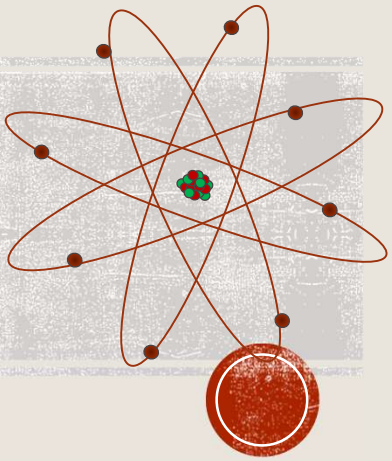
โครงสร้างอะตอม



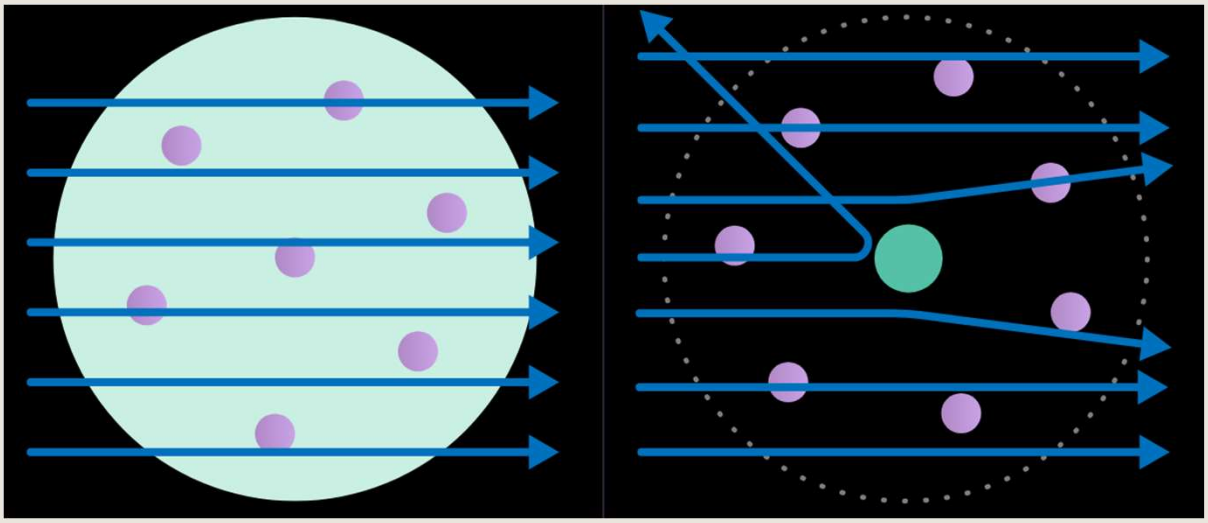
อาจารย์ ดร.นิรวรรณ ธรรมขันธ์

วิชา คม 331

คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยแม่โจ้

Thomson Model

Rutherford Model

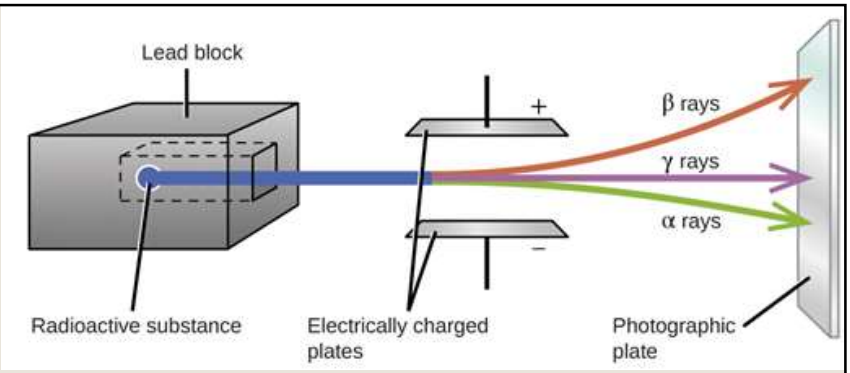


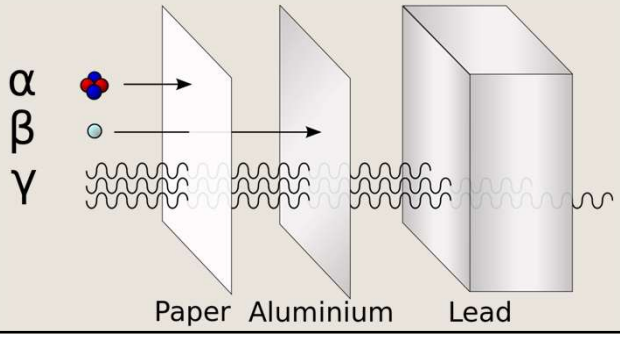
Based on Rutherford's experiment, almost all of the α alpha particles passed straight through the gold foil, a few \α alpha particles were deflected more than 90° from their path.

กัมมันตรังสี

รังสีทั้ง 3 เกิดจากการสลายตัวของสารกัมมันตรังสี เช่น ยูเรเนียม

- α จะเบี่ยงเบนกับขั้วโลหะประจุบวก
- β จะเบี่ยงเบนกับขั้วโลหะประจุลบ
- γ เหมือนรังสีเอกซ์ไม่มีประจุ

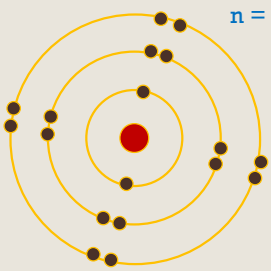




- α (^4_2He) อำนาจทะลุทะลวงต่ำมาก กระดาษเพียง 1 แผ่น หรือ 2 แผ่นก็สามารถกั้นได้
- β มี อิเล็กตรอน ($^0_{-1}e$) และโพสิตรอน ($^0_{+1}e$)
- γ สามารถทะลุผ่านแผ่นอะลูมิเนียมและทะลุผ่านแผ่นตะกั่วหนา 8 mm ได้

3

นีลส์ โบร์ (Niels Bohr) เสนอว่า อิเล็กตรอนอยู่เป็นชั้น ๆ รอบนิวเคลียส



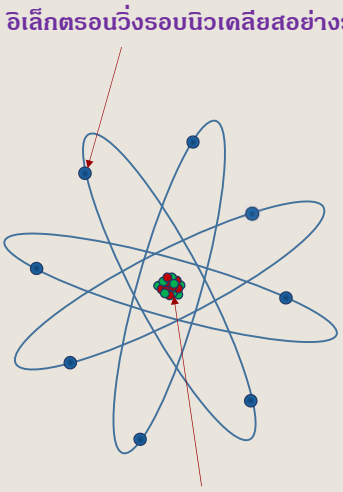
4

ภายในอะตอมประกอบไปด้วยอนุภาค 3 ชนิด คือ โปรตอน นิวตรอน และอิเล็กตรอน

อะตอม (atom) หมายถึง สิ่งที่ไม่สามารถแบ่งย่อยให้เล็กลงได้อีก

โปรตอนและนิวตรอน อัดแน่นรวมกันอยู่ใจกลางอะตอม ใจกลางอะตอม เรียกว่า **นิวเคลียส** มีขนาดเล็กและหนาแน่นมากและมีอิเล็กตรอนเล็กๆ เคลื่อนที่อย่างรวดเร็วรอบนิวเคลียส

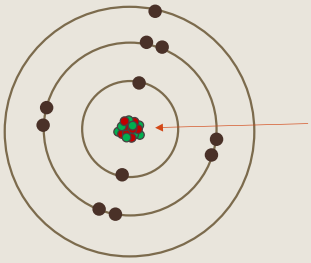
อนุภาค	ประจุ	มวล (g)
โปรตอน	1+	1.67262×10^{-24}
นิวตรอน	0	1.67493×10^{-24}
อิเล็กตรอน	1-	9.10939×10^{-28}



5

สัญลักษณ์การเขียนเลขอะตอมและมวลอะตอมของธาตุใดๆ (X) $^{A}_{Z}X$

แผนภาพแสดงอะตอมของโซเดียม



เลขมวล → 23
เลขอะตอม → 11 Na

เราสามารถหาจำนวนโปรตอน นิวตรอนและอิเล็กตรอนใน $^{16}_{8}O$ และ $^{31}_{15}P$ ได้หรือไม่

6

Isotope

ไอโซโทป คือ อะตอมของธาตุชนิดเดียวกันที่มีจำนวนโปรตอนเท่ากัน แต่จำนวนนิวตรอนต่างกัน

$^{1}_{1}H$ $^{2}_{1}H$ $^{3}_{1}H$

$^{12}_{6}C$ $^{14}_{6}C$

$^{35}_{17}Cl$ $^{37}_{17}Cl$

^{28}Si ^{29}Si ^{30}Si

Isotone

ไอโซโทน คือ อะตอมของธาตุต่างชนิดกันมีเลขอะตอมและเลขมวลต่างกัน แต่มีจำนวนนิวตรอนเท่ากัน

$^{13}_{6}C$ $P^+ = 6$ $e^- = 6$ $n = 7$

$^{14}_{7}N$ $P^+ = 7$ $e^- = 7$ $n = 7$

Isobar

ไอโซบาร์ คือ อะตอมของธาตุต่างชนิดกัน แต่มีเลขมวลเท่ากัน

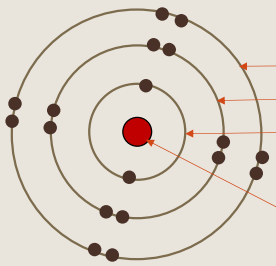
$^{14}_{6}C$ $P^+ = 6$ $e^- = 6$ $n = 8$

$^{14}_{7}N$ $P^+ = 7$ $e^- = 7$ $n = 7$

7

วงชั้นหรือระดับพลังงานของอิเล็กตรอน

สืบเนื่องจากทฤษฎีโครงสร้างอะตอมของ นีลส์ โบร์ (Niels Bohr)
อิเล็กตรอนในอะตอมจัดตัวเป็นชั้นๆ รอบนิวเคลียส อิเล็กตรอนโคจรอยู่ในระดับพลังงานของมันเองที่มีค่าแน่นอนเรียกว่า เชลล์ หรือระดับชั้น (shell)



$2n^2$

n = 3 ..... $18e^-$

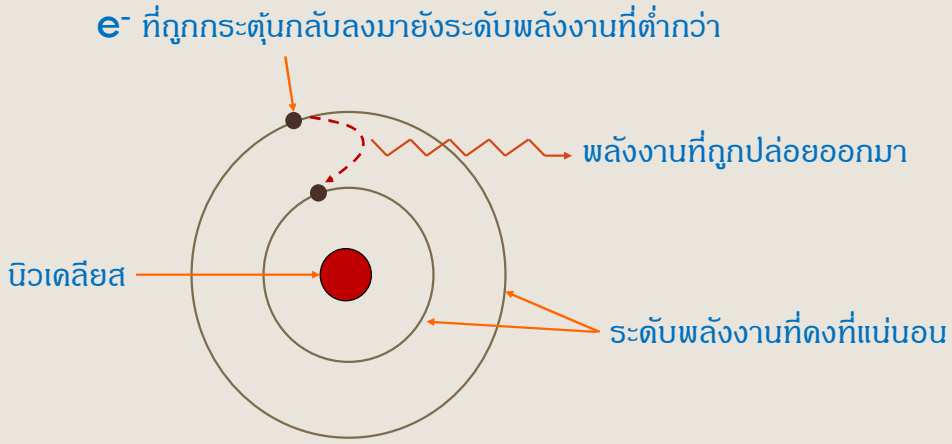
n = 2 ..... $8e^-$

n = 1 ..... $2e^-$

เลขควอนตัม = เลขที่บ่งถึงสมบัติและพลังงานของ e^- ในวงโคจร (ระดับพลังงานของ e^-)

8

นีลส์ โบร์ (Niels Bohr) อธิบายปรากฏการณ์การเกิดสเปกตรัมของอะตอม ซึ่งก็คือ ค่าพลังงานที่จะถูกปล่อยออกมาหรือถูกดูดเข้าไปของอะตอมชนิดต่าง ๆ



9

แบบจำลอง H-atom ของ Bohr

Bohr เสนอสมการหาพลังงานของอิเล็กตรอนของอะตอม H

$$E = -\frac{R_H z^2}{n^2}$$

$R_H = 2.18 \times 10^{-18}$ J หรือ 13.595 eV

Z = เลขอะตอม (จำนวนโปรตอน)

n = เลขจำนวนเต็ม (เลขควอนตัม) มีค่าตั้งแต่ 1 ถึง ∞

- พลังงานของอิเล็กตรอนในวงโคจรหนึ่งจะขึ้นกับค่า n
- เมื่อ n เท่ากับ ∞ พลังงานของอิเล็กตรอนมีค่าเป็นศูนย์
- เมื่ออิเล็กตรอนเข้าใกล้นิวเคลียสมากขึ้นจะมีพลังงานติดลบมากขึ้น

10

เมื่ออิเล็กตรอนเปลี่ยนวงโคจร จะมีการดูดหรือคายพลังงาน

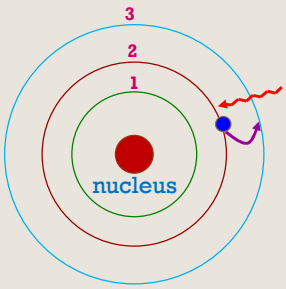
ถ้าเปลี่ยนจากระดับ n_i ไป n_f

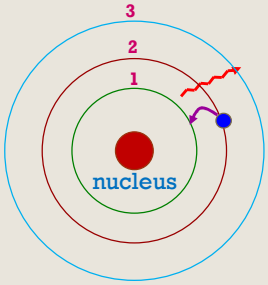
$$\Delta E = E_{nf} - E_{ni} = h\nu_{rad}$$

$E_{nf} > E_{ni}$, $\Delta E > 0$ → ดูดพลังงาน

$E_{nf} < E_{ni}$, $\Delta E < 0$ → คายพลังงาน

รับพลังงานจาก
สิ่งแวดล้อม
ดูดพลังงาน

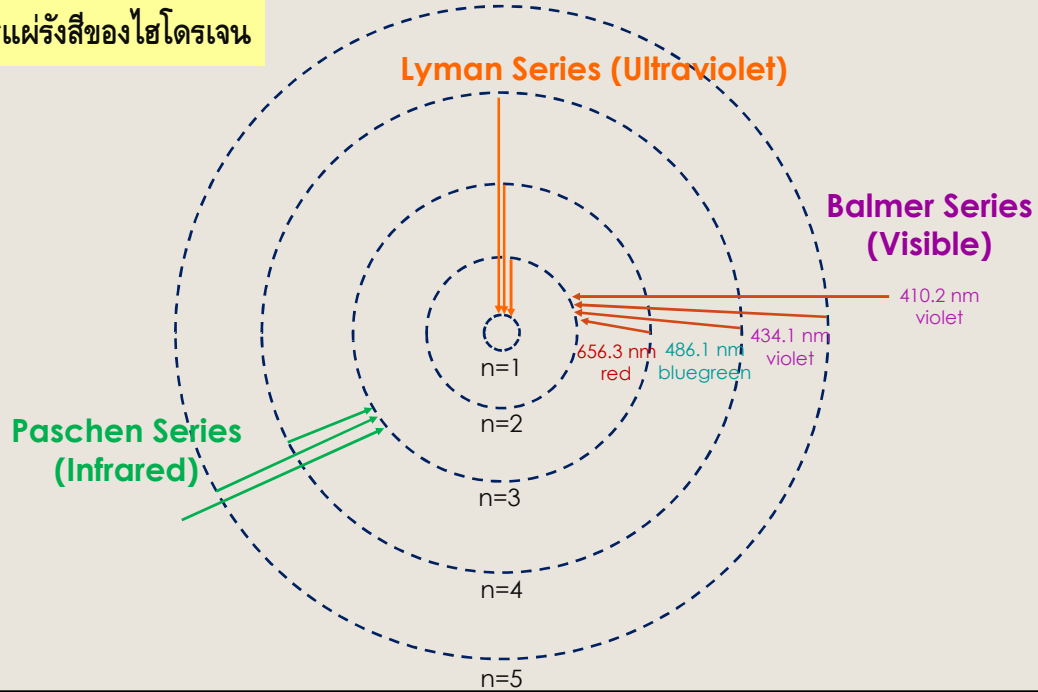




พลังงานสูญเสียให้กับ
สิ่งแวดล้อม
คายพลังงาน

11

อนุกรมการแผ่รังสีของไฮโดรเจน



12

ตัวอย่าง จงหาพลังงานที่เปล่งออกมาและความยาวคลื่นในระหว่างการเปลี่ยนสถานะจากระดับชั้นพลังงานที่ 5 (n = 5) ไปยังระดับชั้นพลังงานที่ 2 (n = 2) ของไฮโดรเจนอะตอม

$$\Delta E = E_{nf} - E_{ni}$$

จาก $E = \frac{-R_H z^2}{n^2}$

เลขอะตอมของไฮโดรเจน = 1 ดังนั้น $\Delta E = R_H[(1/n_i^2) - (1/n_f^2)]$

$n_i = 5$ และ $n_f = 2$

$$= 2.18 \times 10^{-18}\ J\ [(1/5^2) - (1/2^2)]$$

$$\Delta E = -4.58 \times 10^{-19}\ J$$

13

$$\Delta E = E_{nf} - E_{ni} = h\nu$$

จาก $\nu = c/\lambda$ ดังนั้น $\Delta E = hc/\lambda$

$$\therefore \quad \lambda = \frac{hc}{\Delta E} = \frac{(6.63\times10^{-34}\ Js)(3\times10^{8}\ m/s)}{(4.58\times10^{-19} J)}$$

$$= 4.34\times10^{-7}\ m$$

$$\lambda = 434\ nm$$

14

เลขควอนตัม

* เลขควอนตัมหลัก (principle quantum number, n)
* เลขควอนตัมโมเมนตัมเชิงมุม (orbital angular momentum quantum number, ℓ)
* เลขควอนตัมแม่เหล็ก (magnetic quantum number, m_ℓ)

} อธิบายการกระจายอิเล็กตรอนในอะตอม

* เลขควอนตัมสปิน (Spin quantum number, m_s) → บอกถึงพฤติกรรมของอิเล็กตรอนหนึ่ง ๆ

15

เลขควอนตัมหลัก (n)

n เป็นเลขจำนวนเต็ม 1, 2, 3, ….

n บอกถึง ระดับพลังงานของออร์บิทัล

n ขึ้นกับระยะเฉลี่ยระหว่างอิเล็กตรอนในออร์บิทัลหนึ่งๆ กับนิวเคลียส

ยิ่ง n มีค่ามาก ระยะเฉลี่ยจากอิเล็กตรอนในออร์บิทัลถึงนิวเคลียสยิ่งมาก

ออร์บิทัลจึงมีขนาดใหญ่ขึ้นด้วย

16

เลขควอนตัมโมเมนตัมเชิงมุม (ℓ)

บอกถึงรูปร่างของออร์บิทัล โดย ℓ ขึ้นกับค่าของ n

ℓ เป็น subshell ของ n

ℓ มีค่าตั้งแต่ 0 ถึง (n-1) ถ้า $n = 1, \ell = 0$

$n = 2, \ell = 0, 1$

$n = 3, \ell = 0, 1, 2$

ℓ	0	1	2	3	4	5
ชื่อออร์บิทัล	s	p	d	f	g	h

17

เลขควอนตัมแม่เหล็ก (m_ℓ)

m_ℓ บอกถึงแนวการจัดตัว(ทิศทาง) ของออร์บิทัล

m_ℓ ขึ้นกับค่า ℓ โดย $m_\ell = -\ell, (-\ell+1), \ldots, 0, \ldots, (\ell-1), +\ell$

$\ell = 0, m_\ell = 0$

$\ell = 1, m_\ell = -1, 0, 1$

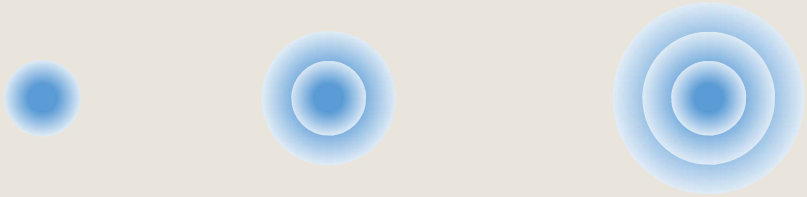
$\ell = 2, m_\ell = -2, -1, 0, 1, 2$

จำนวนค่า m_ℓ บอกถึงจำนวนออร์บิทัลในแต่ละชั้นย่อยตามค่า ℓ ที่ระบุ

ถ้า n=2, ℓ=1, m_ℓ= -1, 0, 1
ระดับพลังงานที่ 2 มีชั้นย่อยคือ 2p ออร์บิทัล จำนวน 3 ออร์บิทัล

18

s-ออร์บิทัล



ทุก ๆ เลขควอนตัม s ออร์บิทัลมีรูปร่างเป็นทรงกลมเหมือนกัน แต่ต่างกันที่ขนาดที่จะเพิ่มขึ้นตามเลขควอนตัมหลัก

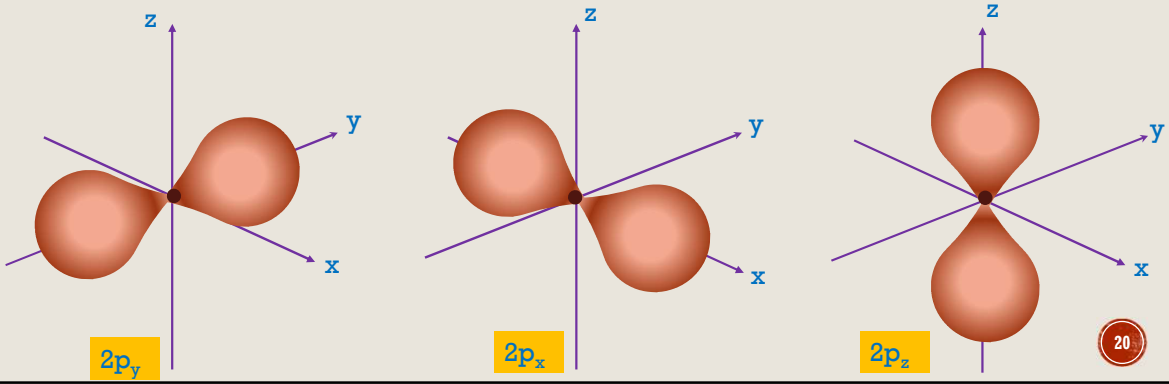
19

p-ออร์บิทัล

เริ่มมีตั้งแต่ n = 2 เป็นต้นไป

เช่น เมื่อ n = 2, ℓ =1, m_ℓ = -1, 0, 1 ได้ $2p_x$, $2p_y$ และ $2p_z$

ตัวห้อยแสดงแกนที่เป็นแนวหลักของ p ออร์บิทัล เพื่อให้เห็นว่า m_ℓ มีค่าเป็นไปได้ 3 ค่า จึงมี p ออร์บิทัล 3 ออร์บิทัลที่มีขนาดรูปร่างและพลังงานเหมือนกัน แต่มีแนวหลักต่างทิศทางกัน

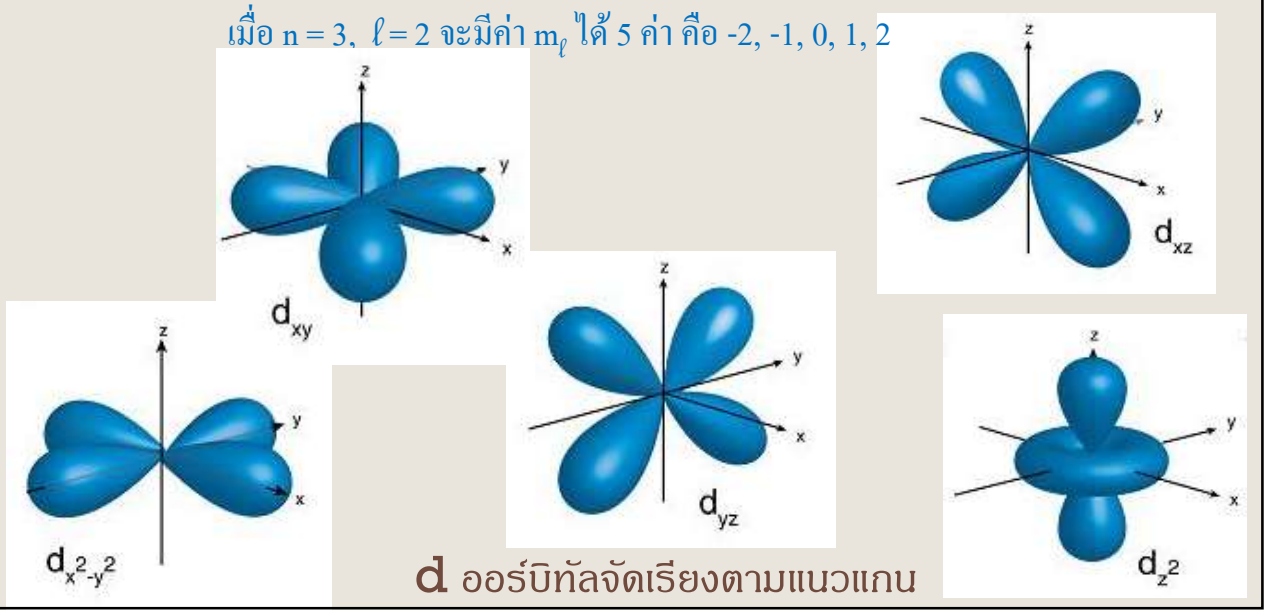


20

d-ออร์บิทัล

ค่า n ต่ำสุดที่เป็นไปได้สำหรับ d ออร์บิทัล คือ 3 จึงเริ่มจาก 3d ออร์บิทัล

เมื่อ n = 3, $\ell = 2$ จะมีค่า m_ℓ ได้ 5 ค่า คือ -2, -1, 0, 1, 2



d ออร์บิทัลจัดเรียงตามแนวแกน

ความสัมพันธ์ระหว่างเลขควอนตัมกับอะตอมมิคออร์บิทัล

n	l	m_l	จำนวนออร์บิทัล	สัญลักษณ์
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	$3d_{xy}, 3d_{xz}, 3d_{yz}, 3d_{z^2}$ $3d_{x^2-y^2}$
.	.	.	.	.
.	.	.	.	.
.	.	.	.	.

เลขควอนตัมสปิน (m_s)

* เพื่ออธิบายเส้นสเปกตรัมที่แยกออกมาเมื่อได้รับอิทธิพลสนามแม่เหล็กจากภายนอก

* โดยอธิบายว่าให้อิเล็กตรอน มีลักษณะคล้ายกับแม่เหล็กเล็กๆ ซึ่งหมุนรอบแกนกลางของตัวเอง

* ทำให้เกิดสมบัติแม่เหล็กเพราะประจุที่หมุนจะก่อให้เกิด สนามแม่เหล็ก ขึ้น

* อิเล็กตรอนหมุนรอบตัวเองได้ 2 แบบ คือ**ตามเข็มและทวนนาฬิกา** ซึ่งแทนด้วยเลขควอนตัมสปินที่มีค่าเป็น **+1/2 และ -1/2** ตามทิศทางการหมุน

ประจุที่หมุนรอบตัวให้สนามแม่เหล็กออกมา การเคลื่อนที่รูปแบบดังกล่าวทำให้อิเล็กตรอนประพฤติตัวคล้ายแท่งแม่เหล็ก

รูปแสดงการสปินหมุนตามเข็มนาฬิกาและทวนเข็มนาฬิกาของอิเล็กตรอน สนามแม่เหล็กจากการหมุนรอบตัวนี้คล้ายกับที่เกิดจากแท่งแม่เหล็ก

พลังงานออร์บิทัลของระบบอิเล็กตรอนเดี่ยว

$$E = \frac{-kZ^2}{n^2}$$

Z มีค่าคงที่สำหรับนิวเคลียสใด ๆ

พลังงานออร์บิทัลของระบบขึ้นกับค่า n

เมื่อมีแรงดึงดูดสู่นิวเคลียสจะทำให้พลังงานลดลงและเพิ่มเสถียรภาพมากขึ้น

เสถียรภาพสัมพัทธ์ (relative stabilities) ของออร์บิทัลเป็นดังนี้

1s > 2s = 2p > 3s = 3p = 3d > 4s = 4p = 4d = 4f > ...

25

ระบบอิเล็กตรอนหลายตัว : การผ่านทะลุและกำบัง (Penetration and Shielding)

ระบบที่มี e^- > 2 ตัว จะเกิด Electron-electron repulsion

ทำให้ออร์บิทัล s, p ,d และ f ของชั้นเดียวกันมีพลังงานต่างกัน

แรงดึงดูดที่อิเล็กตรอนกับนิวเคลียสจึงแตกต่างกัน เรียกแรงที่เกิดจากนิวเคลียสกระทำกับอิเล็กตรอนแต่ละตัวว่า effective nuclear charge, Z^* ซึ่งสามารถคำนวณแรงที่เกิดขึ้นโดยประมาณใช้กฎของ Slater (Slater's rule) ซึ่งหาได้จากความสัมพันธ์

$$Z^* = Z - S$$

Z* คือ Effective nuclear charge

Z คือ เลขอะตอมของอะตอมที่พิจารณา

S (screening หรือ shielding constant) คือ ค่าการบดแบ่งของแต่ละออร์บิทัล

26

ซึ่งการบดบดบังสามารถหาได้โดยประมาณดังนี้

1) ให้จัดเรียงอิเล็กตรอนและจัดกลุ่มของการบดบังดังนี้:

(1s), (2s, 2p), (3s, 3p), (3d), (4s, 4p), (4d), (4f), (5s, 5p) etc.

2) อิเล็กตรอนที่อยู่กลุ่มที่สูงกว่าจะไม่บดบังอิเล็กตรอนที่พิจารณา

3) กรณีของ ns หรือ np ของออร์บิทัลสามารถคำนวณได้ดังนี้

i) อิเล็กตรอนแต่ละตัวในกลุ่ม (ns, np) จะบดบัง S = 0.35

ii) อิเล็กตรอนในชั้น (n-1) จะบดบัง S = 0.85

iii) อิเล็กตรอนในชั้น (n-2) และต่ำกว่าจะบดบัง S = 1.00

4) อิเล็กตรอนในออร์บิทัล nd หรือ nf สามารถพิจารณาได้ดังนี้

i) อิเล็กตรอนแต่ละตัวในกลุ่ม nd หรือ nf จะบดบัง S = 0.35

ii) อิเล็กตรอนที่อยู่ในกลุ่มที่ต่ำกว่าจะบดบัง S = 1.00

27

การประยุกต์ใช้ Slater's rules

เช่น ผลการจัดเรียงอิเล็กตรอนของ K ที่จัดเรียงแบบ $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^1$ มีความเสถียรมากกว่าการจัดเรียงอิเล็กตรอนแบบ $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^1$

ตัวอย่างการคำนวณโดยใช้ Slater's rule

เช่น หากต้องการคำนวณหาเวเลนซ์อิเล็กตรอนของ N (เลขอะตอม 7) สามารถหาได้ดังนี้

จัดกลุ่มอิเล็กตรอนได้ $(1s)^2\ (2s,2p)^5$

ฉะนั้นสามารถคำนวณหา shielding constant ได้

$S = (2 \times 0.85) + (4 \times 0.35) = 3.10$

จาก $Z^* = Z - S$

จะได้ $Z^* = 7.0 - 3.1 = 3.9$

ดังนั้น อิเล็คตรอน 6 ตัวในวงจะบดบังอิเล็คตรอน ใน 2p orbital ซึ่งอยู่ในวงนอก ซึ่งจะได้รับ Z^* ประมาณ 3.9 จากนิวเคลียส

28

สามารถคำนวณแรงดึงดูดของอิเล็กตรอนกับนิวเคลียสที่อยู่ในชั้นใด ๆ ของอะตอมได้

เช่น คำนวณอิเล็กตรอนในชั้น 3d ของ Zn (Z = 30)

จัดกลุ่มอิเล็กตรอนได้ $(1s)^2\ (2s,2p)^8\ (3s,3p)^8\ (3d)^{10}\ (4s)^2$

หากเรา*พิจารณาเวเลนซ์*จะได้

S = (10 x 1.00) + (18 x 0.85) + (1.0 x 0.35) = 25.65

Z* = Z – S = 30 - 25.65 = 4.35

Z* ของอิเล็คตรอนใน 4s orbital ของ Zn = 4.35

แต่หาก*พิจารณาจากชั้น 3d* จะได้

S = (18 x 1.00) + (9 x 0.35) = 21.15

Z* = Z – S = 30 - 21.15 = 8.85

Z* ของอิเล็คตรอนใน 3d orbital ของ Zn = 8.85

เมื่อพิจาณาแรงดึงดูดอิเล็กตรอนกับนิวเคลียสพบว่า แรงดึงดูดอิเล็กตรอนในชั้น 3d ดึงดูดกับนิวเคลียสได้มากกว่าเวเลนซ์อิเล็กตรอน ดังนั้นเมื่อ Zn เกิด ionization เป็น Zn^{2+}

e^- ใน 4s จะหลุดออกก่อนดังนี้ $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^{10}$ หรือ [Ar] $3d^{10}$

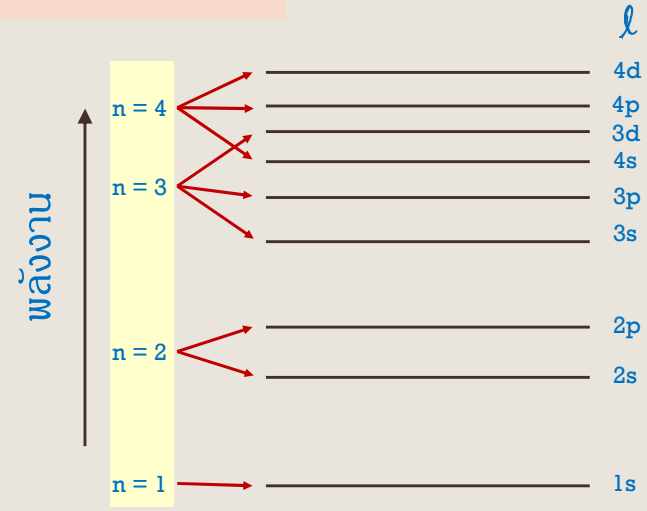
ลำดับของเสียรภาพของออร์บิทัลสำหรับระบบหลาย e^- เป็นดังนี้

s > p > d > f

1s > 2s > 2p > 3s > 4s ≈ 3d > 4p > 5s ≈ 4d > 5p ...

29

พลังงานของออร์บิทัล



แผนภาพแสดงการจัดเรียงของซับเชลล์

* ระดับ**พลังงานของ 3d จะใกล้เคียงกับ 4s** มาก เนื่องจากพลังงานรวมของอะตอมขึ้นกับแรงผลักระหว่างอิเล็กตรอนด้วย

* พลังงานรวมของอะตอมจะต่ำกว่า ถ้าบรรจุอิเล็กตรอนในวงย่อย 4s ก่อน 3d เนื่องจากอิเล็กตรอนที่เข้าคู่กันโดยมีสปินตรงข้ามกันจะมีแรงผลักน้อยกว่าอิเล็กตรอน 2 อิเล็กตรอนที่มีสปินเหมือนกัน

30

การบรรจุอิเล็กตรอนในออร์บิทัล

หลักการกีดกันของเพาลี

กรณีอะตอมที่มีอิเล็กตรอนมากกว่าหนึ่ง หลักนี้กล่าวว่า **ไม่มีอิเล็กตรอนคู่หนึ่งคู่ใดในอะตอมเดียวกันที่มีเลขควอนตัมทั้งสี่เหมือนกันหมด**

กล่าวคือหากอิเล็กตรอนคู่หนึ่งในออร์บิทัลมีค่า n, ℓ และ m_ℓ เท่ากันแล้ว ค่า m_s ต้องต่างกัน

เช่น **He**

(a) (b) (c)

He $1s^2$

สมบัติไดอะแมกเนติกและพาราแมกเนติก

สาร**พาราแมกเนติก**คือ สารที่มีสปินเดี่ยวไม่เข้าคู่ และดึงดูดกับแม่เหล็ก

สาร**ไดอะแมกเนติก**คือ สารที่ไม่มีสปินเดี่ยวหรืออิเล็กตรอนจับคู่กันในทิศตรงข้ามกันและมีแรงผลักน้อยกับแม่เหล็ก

เช่น Li (z=3)

Be (z=4)

กฎของฮุนด์ (Hund's rule)

การจัดอิเล็กตรอนในชั้นย่อยที่เสถียรที่สุดคือ การบรรจุอิเล็กตรอนในออร์บิทัลที่มีระดับพลังงานเท่ากัน (degenerate) จะบรรจุให้มีจำนวนอิเล็กตรอนเดี่ยวมากที่สุดเท่าที่จะมากได้

เช่น $2p^4$

$3d^5$

$3d^8$

33

หลักเอาฟบาว (Aufbau principle)

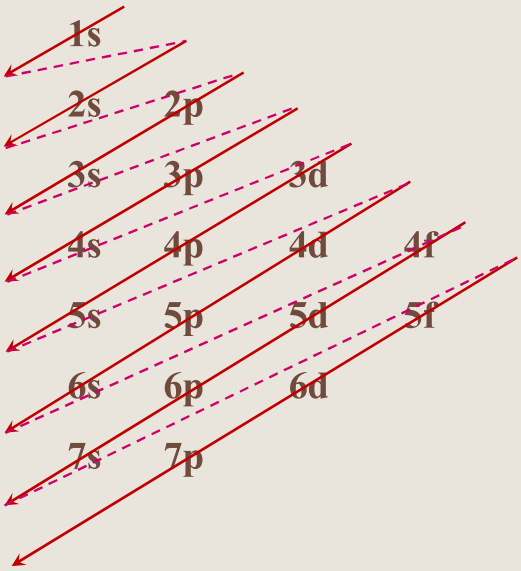
กล่าวว่า เมื่อโปรตอนถูกเติมไปยังนิวเคลียสครั้งละหนึ่งตัวเพื่อสร้างธาตุใหม่ อิเล็กตรอนจะถูกเติมไปยังอะตอมมิคออร์บิทัลเช่นกัน สรุปคือ **เป็นหลักการวางอิเล็กตรอนเพื่อสร้างอะตอม** โดยอาศัยหลักดังนี้

1. ใช้หลักของเพาลี ในการบรรจุอิเล็กตรอน คือ ในแต่ละออร์บิทัลจะบรรจุอิเล็กตรอนได้อย่างมากที่สุด 2 ตัว (มีสปินต่างกัน) เรียกอิเล็กตรอนคู่ (paired electron)

ถ้ามีอิเล็กตรอนเพียงครึ่งหนึ่งนิยมเขียนเป็นสปินขึ้น (spin up) และเรียกว่าอิเล็กตรอนเดี่ยว (unpaired electron)

2. บรรจุอิเล็กตรอนในออร์บิทัลที่มีระดับพลังงานต่ำสุดที่ยังว่างก่อน (เรียงลำดับออร์บิทัลตามลูกศรในรูป) จนครบจำนวนอิเล็กตรอนทั้งหมดในอะตอมนั้น การจัดเรียงอิเล็กตรอนแบบนี้จะทำให้อะตอมมีสถานะเสถียรที่สุดเพราะพลังงานรวมทั้งหมดของอะตอมมีค่าต่ำสุด

34



ตัวอย่าง

Al (z=13)

$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^1$

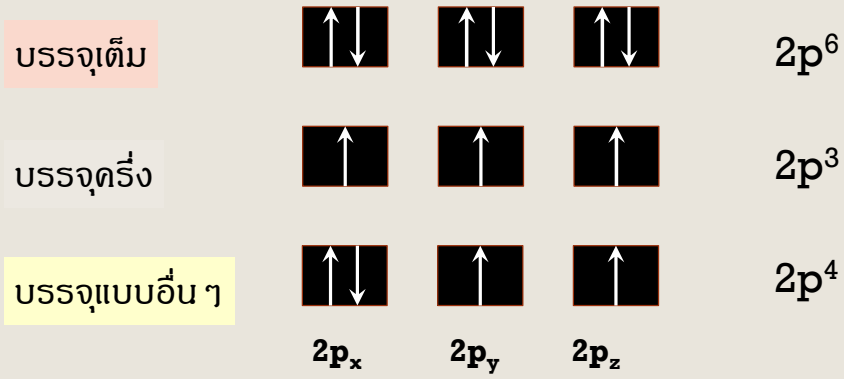
Sc (z=21)

$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^2\ 3d^1$

35

3. ถ้ามีออร์บิทัลที่มีพลังงานมากกว่าหนึ่งขึ้นไป การบรรจุอิเล็กตรอนให้อาศัยกฎของฮุนด์

4. การบรรจุเต็มและบรรจุครึ่งจะมีเสถียรภาพมากกว่าแบบอื่น



$2p^6$ เสถียรกว่า $2p^3$ แต่ $2p^3$ เสถียรกว่า $2p^4$

36

การจัดอิเล็กตรอนในทุกธาตุยกเว้นไฮโดรเจนและฮีเลียมจะแสดงในรูปแกนแก๊สเฉื่อย (noble gas core)

เช่น Ar (z=18) → $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6$

Outer electron หรือ Valence electron

K (z=19) → $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^1$ → [Ar] $4s^1$

Ar core configuration

Cr (z=24) → [Ar] $4s^1\ 3d^5$

แผนภาพออร์บิทัล → [Ar]

$4s^1$ **$3d^5$**

37

Cu (z=29) → [Ar]$4s^1\ 3d^{10}$

แผนภาพออร์บิทัล → [Ar]

$4s^1$ **$3d^{10}$**

Rb (z=37) → [Kr]$5s^1$

แผนภาพออร์บิทัล → [Kr]

$5s^1$

เลขควอนตัมทั้งสี่ของอิเล็กตรอนใน 5s ออร์บิทัล คือ ?

n=5, ℓ=0, m_ℓ=0, m_s= +1/2 → (5, 0, 0, +1/2)

38

เคมีกับการใช้งาน: อะตอมและอิเล็กตรอน

γ (gamma-rays)

$$^{59}_{27}Co + ^{1}_{0}n \longrightarrow ^{60}_{27}Co \longrightarrow ^{60}_{28}Ni + ^{0}_{-1}e + \gamma$$

^{60}Co ได้จากการใช้อนุภาคนิวตรอน (neutron) ยิงเข้า ไปยัง ^{59}Co ภายในถังปฏิกรณ์นิวเคลียร์ (nuclear reactor) เมื่อ ^{60}Co สลายตัวจะปล่อยรังสีแกมมาออกมาโดยมีพลังงาน 1.17 และ 1.33 เมกะอิเลคตรอนโวลต์ (MeV) และเมื่อรังสีหมดสิ้นแล้วจะกลายเป็นธาตุนิกเกิล (nickel) ซึ่งไม่เป็นสารกัมมันตรังสี

^{60}Co มีครึ่งชีวิต (half life) 5.3 ปี โดยมีพลังงานรังสีลดลง 12.5% ต่อปีและพลังงานที่ปลดปล่อยออกมาจะกระจายทุกทิศทางและดูดซับเข้าไปในวัตถุที่นำมาฉายรังสีได้เพียง 10 – 30 % เท่านั้น

นอกจากการใช้ถนอมอาหารแล้ว การฉายรังสีแกมมายังใช้ในการเปลี่ยนสีอัญมณีได้ด้วยเช่น **Tourmaline** ในทางการแพทย์ใช้รังสีแกมมาทำลายเซลล์มะเร็ง

ทัวมาลีนฉายรังสีแกมมา

39

Term Symbol

เมื่อมีหลาย e- อยู่ด้วยกันในอะตอมหรือไอออนสภาวะรวมที่เกิดขึ้น จะอธิบายด้วยเลขควอนตัมชุดเดิมไม่ได้ (n, l, m_l, m_s) เนื่องจาก e- เกิดการ coupling กัน จึงเกิดแรงกระทำระหว่าง e- อันเนื่องมาจากการที่ e- แต่ละตัวหมุนรอบนิวเคลียส (M_L) และการที่ e- หมุนรอบตัวเองหรือ spin (M_S) ดังนั้นจึงมีเลขควอนตัมชุดใหม่สำหรับอะตอมหรือไอออนโดยใช้สัญลักษณ์เป็นอักษรตัวพิมพ์ใหญ่ เช่น L, M_L, S, M_S

$^{2s+1}L_J$ หรือ ^{2s+1}L

L = Total orbital angular momentum --- ผลของ orbit – orbit coupling

S = Total spin angular momentum --- ผลของ spin – spin coupling

J = Total angular momentum --- ผลของ spin – orbit coupling

40

Term Symbol

L	0	1	2	3	4	5
state	S	P	D	F	G	H

orbital angular momentum

spin multiplicity ⟹ $^{2S+1}L_J$ ⟸ { L = 0 S term; L = 1 P term; L = 2 D term; L = 3 F term }

spin orbit coupling ⟹ J = L+S , L+S-1...|L-S|

S = 0 spin multiplicity = 1 (singlet)

S = ½ spin multiplicity = 2 (doublet)

เช่น e- เดี่ยวหนึ่งตัว $m_s = +1/2$ หรือ $m_s = -1/2$

ดังนั้น $s = ½$ $S = ½$

เพราะฉะนั้น $2S + 1 = 2$

$$J = L + S, L + S-1, L +S-2, \ldots, |L - S|$$

เป็นการคู่ควบที่ได้จากผลของสปินและออร์บิทัลรวมกันเรียกว่า **การคู่ควบรัสเซลล์-ซอนเดอร์** (Russell-Saunder) ปกติไม่ค่อยนิยมระบุค่า J ใน term symbol เว้นแต่อะตอมอยู่ในสนามแม่เหล็ก

41

การหา Ground term ที่มีระดับพลังงานต่ำสุด (อย่างเร็ว)

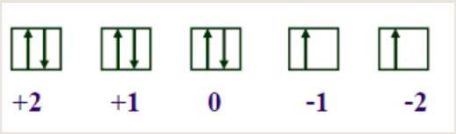
สำหรับ e- configuration 1 แบบ เราสามารถหา term symbol ที่มีระดับพลังงานต่ำสุด โดยไม่ต้องทำ microstate chart ได้โดยใช้กฎของฮุนด์ดังนี้

(1) จัดให้เวเลนซ์ e- อยู่แยกกันมากที่สุดที่จะทำได้ ในออร์บิทัลชุดที่กำหนด เพื่อให้ได้ total spin, S สูงสุด

(2) หาว่าการเรียง e- ในลักษณะดังกล่าวได้ค่า M_L สูงสุดเท่าใด ให้ใช้ตัวเลขนั้นเป็นค่า L ได้เลย

ตัวอย่าง การหา Ground term ของ Ni^{2+}

Ni^{2+} ⟹ $[Ar]\ 3d^8$



M_s สูงสุด คือ +1 (ค่าที่เป็นไปได้ 1, 0, -1) ⟹ S = +1

M_L สูงสุด คือ +3 (ค่าที่เป็นไปได้ 3, 2,…, -3) ⟹ L = +3

42

L = +3 symbol คือ F

2S + 1 = 2(1) + 1 = 3

J = [(3+1), (3+(1-1)), (3-1)] = 4, 3, 2

เนื่องจาก Ni^{2+} มี e- เกินครึ่ง ดังนั้น J ค่าสูง จะ *มีระดับพลังงานต่ำ*
เพราะฉะนั้น Ground state คือ $^3F_4$

ค่า J ที่น้อยที่สุด (minimum) จะเสถียรที่สุดในชั้นที่มี e- น้อยกว่าครึ่ง
ค่า J ที่มากที่สุด (maximum) จะเสถียรที่สุดในชั้นที่มี e- มากกว่าครึ่ง

43