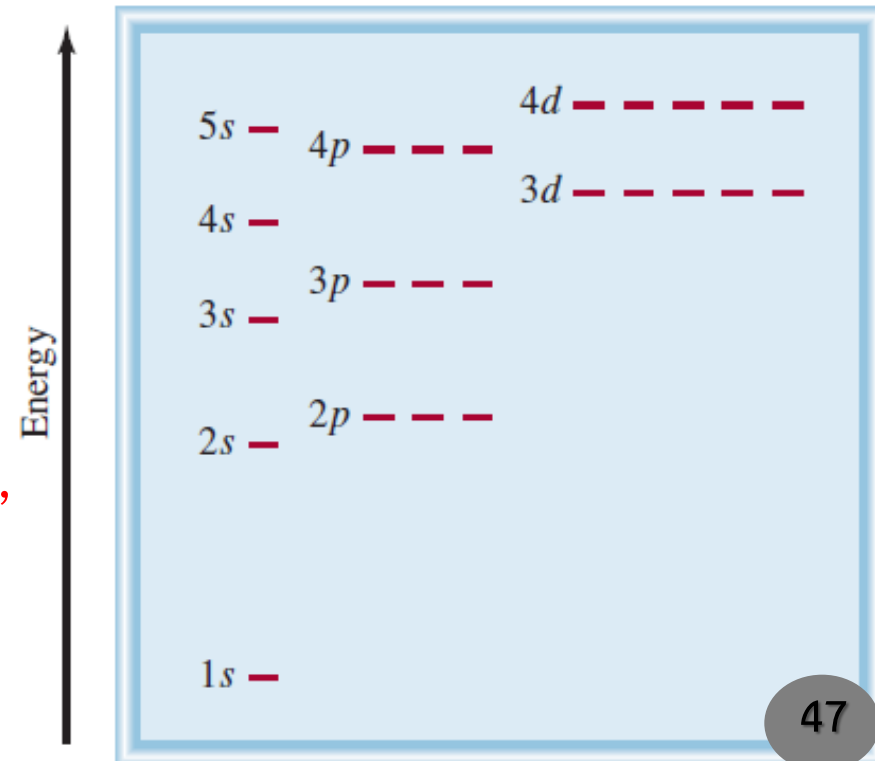


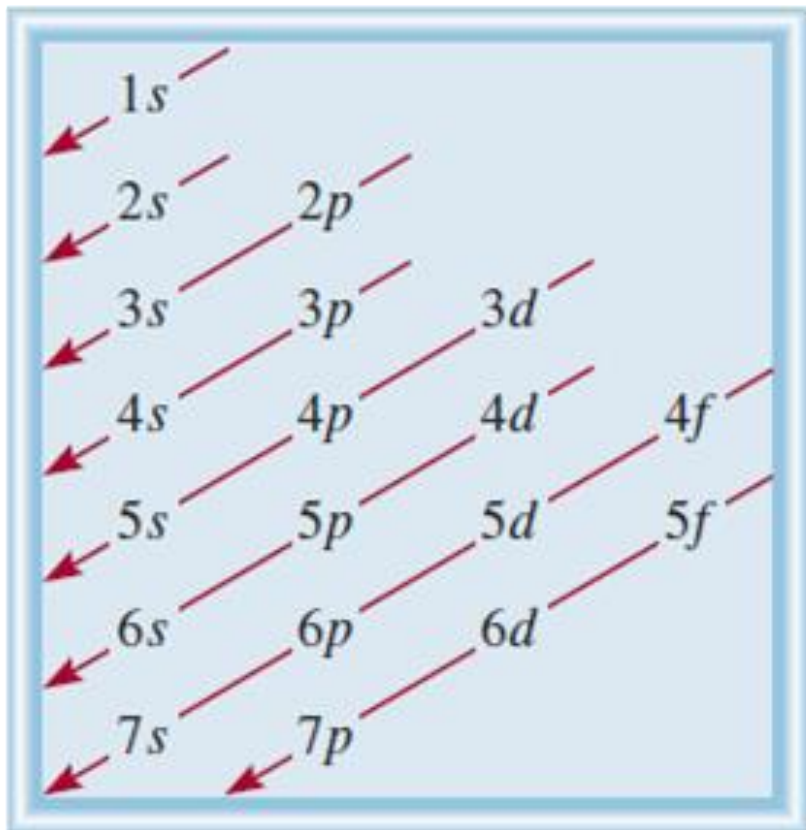
“ระดับพลังงานของไฮโดรเจน”

$$1s < 2s = 2p < 3s = 3p = 3d < 4s = 4p = 4d = 4f \dots$$

“ระดับพลังงานของอะตอมที่มีหลายอิเล็กตรอน”

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < \dots$$





ลำดับการบรรจุอิเล็กตรอนในชั้นย่อยของของ
อะตอมที่มีหลายอิเล็กตรอน

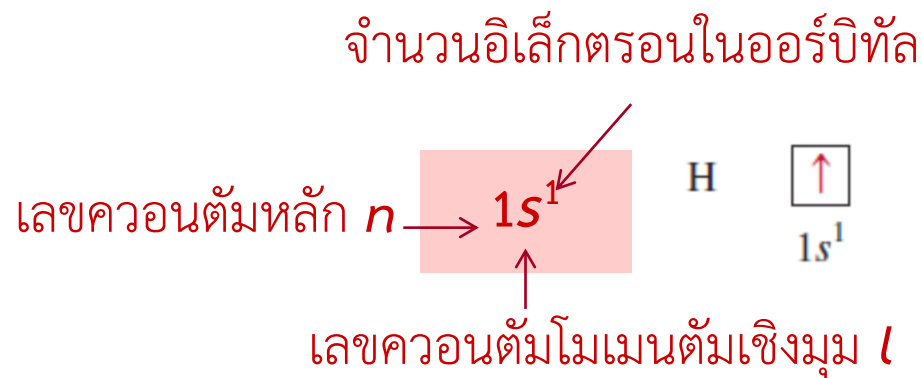
*เริ่มต้นที่ 1s และเคลื่อนลงล่างตามทศลูกศร
ดังนี้ $1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < \dots$

- สำหรับอะตอมที่มีหลายอิเล็กตรอน ระดับพลังงาน 3d มีค่าใกล้เคียงกับของ 4s มาก
- พลังงานของอะตอมไม่ได้เป็นผลรวมพลังงานออร์บิทัลเพียงอย่างเดียว แต่ยังขึ้นกับพลังงานจากแรงผลักระหว่างอิเล็กตรอนในออร์บิทัลด้วย
- พลังงานของอะตอมมีค่าต่ำกว่าหากบรรจุอิเล็กตรอนในชั้นย่อย 4s ก่อนบรรจุในชั้นย่อย 3d

4. การจัดอิเล็กตรอน (Electron configuration)

การจัดเรียงตัวของอิเล็กตรอนในแต่ละ atomic orbital ของอะตอมใดๆ เรียกว่า “electron configuration” ซึ่งเขียนแทนด้วยสัญลักษณ์ ที่ประกอบด้วย 3 ส่วน คือ

1. ตัวเลขแทนค่า n (1, 2, 3, ...)
2. ตัวอักษรแทน l (s, p, d, f, ...)
3. จำนวนอิเล็กตรอนใน subshell นั้น

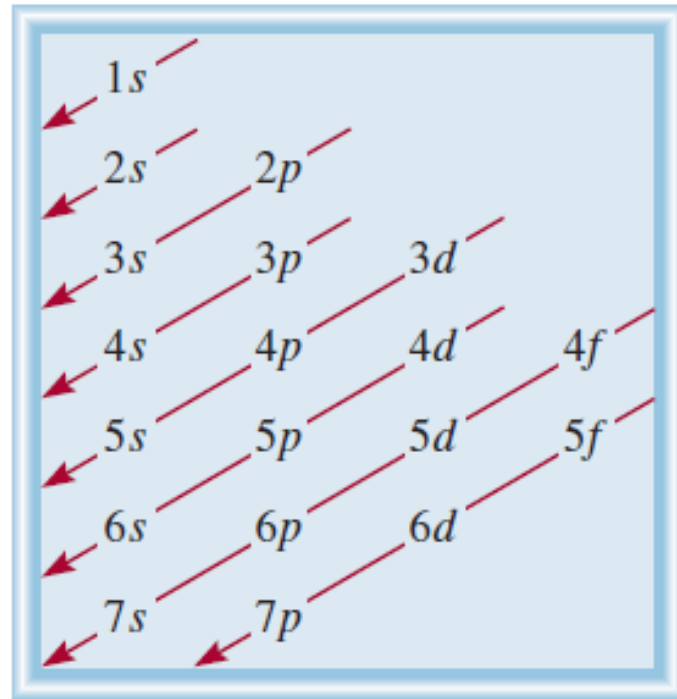
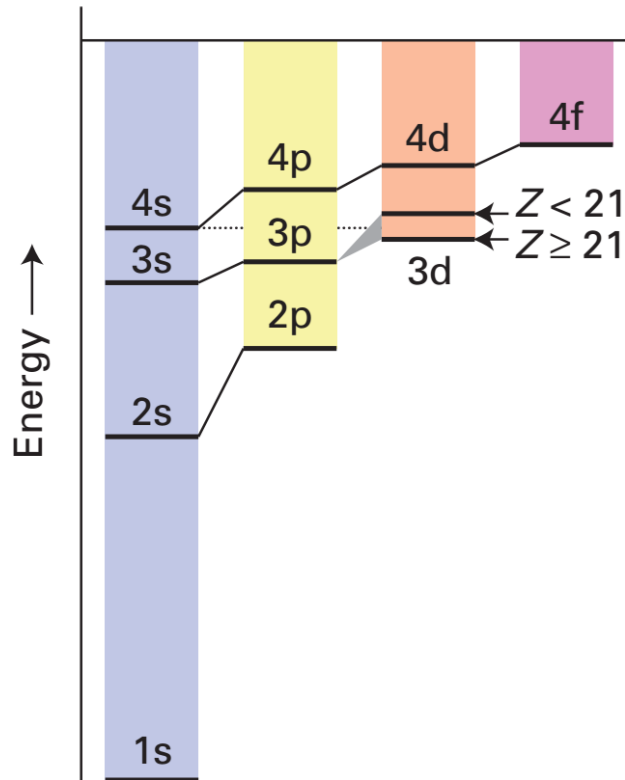


หลักในการจัดอิเล็กตรอน

- ❖ Aufbau principle (building-up principle)
- ❖ Pauli exclusion principle
- ❖ Hund's rules

❖ หลักเอาฟบาว (Aufbau principle)

บรรจุอิเล็กตรอนลงใน orbital ที่ว่างที่มีระดับพลังงานต่ำที่สุดจนเต็มก่อน เรียงลำดับออร์บิทัลตามลูกศร ดังรูป ซึ่งการจัดเรียงอิเล็กตรอนแบบนี้จะทำให้อะตอมเสถียรที่สุดเพราะพลังงานรวมทั้งหมดของอะตอมมีค่าต่ำสุด



s-orbital บรรจุอิเล็กตรอนได้มากที่สุด

2 ตัว

p-orbital บรรจุอิเล็กตรอนได้มากที่สุด

6 ตัว

d-orbital บรรจุอิเล็กตรอนได้มากที่สุด

10 ตัว

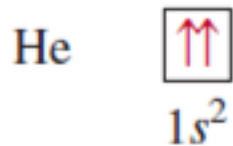
f-orbital บรรจุอิเล็กตรอนได้มากที่สุด

14 ตัว

❖ หลักการกีดกันของเพาลี (Pauli exclusion principle)

“No more than two electrons may occupy a single orbital and, if two do occupy a single orbital, then their spins must be paired.”

- ในอะตอมเดียวกัน ไม่มี 2 อิเล็กตรอนใดๆ มีเลขควอนตัมทั้ง 4 (n, l, m_l, m_s) เหมือนกัน
- หากมีอิเล็กตรอนในอะตอมที่มีค่า n, l , และ m_l เท่ากันแล้ว มันต้องมีค่า m_s ต่างกัน
- ในการบรรจุอิเล็กตรอนลงในแต่ละ orbital จะบรรจุอิเล็กตรอนได้อย่างมากที่สุด 2 ตัว ที่มีสปินต่างกัน $\Rightarrow$ 1 ออร์บิทัล สามารถบรรจุอิเล็กตรอนได้ 2 ตัว



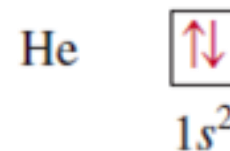
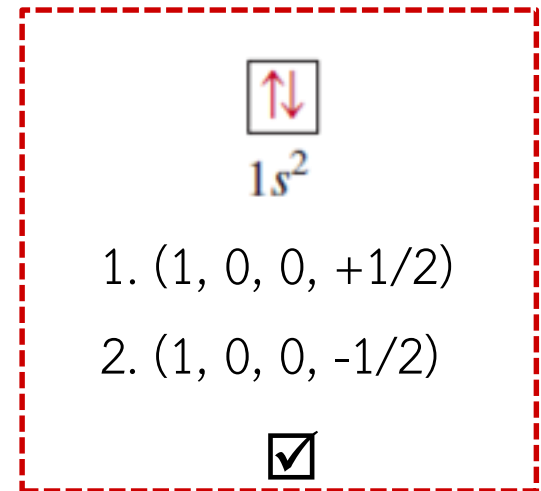
1. (1, 0, 0, +1/2)

2. (1, 0, 0, +1/2)



1. (1, 0, 0, -1/2)

2. (1, 0, 0, -1/2)



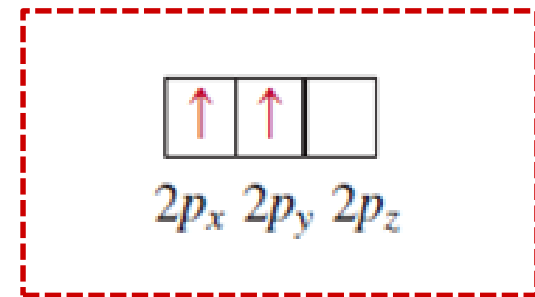
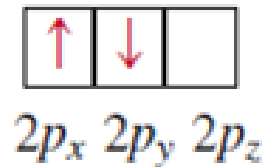
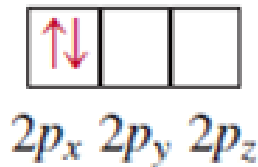
“ หนึ่ง เอส สอง ”

❖ กฎของฮุนด์ (Hund's rule)

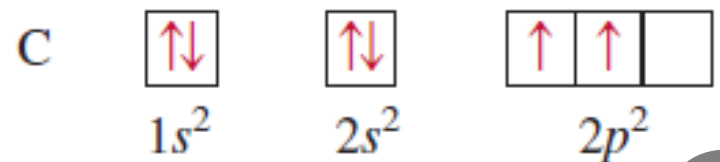
“When more than one orbital has the same energy, electrons occupy separate orbitals and do so with parallel spins ($\uparrow\uparrow$).”

- ใน subshell ที่มี orbital มากกว่า 1 orbital หรือที่เรียกว่า degenerate orbital (p , d , f , ...) อิเล็กตรอนจะจัดตัวแบบอิเล็กตรอนเดี่ยว (unpaired electron) ที่มีสปินเหมือนกันมากที่สุด

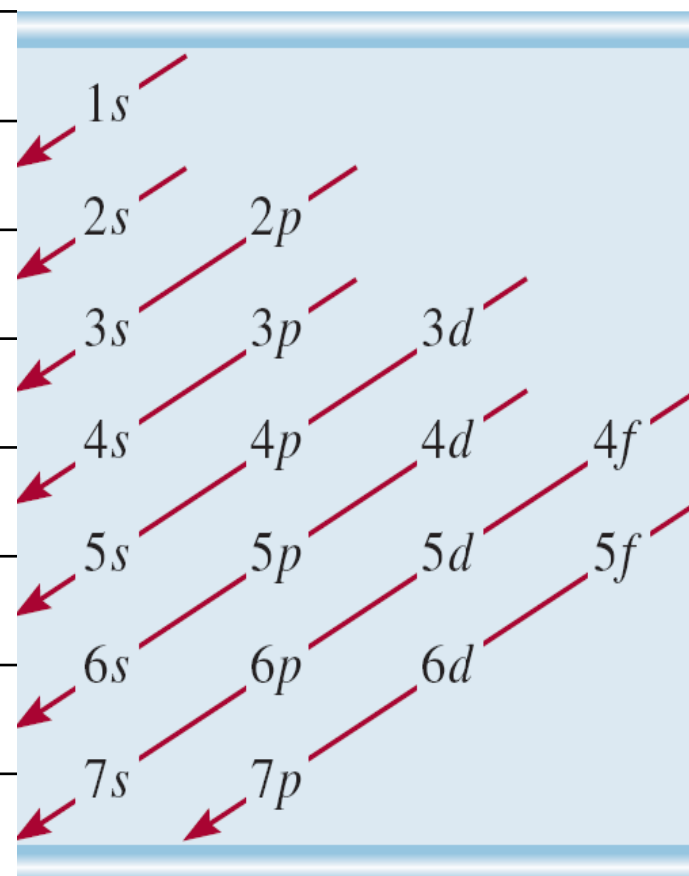
พิจารณาการจัดอิเล็กตรอนของคาร์บอน: $1s^2 2s^2 2p^2$



พลังงานต่ำที่สุด เสถียรสุด



Elements	No. of e ⁻	e ⁻ configuration
H	1	1s ¹
He	2	1s ²
Li	3	1s ² 2s ¹
C	6	1s ² 2s ² 2p ²
O	8	1s ² 2s ² 2p ⁴
Ne	10	1s ² 2s ² 2p ⁶
Mg	12	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ²
Sc	21	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 4s ² 3d ¹
Fe	26	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 4s ² 3d ⁶

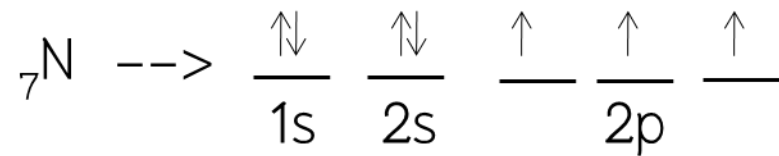


เนื่องจากการเขียน electron configuration ให้ข้อมูลเพียงการจัดเรียงอิเล็กตรอนในแต่ละ orbital แต่ไม่ได้บอก spin ของอิเล็กตรอน (m_s) และไม่บอก orientation ของ orbital (m_l)

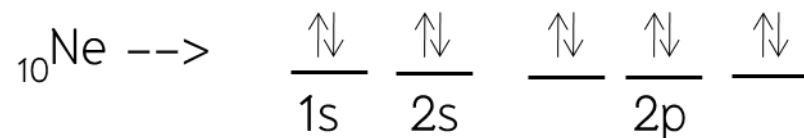


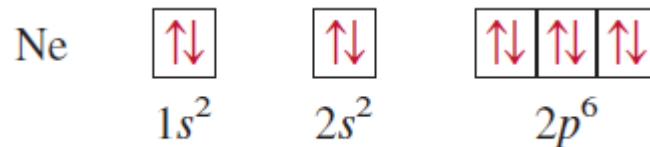
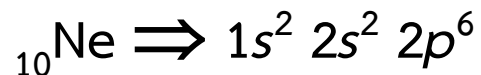
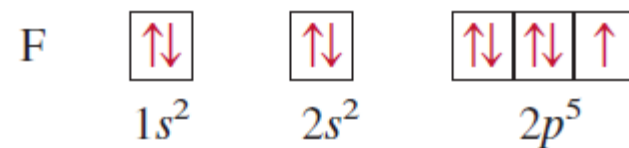
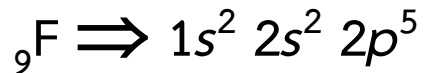
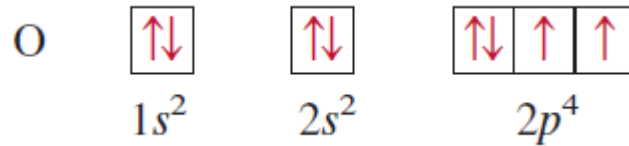
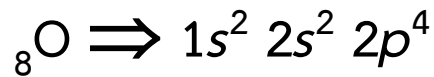
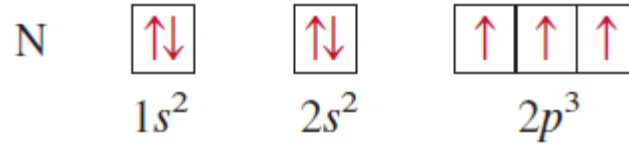
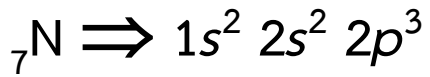
จึงต้องใช้ orbital diagram แสดงการจัดเรียงอิเล็กตรอนในแต่ละ orbital เพื่อช่วยทำนายสภาพความเป็นแม่เหล็ก และความเสถียรของอิเล็กตรอน

- **Paramagnetic:** การจัดเรียง e^- มี unpaired electron (โดดเดี่ยว) ทำให้เกิดการเหนี่ยวนำในสนามแม่เหล็ก



- **Diamagnetic:** การจัดเรียง e^- เป็น paired electron (จับคู่หมด) ทำให้สนามแม่เหล็กหักล้างกันหมด ไม่เกิดการเหนี่ยวนำในสนามแม่เหล็ก



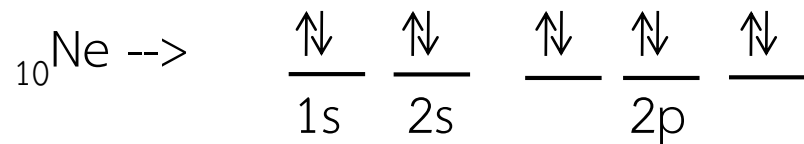
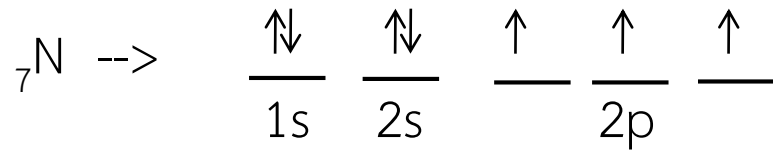
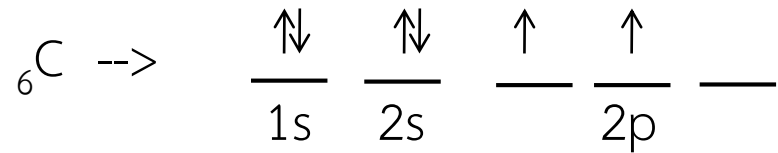


พาราแมกเนติก
(paramagnetic)
“มีอิเล็กตรอนเดี่ยว”

ไดอะแมกเนติก
(Diamagnetic)
“ไม่มีอิเล็กตรอนเดี่ยว”

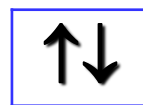
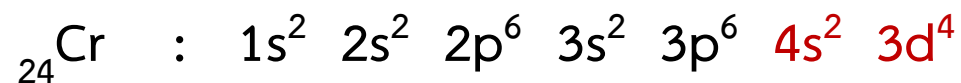
ความเสถียรของอิเล็กตรอน (Stability of electron)

Order of stability: Full filling > Half filling > Incomplete filling



Order of stability: Ne > N > C

ข้อยกเว้น



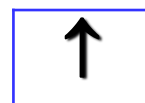
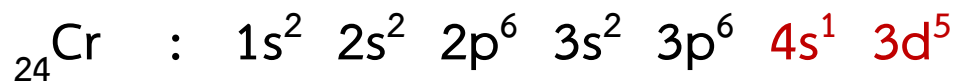
4s



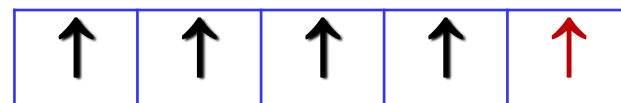
3d

การจัดเรียง e^- ในออร์บิทัล 3d เป็นแบบ incomplete filling ถ้าให้ e^- ใน 4s โดดไปอยู่ที่ 3d จะทำให้การจัดเรียง e^- จะเป็นแบบ half filling ซึ่งเสถียรมากกว่าแบบแรก

ดังนั้นจะได้รูปแบบการจัดเรียงตัวของ Cr ที่เสถียรคือ

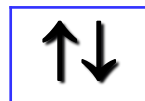
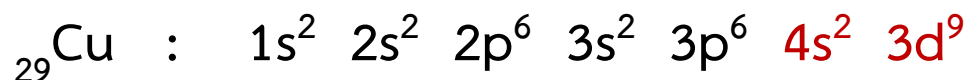


4s

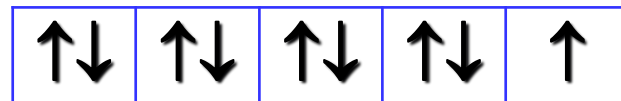


3d

ข้อยกเว้น

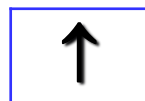
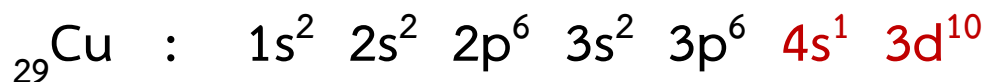


4s

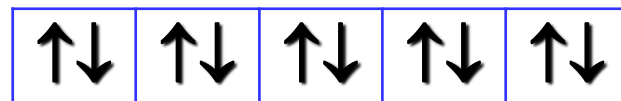


3d

การจัดเรียง e^- ใน ออร์บิทัล 3d เป็นแบบ incomplete filling ถ้าให้ e^- จาก 4s ไปอยู่ที่ 3d จะทำให้การจัดเรียง e^- จะเป็นแบบ full filling ซึ่งการจัดเรียงแบบใหม่จะเสถียรมากกว่าแบบแรก
ดังนี้

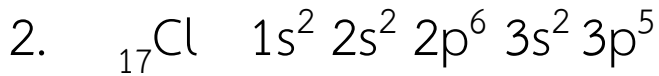


4s

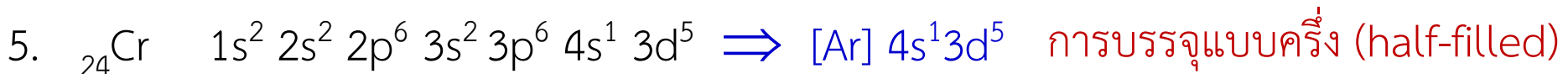
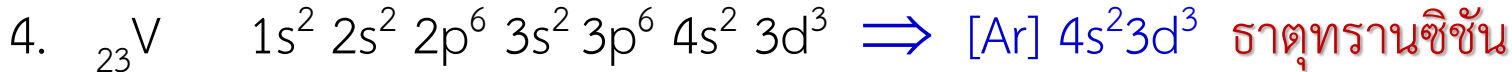
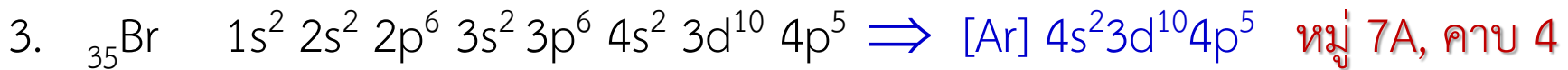
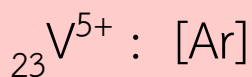
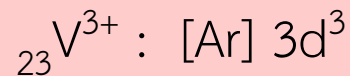
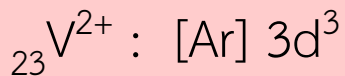


3d

[Ne] 3s¹ หมู่ 1A, คาบ 3



$[\text{Ne}] 3s^2 3p^5$ หมู่ 7A, คาบ 3

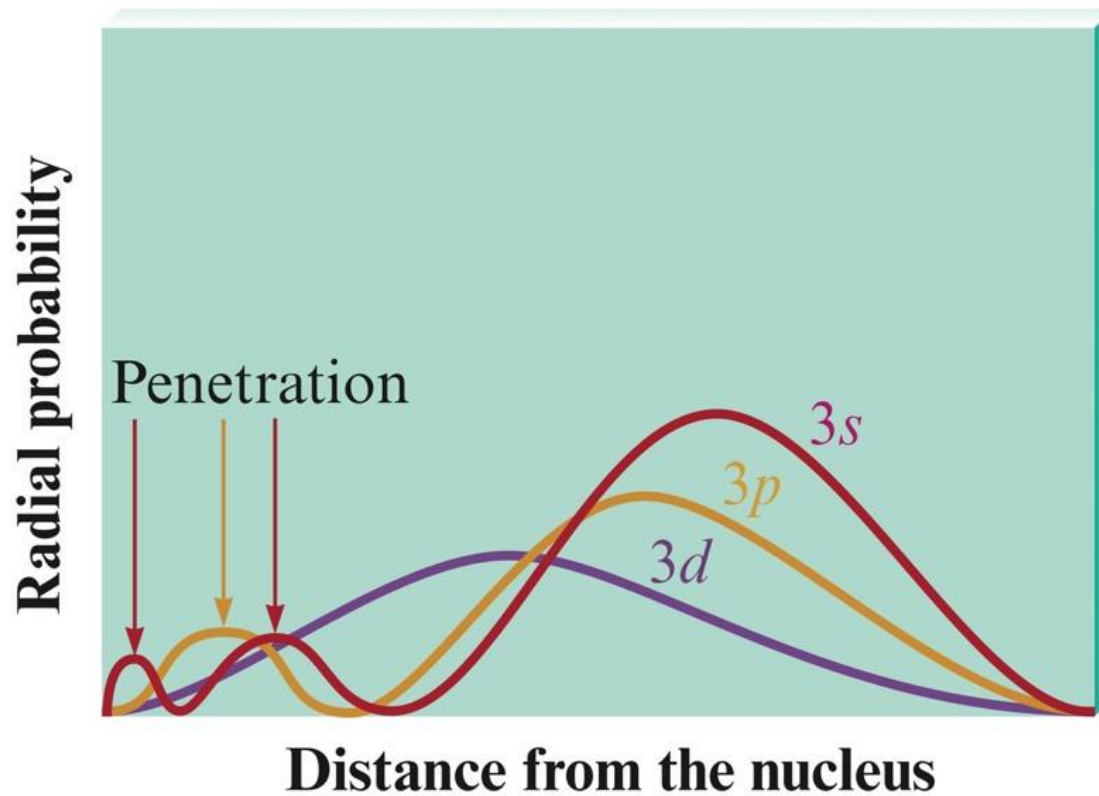
[illegible]ไวออนบวก (อะตอมเสีย e^-) $_{23}\text{V} : [\text{Ar}] 4s^2 3d^3$ 

5. การกำบัง (Shielding)

Penetration of orbitals

- เป็นการแผ่กว้างของออร์บิทัลของวงหนึ่งๆ และเกิดแรงกระทำกับออร์บิทัลในวงที่มีเลขควอนตัมต่ำกว่า เช่น พลังงานของออร์บิทัล 4s จะต่ำกว่าออร์บิทัล 3d อิเล็กตรอนจะถูกบรรจุในออร์บิทัล 4s จนเต็มก่อน แล้วจึงบรรจุในออร์บิทัล 3d จนเต็มหมายความว่า ออร์บิทัล 4s ไต่เจาะทะลุออร์บิทัล 3d
- การเจาะทะลุจะเพิ่มขึ้นเมื่อจำนวนวงเพิ่มขึ้น เช่น ออร์บิทัล 5s สามารถเจาะทะลุออร์บิทัล 4f และ 4d ออร์บิทัล 6s สามารถเจาะทะลุออร์บิทัล 4f, 5d และ 5f





- พิจารณาฟังก์ชันการกระจายเชิงรัศมี สำหรับออร์บิทัล s รัศมีออร์บิทัลของวงที่ต่ำกว่าจะมีโอกาสพบอิเล็กตรอนได้หลายครั้ง มากกว่าออร์บิทัล p, d, f
- การเจาะทะลุของออร์บิทัล จะเป็นไปตามลำดับดังนี้ $s > p > d > f$

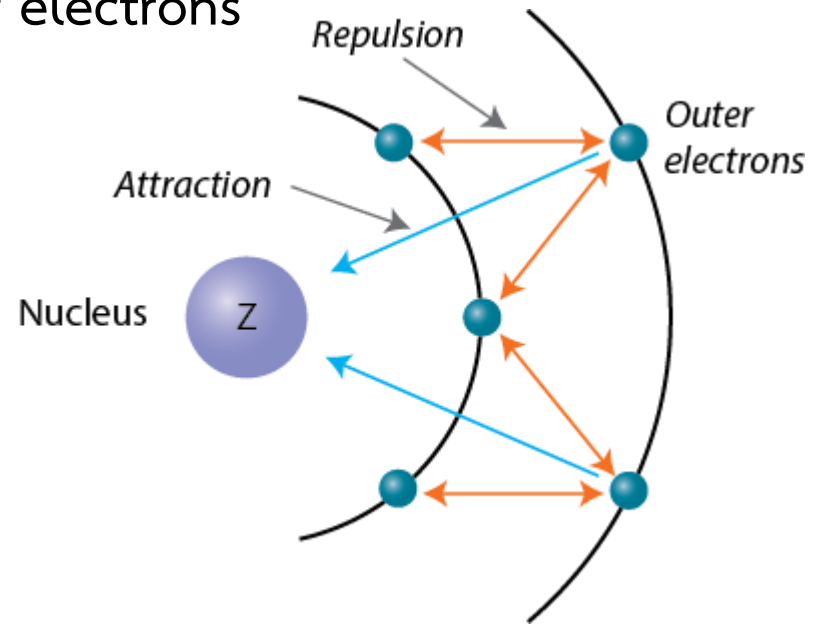
Shielding effect

- Electrons in an atom can shield each other from the pull of the nucleus. This effect called the shielding effect. (การกำบัง)
- Shielding effect explains why valence shell electrons are more easily removed from the atom.
- More shielding that occurs, further valence shell can spread out.
- อิเล็กตรอนในออร์บิทัลหนึ่งจะบดบัง (shield) อิเล็กตรอนอื่น ๆ จากนิวเคลียส ทำให้เกิดประจุนิวเคลียสยังผล (effective nuclear charge, Z_{eff}) มีค่าน้อยกว่าประจุจริง คือ Z

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

Z = ประจุนิวเคลียส, S = ค่าคงที่ของการบดบัง (shielding constant)

Effects of electron shielding on outer electrons



	1	Effective nuclear charges of the first 12 elements						8
1s	¹ H 1.0							² He 1.34
2s, 2p	³ Li 1.26	⁴ Be 1.58	⁵ B 1.56	⁶ C 1.82	⁷ N 2.07	⁸ O 2.00	⁹ F 2.26	¹⁰ Ne 2.52
3s, 3p	¹¹ Na 1.64	¹² Mg 2.25	¹³ Al	¹⁴ Si	¹⁵ P	¹⁶ S	¹⁷ Cl	¹⁸ Ar

Slater's rules for calculating shielding

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

1. เขียนโครงสร้างอิเล็กตรอนของธาตุเป็นลำดับและจัดเป็นกลุ่ม ดังนี้

[1s][2s,2p][3s,3p][3d][4s,4p][4d][4f] [5s,5p] etc*

*bracket indicates group and n is principle quantum number

2. อิเล็กตรอนที่อยู่ทางขวาของ (ns, np) ที่กำลังพิจารณา ไม่มีผลต่อค่า S

3. สำหรับอิเล็กตรอนทุกตัวในกลุ่ม (ns, np)

- $S=0.35$ ต่อ 1 อิเล็กตรอน ยกเว้น อิเล็กตรอนใน 1s orbital $S=0.30$ ต่อ 1 อิเล็กตรอน
- อิเล็กตรอนทุกตัวในวง ($n-1$) $S=0.85$ ต่อ 1 อิเล็กตรอน
- อิเล็กตรอนทุกตัวในวง ($n-2$) และต่ำลงไปเช่น $n-3$, $n-4$, ... $S=1.00$ ต่อ 1 อิเล็กตรอน

4. สำหรับอิเล็กตรอนทุกตัวในหมู่ (nd, nf)

- $S=0.35$ ต่อ 1 อิเล็กตรอน
- $S=1$ สำหรับอิเล็กตรอนทุกตัวที่อยู่ทางซ้ายของอิเล็กตรอน nd, nf

ตัวอย่าง 9 จงหาค่า Z_{eff} ที่ valence p -electron ของ ${}_6\text{C}$ ได้รับ

1. เขียนโครงสร้างอิเล็กตรอนของ C



2. การพิจารณาค่า S

- สำหรับอิเล็กตรอนใน $(ns, np) \Rightarrow S = 0.35 / 1 e^-$

$$\therefore S = 0.35 \times 3 = 1.05$$

- สำหรับอิเล็กตรอนในกลุ่ม $n-1 \Rightarrow S = 0.85 / 1 e^-$

$$\therefore S = 0.85 \times 2 = 1.7$$

3. คำนวณ $Z_{\text{eff}} = Z - S = 6 - (1.05 + 1.7) = 3.25$

ตัวอย่าง 10 จงหาค่า Z_{eff} ที่ valence d -electron ของ $_{27}\text{Co}$ ได้รับ

1. เขียนโครงสร้างอิเล็กตรอนของ Co



2. การพิจารณาค่า S

- สำหรับอิเล็กตรอนใน (nd, nf) $\Rightarrow S = 0.35 / 1 e^-$

$$\therefore S = 0.35 \times 6 = 2.1$$

- สำหรับอิเล็กตรอนในกลุ่มที่ต่ำกว่า $\Rightarrow S = 1 / 1 e^-$

$$\therefore S = 1 \times 18 = 18$$

3. คำนวณ $Z_{\text{eff}} = Z - S = 27 - (2.1 + 18) = 6.9$

ตัวอย่าง 11 จงหาค่า Z_{eff} ของอิเล็กตรอนใน 4s และ 3d ของ $_{26}\text{Fe}$

โครงสร้างอิเล็กตรอนของ Fe $\Rightarrow [1s^2] [2s^2, 2p^6] [3s^2, 3p^6] [3d^6] [4s^2]$

■ กรณี 4s-electron

$$Z_{\text{eff}} = 26 - \{(0.35 \times 1) + (0.85 \times 14) + (1 \times 10)\} = 26 - 22.25 = 3.75$$

■ กรณี 3d-electron

$$Z_{\text{eff}} = 26 - \{(0.35 \times 5) + (1 \times 18)\} = 26 - 19.75 = 6.25$$

จากค่า Z_{eff} อธิบายได้ว่า 3d-electron ถูกดึงไว้ในอะตอมด้วยแรงที่มากกว่าเพราะมี Z_{eff} มากกว่า ส่วน 4s-electron ถูกดึงไว้ในอะตอมด้วยแรงที่น้อยกว่าเพราะ Z_{eff} น้อยกว่า ดังนั้นเมื่อเกิดเป็นไอออน 4s-electron จึงหลุดก่อน 3d-electron

การจัดเรียงอิเล็กตรอนของ $_{26}\text{Fe} \Rightarrow [\text{Ar}] 4s^2 3d^6$



6. ตารางธาตุและสมบัติของธาตุตามตารางธาตุ

IUPAC Periodic Table of the Elements

1																2																																																																																																																																																																																																																																																																															
1 H hydrogen 1.008 [1.0078, 1.0082]																2 He helium 4.0026																																																																																																																																																																																																																																																																															
3 Li lithium 6.94 [6.938, 6.997]																4 Be beryllium 9.0122																5 B boron 10.81 [10.806, 10.821]																6 C carbon 12.011 [12.009, 12.012]																7 N nitrogen 14.007 [14.006, 14.008]																8 O oxygen 15.999 [15.999, 16.000]																9 F fluorine 18.998																10 Ne neon 20.180																																																																																																																																																																															
11 Na sodium 22.990																12 Mg magnesium 24.305 [24.304, 24.307]																13 Al aluminium 26.982																14 Si silicon 28.086 [28.084, 28.086]																15 P phosphorus 30.974																16 S sulfur 32.06 [32.059, 32.076]																17 Cl chlorine 35.45 [35.446, 35.457]																18 Ar argon 39.948																																																																																																																																																																															
19 K potassium 39.098																20 Ca calcium 40.078(4)																21 Sc scandium 44.956																22 Ti titanium 47.867																23 V vanadium 50.942																24 Cr chromium 51.996																25 Mn manganese 54.938																26 Fe iron 55.845(2)																27 Co cobalt 58.933																28 Ni nickel 58.693																29 Cu copper 63.546(3)																30 Zn zinc 65.38(2)																31 Ga gallium 69.723																32 Ge germanium 72.630(8)																33 As arsenic 74.922																34 Se selenium 78.971(8)																35 Br bromine 79.904 [79.901, 79.907]																36 Kr krypton 83.798(2)															
37 Rb rubidium 85.468																38 Sr strontium 87.62																39 Y yttrium 88.906																40 Zr zirconium 91.224(2)																41 Nb niobium 92.906																42 Mo molybdenum 95.95																43 Tc technetium 101.07(2)																44 Ru ruthenium 102.91																45 Rh rhodium 106.42																46 Pd palladium 107.87																47 Ag silver 107.87																48 Cd cadmium 112.41																49 In indium 114.82																50 Sn tin 118.71																51 Sb antimony 121.76																52 Te tellurium 127.60(3)																53 I iodine 126.90																54 Xe xenon 131.29															
55 Cs caesium 132.91																56 Ba barium 137.33																57-71 lanthanoids																72 Hf hafnium 178.49(2)																73 Ta tantalum 180.95																74 W tungsten 183.84																75 Re rhenium 186.21																76 Os osmium 190.23(3)																77 Ir iridium 192.22																78 Pt platinum 195.08																79 Au gold 196.97																80 Hg mercury 200.59																81 Tl thallium 204.38 [204.38, 204.39]																82 Pb lead 207.2																83 Bi bismuth 208.98																84 Po polonium																85 At astatine																86 Rn radon															
87 Fr francium																88 Ra radium																89-103 actinoids																104 Rf rutherfordium																105 Db dubnium																106 Sg seaborgium																107 Bh bohrium																108 Hs hassium																109 Mt meitnerium																110 Ds darmstadtium																111 Rg roentgenium																112 Cn copernicium																113 Nh nihonium																114 Fl flerovium																115 Mc moscovium																116 Lv livermorium																117 Ts tennessine																118 Og oganeson															



INTERNATIONAL UNION OF
PURE AND APPLIED CHEMISTRY

57 La lanthanum 138.91	58 Ce cerium 140.12	59 Pr praseodymium 140.91	60 Nd neodymium 144.24	61 Pm promethium	62 Sm samarium 150.36(2)	63 Eu europium 151.96	64 Gd gadolinium 157.25(3)	65 Tb terbium 158.93	66 Dy dysprosium 162.50	67 Ho holmium 164.93	68 Er erbium 167.26	69 Tm thulium 168.93	70 Yb ytterbium 173.05	71 Lu lutetium 174.97
89 Ac actinium	90 Th thorium 232.04	91 Pa protactinium 231.04	92 U uranium 238.03	93 Np neptunium	94 Pu plutonium	95 Am americium	96 Cm curium	97 Bk berkelium	98 Cf californium	99 Es einsteinium	100 Fm fermium	101 Md mendelevium	102 No nobelium	103 Lr lawrencium

For notes and updates to this table, see www.iupac.org. This version is dated 28 November 2016.
Copyright © 2016 IUPAC, the International Union of Pure and Applied Chemistry.

เลขอะตอม 113 = Nihonium (Nh)

เลขอะตอม 115 = Moscovium (Mc)

เลขอะตอม 117 = Tennessine (Ts)

เลขอะตอม 118 = Oganesson (Og)

Groups (American tradition)

IA	IIA	IIIB	IVB	VB	VIB	VIIB	VIIIB	IB	IIB	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIIA
----	-----	------	-----	----	-----	------	-------	----	-----	------	-----	----	-----	------	-------

Groups (European tradition)

IA	IIA	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIII	IB	IIB	IIIB	IVB	VB	VIB	VIIIB	0
----	-----	------	-----	----	-----	------	------	----	-----	------	-----	----	-----	-------	---

Groups (IUPAC)

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
---	---	---	---	---	---	---	---	---	----	----	----	----	----	----	----	----	----

1																	2
3	Transition metals										5					10	
Alkali Metals	Alkaline Earth Metals	21		22								30	31	Chalcogens	Halogens	Noble Gases	
		39		40								48	49				
55		57	*	72								80	81			86	
87		89	**	104								112					

rare earth *

heavy rare earth **

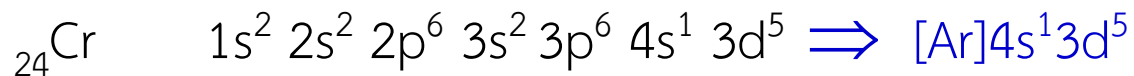
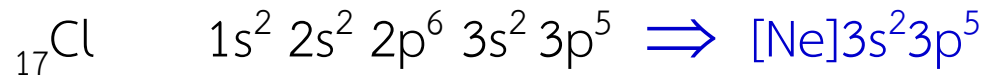
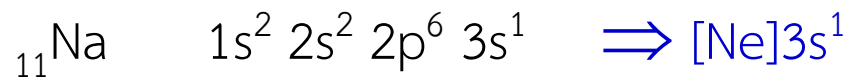
*	58	Lanthanides									71
**	90	Actinides									103

การจำแนกกลุ่มธาตุ: โลหะ กึ่งโลหะ และอโลหะ

1 1A	2 2A											13 3A	14 4A	15 5A	16 6A	17 7A	18 8A
1 H	2 He											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
3 Li	4 Be											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
11 Na	12 Mg	3 3B	4 4B	5 5B	6 6B	7 7B	8 8B	9 8B	10 8B	11 1B	12 2B	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
55 Cs	56 Ba	57 La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	113	114	115	116	(117)	118
87 Fr	88 Ra	89 Ac	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112						

Metals	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
Metalloids	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr
Nonmetals														

การจำแนกกลุ่มธาตุตามชนิดชั้นย่อยที่ใช้บรรจุอิเล็กตรอนวงนอก



1s			1s
2s			2p
3s			3p
4s	3d		4p
5s	4d		5p
6s	5d		6p
7s	6d		7p

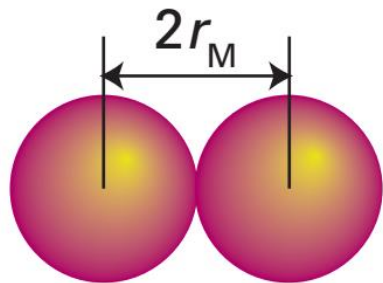
4f
5f

แนวโน้มสมบัติของธาตุในตารางธาตุ

- ❖ ขนาดของอะตอมและไอออน
- ❖ พลังงานไอออไนเซชัน (Ionization energy: IE)
- ❖ สัมพรรคภาพอิเล็กตรอน (Electron Affinity: EA)
- ❖ อิเล็กโตรเนกาติวิตี (Electronegativity, EN)

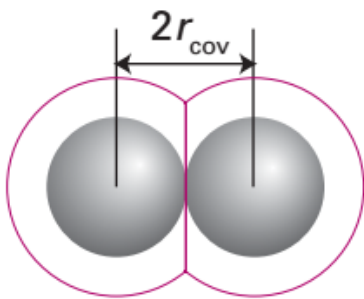
❖ ขนาดของอะตอมและไอออน (Atomic and ionic radii)

■ รัศมีโลหะ (Metallic radius)



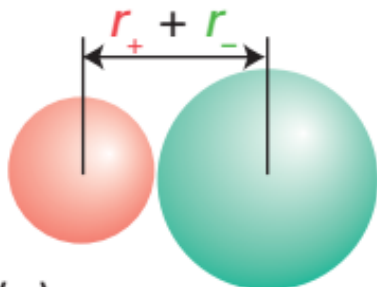
ระยะทางครึ่งหนึ่งของระยะห่างระหว่างอะตอมของโลหะชนิดเดียวกัน 2 อะตอมที่อยู่ติดกัน

■ รัศมีโคเวเลนต์ (Covalent radius)



ระยะทางครึ่งหนึ่งของระยะห่างระหว่างนิวเคลียสของอะตอมอโลหะ 2 อะตอมที่สร้างพันธะโคเวเลนต์กัน

■ รัศมีไอออนิก (Ionic radius)



ระยะทางระหว่างนิวเคลียสของไอออนบวกและไอออนลบที่สร้างพันธะไอออนิกกัน

ปัจจัยที่มีผลต่อขนาดอะตอม

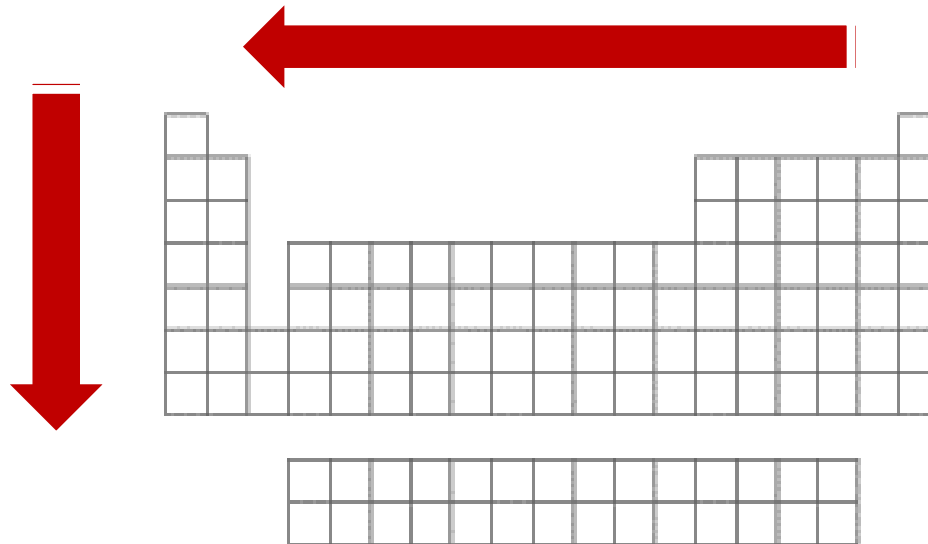
- จำนวนระดับพลังงานของอิเล็กตรอน [เลขควอนตัมหลัก (n) ของเวเลนซ์อิเล็กตรอน]
- แรงดึงดูดระหว่างนิวเคลียสกับอิเล็กตรอน (Z_{eff})

➤ หมู่เดียวกัน: ขนาดอะตอมใหญ่ขึ้นจากบนลงล่าง

เช่น $\text{Li} < \text{Na} < \text{K} < \text{Rb} < \text{Cs}$ (ธาตุที่อยู่ด้านล่างมี n มาก)

➤ คาบเดียวกัน: ขนาดของอะตอมจะเล็กลงจากซ้ายไปขวา

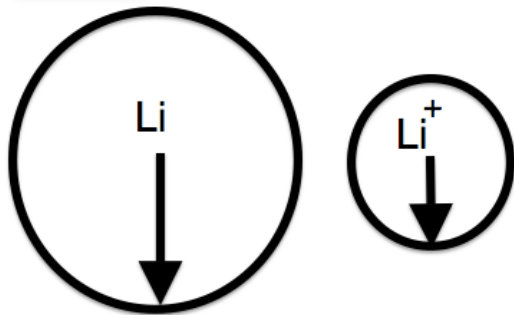
เช่น $\text{Li} > \text{Be} > \text{B} > \text{C} > \text{N} > \text{O} > \text{F}$ (ธาตุที่อยู่ทางขวามี Z_{eff} มาก)



ขนาดไอออน

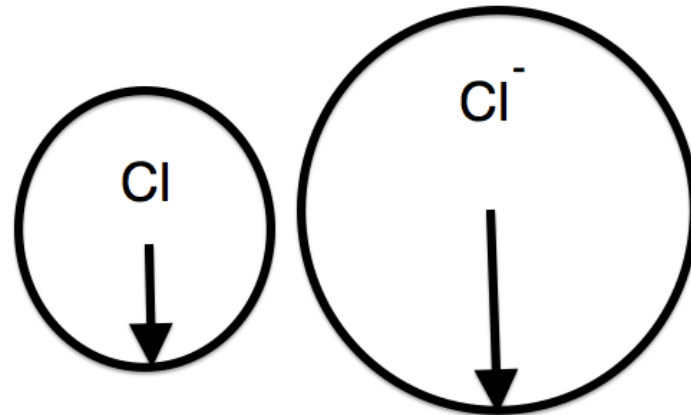
- **ไอออนบวก (Cation)** เกิดจากการเสียอิเล็กตรอนออกจากอะตอม ดังนั้นจะมีจำนวนอิเล็กตรอนน้อยลง ในขณะที่โปรตอนเท่าเดิม จึงทำให้มีขนาดเล็กลงกว่าอะตอมที่เป็นกลาง
- **ไอออนลบ (Anion)** เกิดจากการรับอิเล็กตรอนเพิ่มเข้ามา แต่จำนวนโปรตอนยังเท่าเดิม ทำให้มีขนาดใหญ่ขึ้นกว่าอะตอมที่เป็นกลาง

Go to next page



The Lithium Cations is significantly smaller than the Lithium atom

Positive nucleus pulls e^- tighter and the radius is smaller



The Chlorine anion is significantly larger than the Chlorine atom

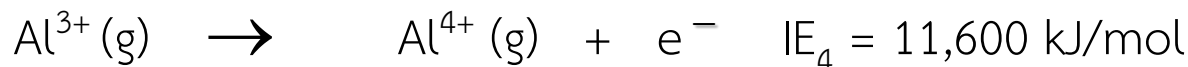
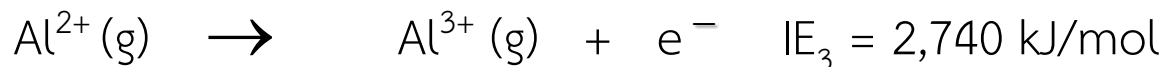
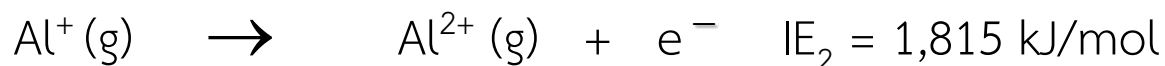
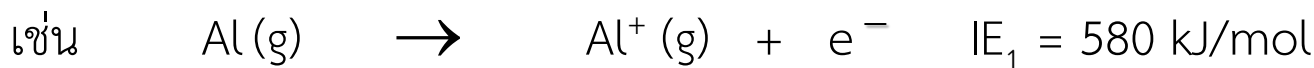
Addition of e^- causes decrease in effective nuclear charge, e^- are held more loosely and atomic radius is increased

❖ พลังงานไอออไนเซชัน (Ionization energy: IE)

“พลังงานที่น้อยที่สุดที่ต้องใช้เพื่อทำให้อิเล็กตรอนหลุดออกจากอะตอมในสถานะแก๊ส”



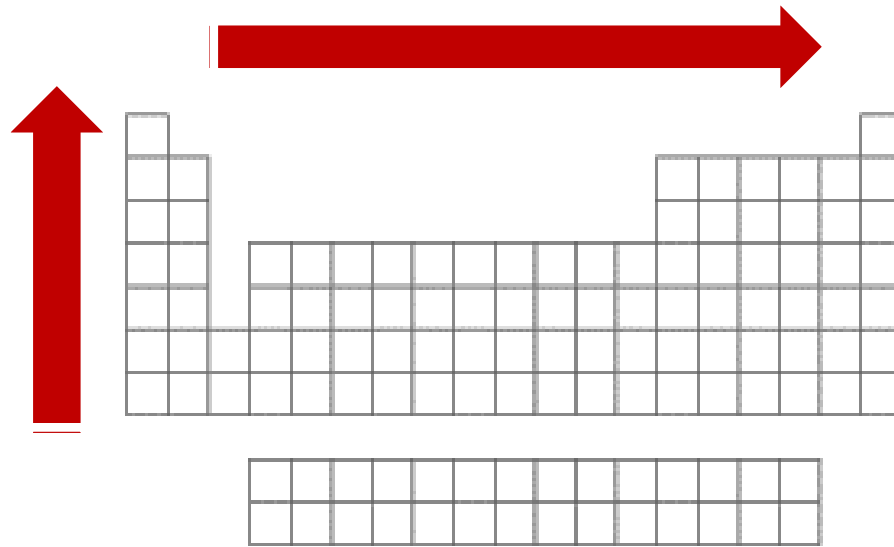
IE เป็นค่าที่ใช้วัดความยากง่ายในการทำให้อะตอมเกิดเป็นไอออนบวก



$$1 \text{ eV} = 96.485 \text{ kJ mol}^{-1}$$

หมู่เดียวกัน: ค่า IE จะลดลงจากบนลงล่าง เนื่องจากขนาดอะตอมใหญ่ขึ้น พลังงานที่ใช้สำหรับการดึงอิเล็กตรอนในวงนอกสุดจึงมีค่ามีค่าน้อย (สามารถดึง e^- ออกได้ง่าย)

คาบเดียวกัน: ค่า IE_1 จะเพิ่มขึ้นจากซ้ายไปขวา เนื่องจากขนาดอะตอมเล็กลง พลังงานที่ใช้สำหรับดึงอิเล็กตรอนในวงนอกสุดมีค่ามาก (การดึงออก e^- ยากขึ้น)



Small atom $\Rightarrow$ an electron is close to the nucleus and experiences a strong Coulombic attraction, making it difficult to remove.

พลังงานไอออไนเซชัน จะมีค่าเพิ่มขึ้นเมื่อลำดับในการดึงอิเล็กตรอนออกจากอะตอมในสถานะ
แก๊สเพิ่มมากขึ้น โดย $IE_1 < IE_2 < IE_3 < \dots$

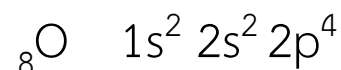
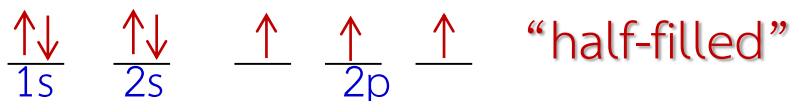
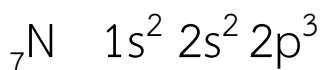
Successive Ionization Energies (kJ/mol) for the Elements in Period 3

Element	I_1	I_2	I_3	I_4	I_5	I_6	I_7
Na	495	4560					
Mg	735	1445	7730	Core electrons*			
Al	580	1815	2740	11,600			
Si	780	1575	3220	4350	16,100		
P	1060	1890	2905	4950	6270	21,200	
S	1005	2260	3375	4565	6950	8490	27,000
Cl	1255	2295	3850	5160	6560	9360	11,000
Ar	1527	2665	3945	5770	7230	8780	12,000

*Note the large jump in ionization energy in going from removal of valence electrons to removal of core electrons.

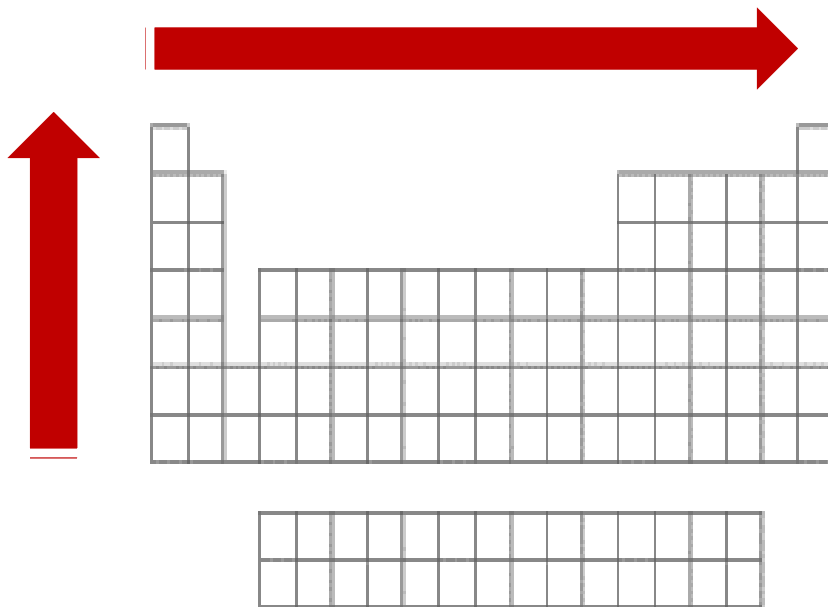
H							He
1312							2373
							5259
Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
513	899	801	1086	1402	1314	1681	2080
7297	1757	2426	2352	2855	3386	3375	3952
11809	14844	3660	4619	4577	5300	6050	6122
		25018					
Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar
495	737	577	786	1011	1000	1251	1520
4562	1476	1816	1577	1903	2251	2296	2665
6911	7732	2744	3231	2911	3361	3826	3928
		11574					

- IE₁ of **boron** is smaller than that of **beryllium** $\Rightarrow$ outermost e⁻ of boron occupies a 2p orbital and hence is less strongly bound than if it had occupied a 2s orbital.
- decrease of IE₁ between **N** and **O** $\Rightarrow$ explained by electron configurations



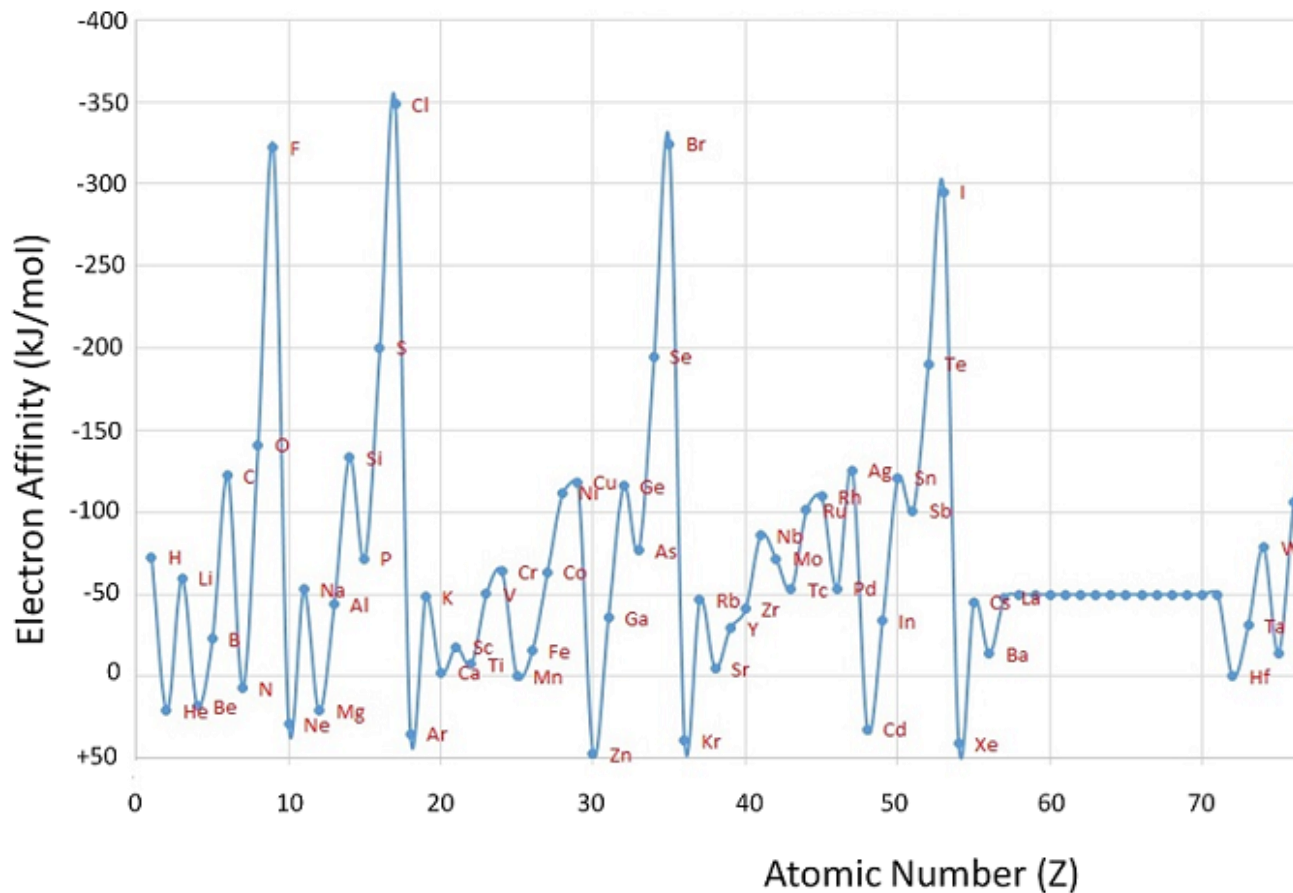
❖ สัมพรรคภาพอิเล็กตรอน (Electron Affinity: EA)

“พลังงานที่ถูกคายออกมา เมื่ออะตอมในสถานะแก๊สรับอิเล็กตรอนเข้าไปในอะตอม”



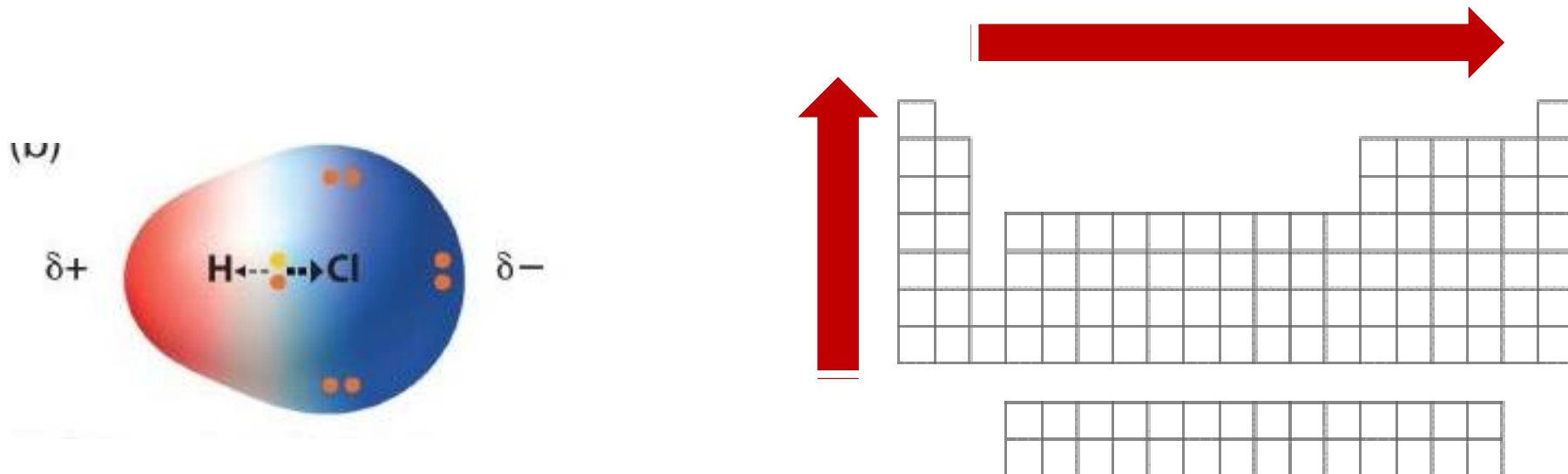
หมู่เดียวกัน: ค่า EA จะลดลงจากบนลงล่าง เนื่องจากอะตอมมีขนาดใหญ่ขึ้น แรงดึงดูดระหว่างนิวเคลียสและอิเล็กตรอนวงนอกสุดมีค่าลดลง

คาบเดียวกัน: ค่า EA จะเพิ่มขึ้นจากซ้ายไปขวา เนื่องจากอะตอมมีขนาดเล็กลง แรงดึงดูดระหว่างนิวเคลียสและอิเล็กตรอนวงนอกสุด (Z_{eff}) มีค่ามากกว่าอะตอมที่มีขนาดใหญ่



❖ อิเล็กโตรเนกาติวิตี (Electronegativity, EN)

“ความสามารถในการดึงดูดอิเล็กตรอนเข้าหาอะตอม”



หมู่เดียวกัน: ค่า EN จะลดลงจากบนลงล่าง
คาบเดียวกัน: ค่า EN จะเพิ่มขึ้นจากซ้ายไปขวา

ตัวอย่าง 12 จงเปรียบเทียบค่าสัมพรรคภาพอิเล็กตรอนของ Li และ Be

Hint: Account for the large decrease in electron affinity between Li and Be despite the increase in nuclear charge.