

โครงสร้างอะตอม (Atomic structure)

คม 100 เคมีทั่วไป (2/2564)

1.1 โมเดลอะตอมแบบต่างๆ

1.2 อนุภาคต่างๆในอะตอม

1.3 ทฤษฎีอะตอมของบอร์ห์และสเปกตรัมของธาตุไฮโดรเจน

1.4 กลศาสตร์คลื่น

1.5 เลขควอนตัมต่างๆ

1.6 การจัดเรียงอิเล็กตรอนของธาตุในตารางธาตุ

รัชดาภรณ์ ปันทะรส

สาขาวิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยแม่โจ้

email: ratchadaporn_p@mju.ac.th www.chemistry.mju.ac.th

IUPAC Periodic Table of the Elements

1 H hydrogen [1.007, 1.009]																	18 He helium 4.003
3 Li lithium [6.938, 6.997]	4 Be beryllium 9.012											5 B boron [10.80, 10.83]	6 C carbon [12.00, 12.02]	7 N nitrogen [14.00, 14.01]	8 O oxygen [15.99, 16.00]	9 F fluorine 19.00	10 Ne neon 20.18
11 Na sodium 22.99	12 Mg magnesium [24.30, 24.31]											13 Al aluminium 26.98	14 Si silicon [28.08, 28.09]	15 P phosphorus 30.97	16 S sulfur [32.05, 32.08]	17 Cl chlorine [35.44, 35.46]	18 Ar argon 39.95
19 K potassium 39.10	20 Ca calcium 40.08	21 Sc scandium 44.96	22 Ti titanium 47.87	23 V vanadium 50.94	24 Cr chromium 52.00	25 Mn manganese 54.94	26 Fe iron 55.85	27 Co cobalt 58.93	28 Ni nickel 58.69	29 Cu copper 63.55	30 Zn zinc 65.38(2)	31 Ga gallium 69.72	32 Ge germanium 72.63	33 As arsenic 74.92	34 Se selenium 78.96(3)	35 Br bromine [79.90, 79.91]	36 Kr krypton 83.80
37 Rb rubidium 85.47	38 Sr strontium 87.62	39 Y yttrium 88.91	40 Zr zirconium 91.22	41 Nb niobium 92.91	42 Mo molybdenum 95.96(2)	43 Tc technetium	44 Ru ruthenium 101.1	45 Rh rhodium 102.9	46 Pd palladium 106.4	47 Ag silver 107.9	48 Cd cadmium 112.4	49 In indium 114.8	50 Sn tin 118.7	51 Sb antimony 121.8	52 Te tellurium 127.6	53 I iodine 126.9	54 Xe xenon 131.3
55 Cs caesium 132.9	56 Ba barium 137.3	57-71 lanthanoids	72 Hf hafnium 178.5	73 Ta tantalum 180.9	74 W tungsten 183.8	75 Re rhenium 186.2	76 Os osmium 190.2	77 Ir iridium 192.2	78 Pt platinum 195.1	79 Au gold 197.0	80 Hg mercury 200.6	81 Tl thallium [204.3, 204.4]	82 Pb lead 207.2	83 Bi bismuth 209.0	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 oganesson

57 La lanthanum 138.9	58 Ce cerium 140.1	59 Pr praseodymium 140.9	60 Nd neodymium 144.2	61 Pm promethium	62 Sm samarium 150.4	63 Eu europium 152.0	64 Gd gadolinium 157.3	65 Tb terbium 158.9	66 Dy dysprosium 162.5	67 Ho holmium 164.9	68 Er erbium 167.3	69 Tm thulium 168.9	70 Yb ytterbium 173.1	71 Lu lutetium 175.0
89 Ac actinium	90 Th thorium 232.0	91 Pa protactinium 231.0	92 U uranium 238.0	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

'Nihonium' 'Nh' for 113

International Union of Pure and Applied Chemistry / Sci-News.com.

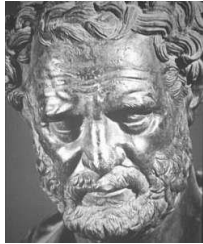
'Moscovium' 'Mc' for 115

'Tennessine' 'Ts' for 117

'Oganesson' 'Og' for 118

1.1 โมเดลอะตอมแบบต่างๆ

460 BC



Democritus develops the idea of atoms **ATOMA** (*greek for indivisible*)

- อะตอมเป็นส่วนประกอบที่เล็กที่สุดของสาร ทำลายและแบ่งแยกไม่ได้
- ค้นพบคุณสมบัติของสารใหม่หลายอย่าง เช่น ทอง เหล็ก ออริกัล
- พัฒนาเทคนิคการทดลอง เช่น การกลั่น การระเหิด การตกผลึก

1808

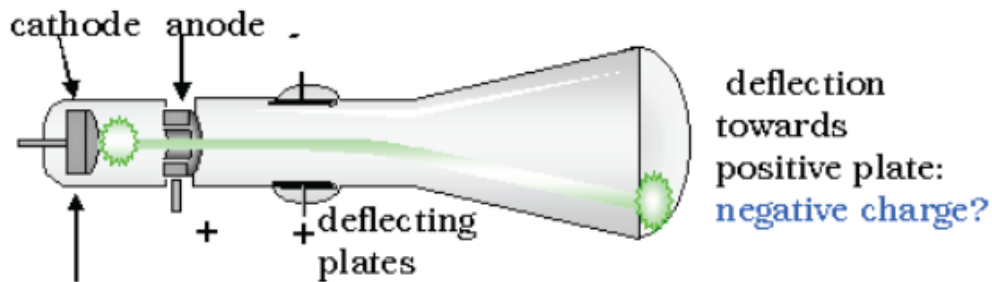


John Dalton “ATOMS”

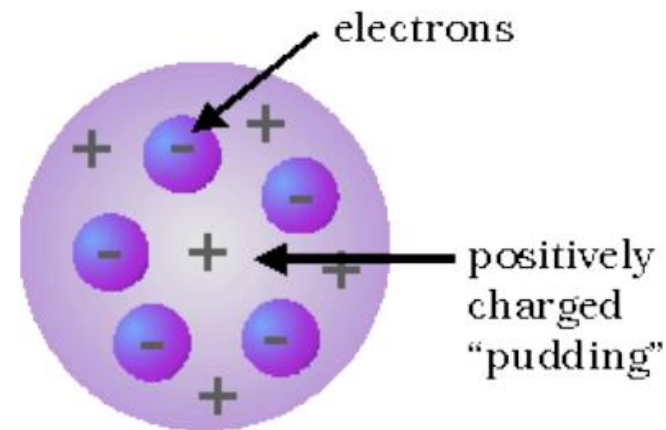
- อะตอมคือธาตุที่ประกอบด้วยอนุภาคที่เล็กมากและแบ่งแยกต่อไปอีกไม่ได้
- อะตอมของธาตุชนิดเดียวกันจะเหมือนกัน และต่างจากอะตอมของธาตุชนิดอื่น

- อะตอมของธาตุต่างชนิดกันจะรวมตัวกันด้วยอัตราส่วนอย่างต่ำที่ลงตัวง่ายๆ เกิดเป็นสารประกอบชนิดต่างๆ เช่น H_2O (H:O = 2:1)
- ถ้าธาตุสามารถเกิดเป็นสารประกอบได้มากกว่า 1 ชนิด สารประกอบแต่ละชนิดจะมีอัตราส่วนโดยมวลและโดยอะตอมแตกต่างกัน เช่น C_2O (C:O = 2:1) CO (C:O = 1:1)
- ปฏิกิริยาเคมีเกี่ยวข้องกับ การแยก การรวมและการจัดอะตอมใหม่เท่านั้น ไม่มีการสร้างหรือทำลายอะตอม

Joseph J. Thomson (1879) (Atomic structure)



หลอดรังสีแคโทด (cathode ray)



- ได้ตั้งสมมติฐานว่ารังสีแคโทดประกอบด้วยอนุภาคที่มีชื่อว่าอิเล็กตรอน
- จึงได้ศึกษาพฤติกรรมของหลอดรังสีแคโทดในสนามแม่เหล็กไฟฟ้า โดยค้นพบอิเล็กตรอนมีประจุไฟฟ้าลบ ค่า e/m ของอิเล็กตรอนมีค่ามากกว่าของโปรตอน ประมาณ 1000 เท่า
- ประจุของอิเล็กตรอนอาจมากกว่าของโปรตอนหรือน้ำหนักของอิเล็กตรอนน้อยกว่า

R.A. Mullikan (1909) ได้ทำการทดลองพบว่า

- ค่าประจุของอิเล็กตรอน เท่ากับ 1.6×10^{-19} คูลอมป์
- มวลเท่ากับ 9.11×10^{-31} kg ซึ่งเบากว่าโปรตอน 1/2000 เท่า (มวลโปรตอน 1.67×10^{-27} kg)

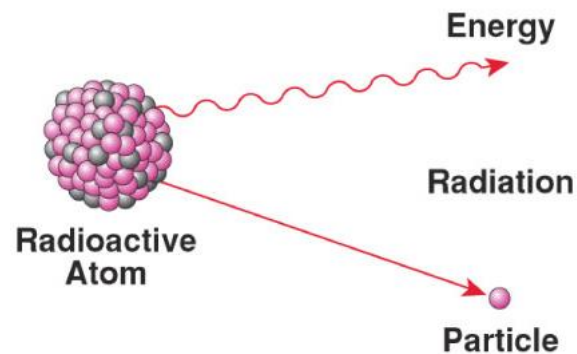
อะตอมไม่ใช่สิ่งทีเล็กที่สุด แต่อะตอมประกอบด้วยอิเล็กตรอนและอนุภาคอื่น

1.2 อนุภาคต่างๆในอะตอม

การค้นพบที่ส่งเสริมวิวัฒนาการของทฤษฎีอะตอมยุคใหม่

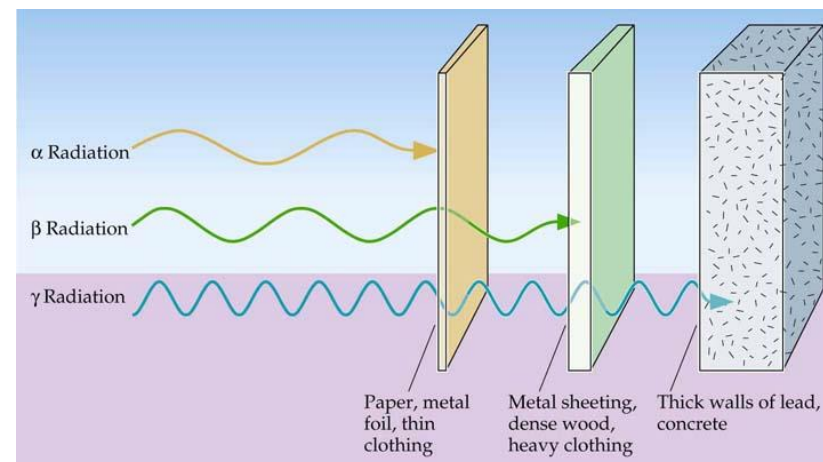
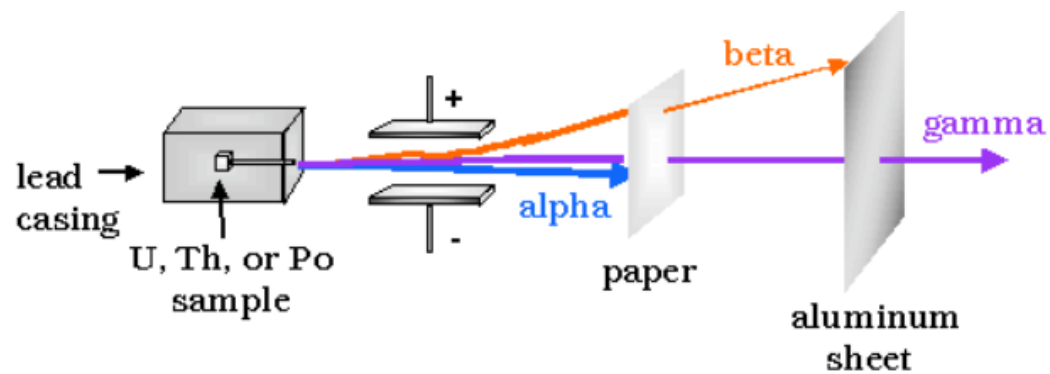
Pierre และ Marie Curie (1898)

Radioactive Decay of an Atom

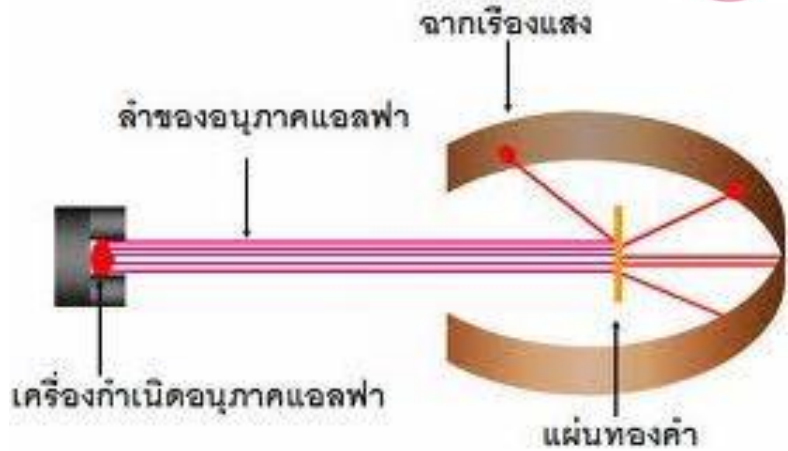


- ธาตุกัมมันตรังสีมีการแตกตัวแล้วเปล่งแสงออกมา ได้อะตอมชนิดอื่นและอนุภาค
- ดังนั้น อะตอมจึงไม่ใช่อนุภาคที่แบ่งแยกไม่ได้

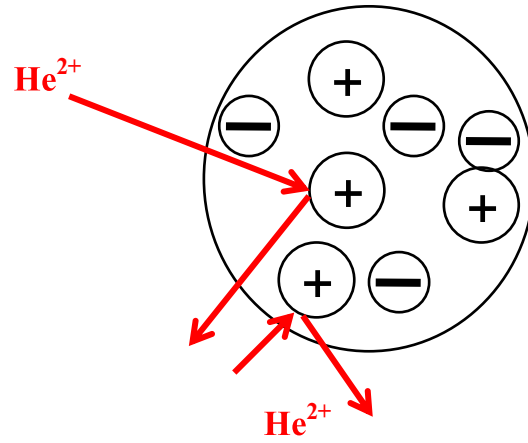
Ernest Rutherford (1910)



Ernest Rutherford, 1910

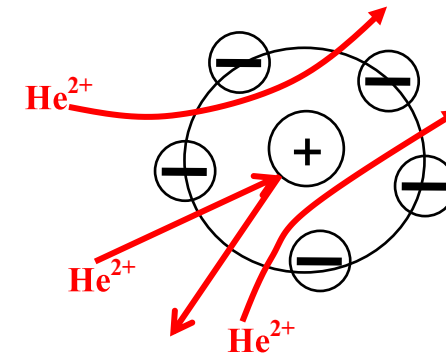


Thomson



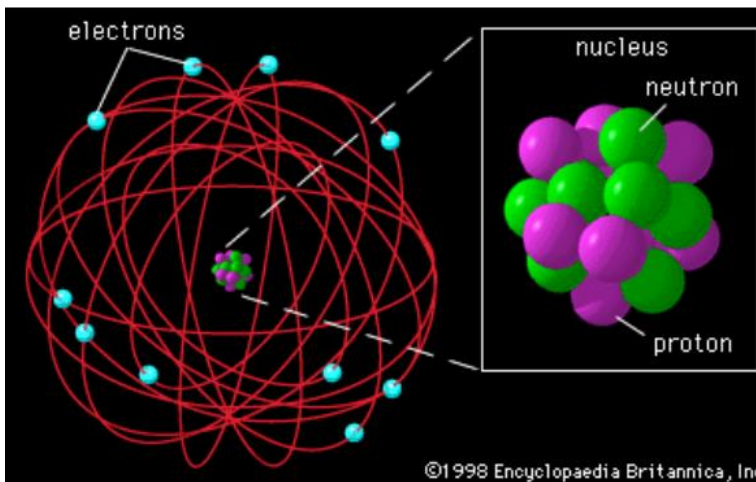
จากการทดลองของ

Rutherford



หากแบบจำลองอะตอมเป็นไปตามของทอมสัน รังสีทั้งหมดควรกระเจิงหรือสะท้อนกลับทางเดิมเนื่องจากเกิดการชนและผลักระหว่างอนุภาคแอลฟา (He^{2+}) และนิวเคลียส

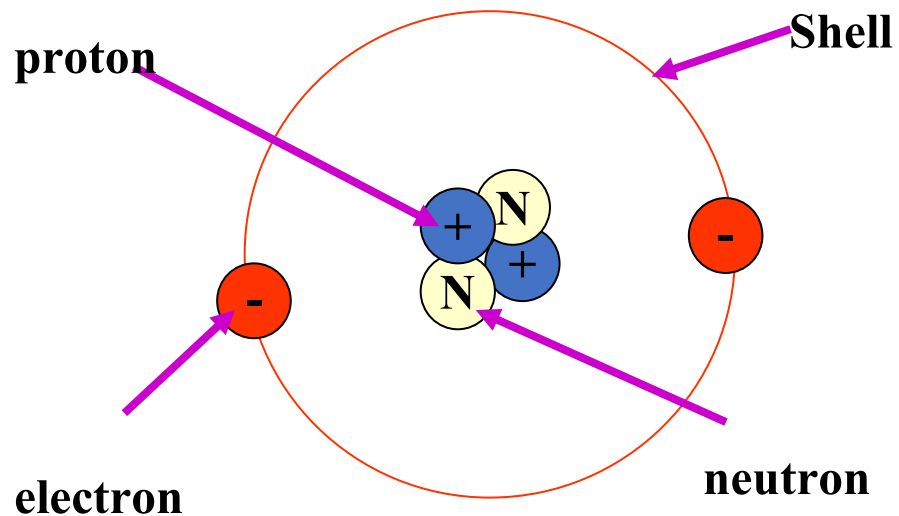
แต่กลับพบว่ารังสีแอลฟาส่วนใหญ่สามารถวิ่งผ่านได้เป็นจำนวนมาก มีเพียงส่วนน้อยที่เป็นกระเจิงหรือสะท้อนกลับทางเดิม



แบบจำลองอะตอมของรัทเทอร์ฟอร์ด: อะตอมประกอบด้วยนิวเคลียสซึ่งเป็นอนุภาคประจุบวกที่รวมตัวเป็นกลุ่มอยู่ตรงกลาง และมีอิเล็กตรอนเคลื่อนที่เป็นวงล้อมรอบ จำนวนอิเล็กตรอนเท่ากับจำนวนประจุบวกในนิวเคลียส

The particles consist of

Helium atom: He



Particles	Symbol	Charge	Coulombs	Weight	
				kg	amu
Electron	e^-	-1	1.6×10^{-19}	9.1094×10^{-31}	0.000549
Proton	p^+	+1	1.6×10^{-19}	1.6726×10^{-27}	1
Neutron	n^0	0	0	1.6726×10^{-27}	1

amu = atomic mass unit

1 amu = 1.67×10^{-27} kg

อะตอมของธาตุแต่ละชนิดมีจำนวนโปรตอนไม่เท่ากัน

อะตอม	จำนวนโปรตอน	จำนวนอิเล็กตรอน	จำนวนนิวตรอน	เลขมวลอะตอม
H	1	1	0	1
C	6	6	6	12
K	19	19	20	39

สัญลักษณ์ของธาตุ A_ZX

X = ชนิดของธาตุ

A = เลขมวลอะตอม = จำนวนโปรตอน + จำนวนนิวตรอน = จำนวนนิวคลีออน $\rightarrow A = Z + n$

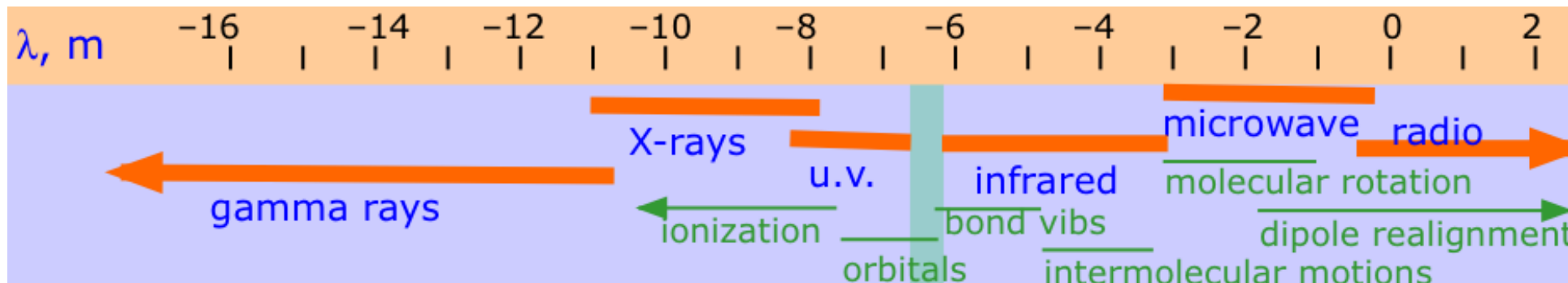
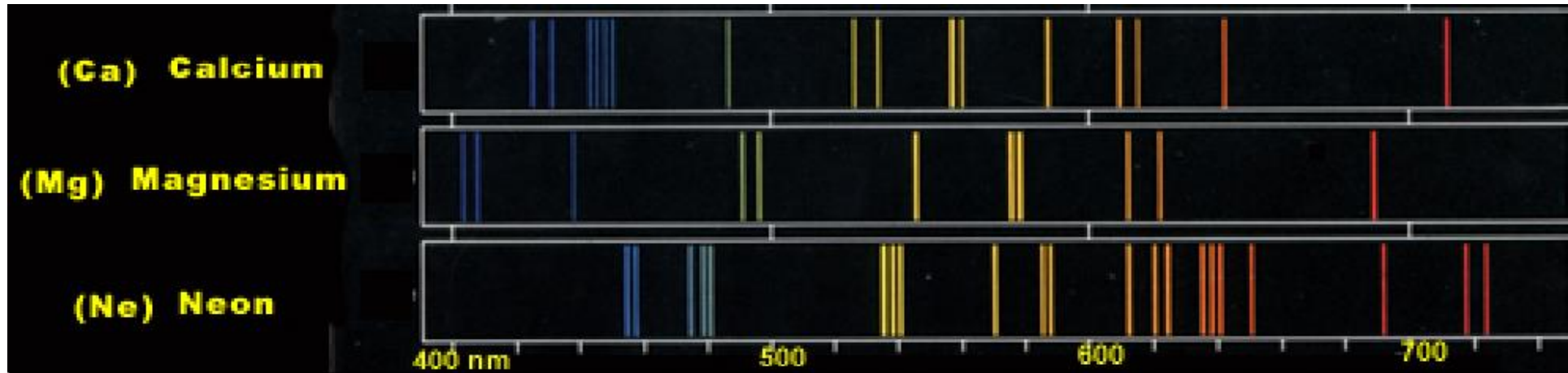
Z = เลขอะตอม = จำนวนโปรตอน = จำนวนอิเล็กตรอน

อะตอม	จำนวนโปรตอน	จำนวนอิเล็กตรอน	จำนวนนิวตรอน	เลขอะตอม	เลขมวลอะตอม
${}_{13}^{27}\text{Al}$					
${}_{17}^{35}\text{Cl}$					
${}_{17}^{36}\text{Cl}$					
${}_{20}^{40}\text{Ca}$					

อะตอม	จำนวนโปรตอน	จำนวนอิเล็กตรอน
${}_{16}\text{S}^{2-}$		
${}_{34}\text{Se}^{2-}$		
${}_{56}\text{Ba}^{2+}$		
${}_{19}\text{K}^{+}$		

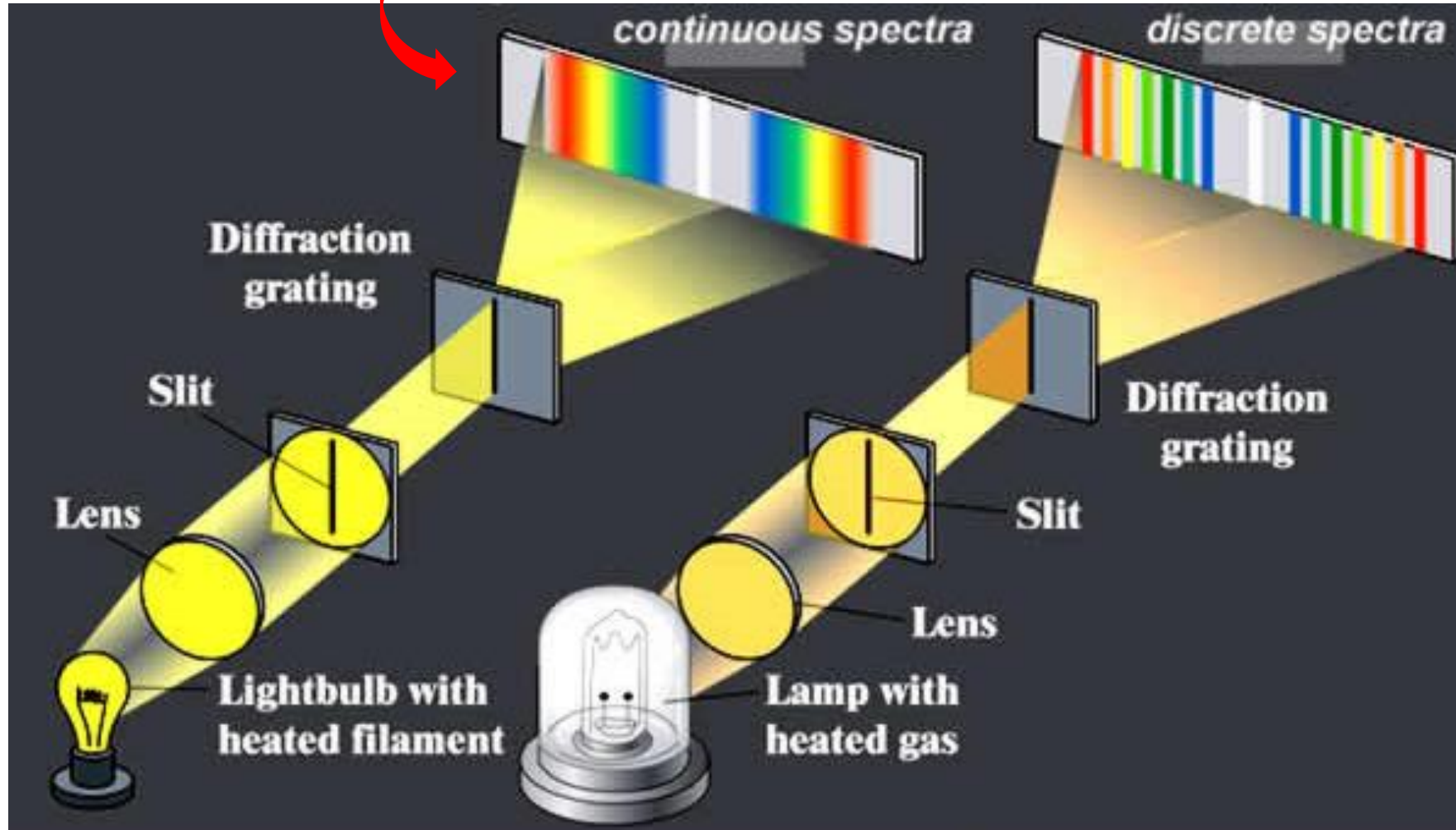
ทฤษฎีอะตอมสมัยใหม่

Max Plank ศึกษาข้อมูลการแผ่รังสีของของแข็งเมื่อได้รับความร้อน พบว่าอะตอมและโมเลกุลปลดปล่อยพลังงานเป็นปริมาณไม่ต่อเนื่อง แต่มีค่าแน่นอน เรียกว่า quanta ซึ่งในขณะนั้น นักฟิสิกส์ทั่วไปมีสมมติฐานว่าค่าพลังงานรังสีต่างๆเป็นค่าต่อเนื่อง เช่น คลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าชนิดต่างๆ



นักฟิสิกส์ทั่วไปมีสมมติฐานว่าค่าพลังงาน
รังสีต่างๆเป็นค่าต่อเนื่อง

“Max Plank” ของแข็งเมื่อได้รับความร้อน มี
การแผ่รังสีที่มีพลังงานเป็นปริมาณไม่ต่อเนื่อง
แต่มีค่าแน่นอน เรียกว่า quanta



ทฤษฎีควอนตัม (quantum) ของ Plank (1900)

Max Plank ตั้งสมมติฐานว่าอะตอมและโมเลกุลสามารถปลดปล่อย (หรือดูดกลืน) พลังงานเป็นค่าใดค่าหนึ่งเท่านั้น โดยนิยามคำว่า quantum เป็นปริมาณที่เล็กที่สุดของพลังงานที่สามารถปลดปล่อย (หรือดูดกลืน) ในรูปของรังสีแม่เหล็กไฟฟ้า โดยพลังงานมีค่าเท่ากับ

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

E = quantum energy of photon

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

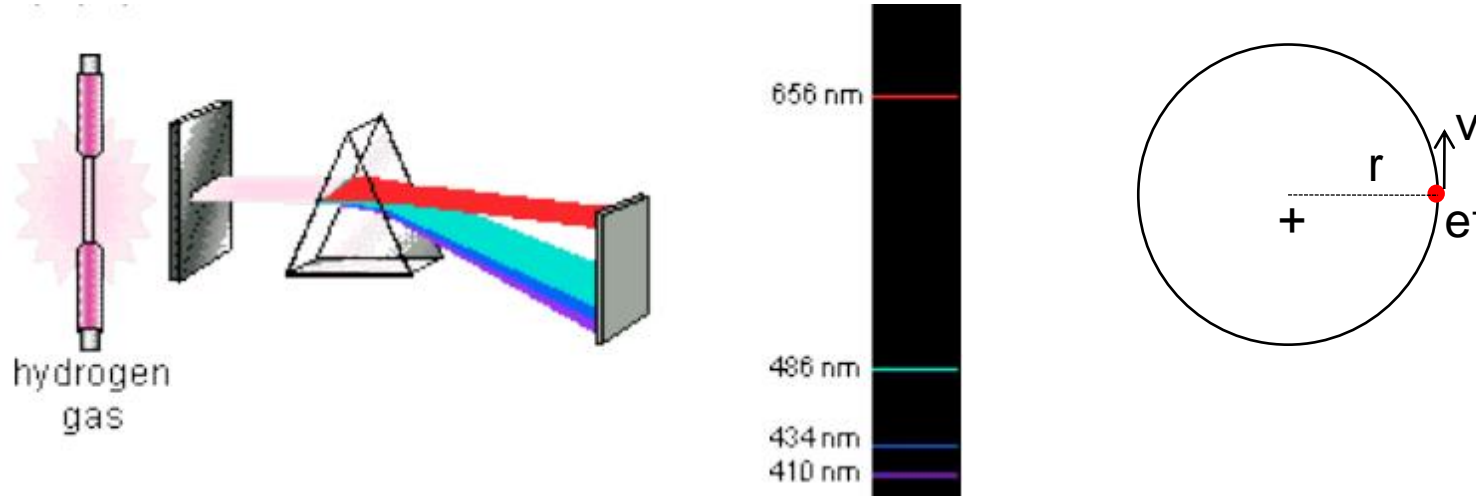
ν = frequency of radiation บางครั้งเขียนในรูปของ f

c = ความเร็วแสง (3×10^8 m)

λ = ความยาวคลื่น

1.3 ทฤษฎีอะตอมของบอร์และสเปกตรัมของธาตุไฮโดรเจน

Hydrogen model by Neils Bohr (1913)



Bohr เสนอว่าวงโคจร (orbit) ของอิเล็กตรอนมีรัศมีเฉพาะบางค่า (มีระดับพลังงานเฉพาะบางค่า) เมื่ออยู่ในวงโคจรจะไม่แผ่รังสี แต่เมื่อเปลี่ยนวงโคจรจะแผ่รังสี ดังนั้นพลังงานของอิเล็กตรอนมีลักษณะเป็น quantized (มีเฉพาะบางค่า)

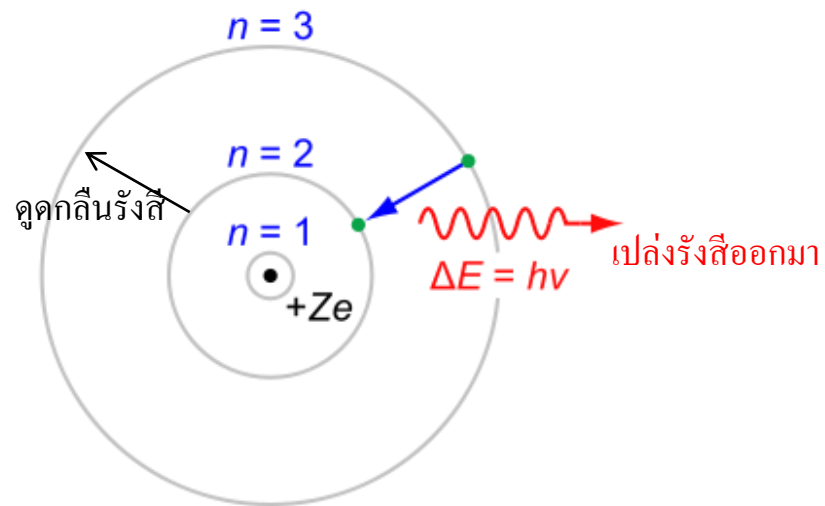
จากการตั้งสมมติฐานของ Bohr สรุปความได้ว่า

1. อิเล็กตรอนเคลื่อนที่รอบๆ นิวเคลียสในลักษณะวงกลมที่มีรัศมี r

$$r = n^2 a_0 \quad a_0 = \text{Bohr radius (0.529 \text{ \AA}) หรือ } 0.529 \times 10^{-10} \text{ m}$$

2. เมื่ออิเล็กตรอนเปลี่ยนวงโคจร จะมีการดูดกลืนหรือเปล่งรังสีแม่เหล็กไฟฟ้า

- ถ้าวงโคจรใหม่มีพลังงานต่ำกว่าวงโคจรเดิม → อะตอมจะเปล่งรังสีออกมา
- ถ้าวงโคจรใหม่มีพลังงานสูงกว่าวงโคจรเดิม → อะตอมจะดูดกลืนรังสี



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

$$\Delta E = 13.6 \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right) \text{ eV}$$

R_H = Rydberg constant = $2.18 \times 10^{-18} \text{ J}$

n_i = ระดับพลังงานเริ่มต้น

n_f = ระดับพลังงานสุดท้าย

ตัวอย่าง จงคำนวณหาพลังงานของวงโคจร (หน่วย eV) ของอิเล็กตรอนในไฮโดรเจนอะตอมเมื่อ $n = 1$ (สถานะพื้น) และ $n = 2$ (สถานะเร้าที่หนึ่ง) $n = 3$ (สถานะเร้าที่สอง) และหารัศมีของวงโคจรทั้งสาม

$$\text{จาก } E_n = -(13.605 \text{ eV}) (1/n^2)$$

$$E_1 = -(13.605 \text{ eV}) (1/1^2) = -13.605 \text{ eV}$$

$$E_2 = -(13.605 \text{ eV}) (1/2^2) = -3.401 \text{ eV}$$

$$E_3 = -(13.605 \text{ eV}) (1/3^2) = -1.512 \text{ eV}$$

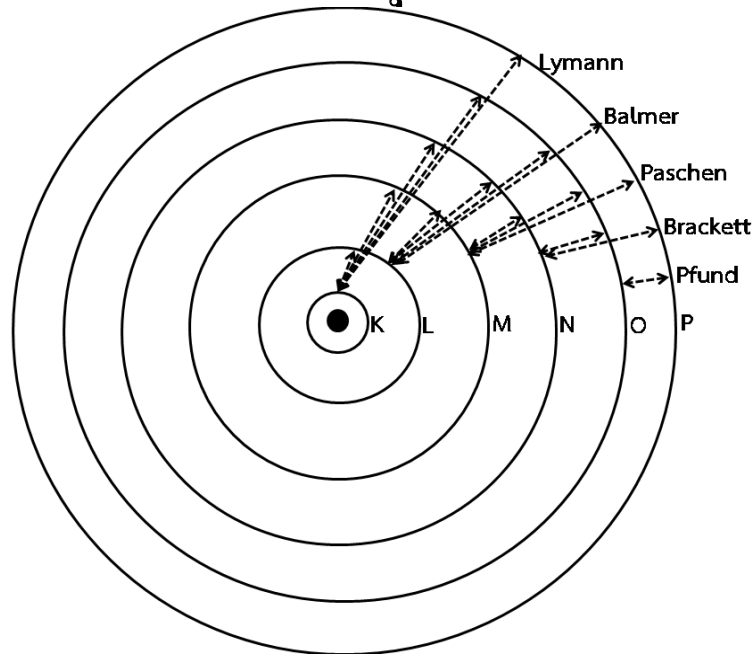
$$\text{จาก } r = n^2 a_0$$

$$r_1 = 1^2(0.529 \times 10^{-10} \text{ m}) = 0.529 \times 10^{-10} \text{ m} \\ = 0.529 \text{ \AA}$$

$$r_2 = 2^2(0.529 \times 10^{-10} \text{ m}) = 2.116 \times 10^{-10} \text{ m} \\ = 2.116 \text{ \AA}$$

$$r_3 = 3^2(0.529 \times 10^{-10} \text{ m}) = 4.76 \times 10^{-10} \text{ m} \\ = 4.76 \text{ \AA}$$

สเปกตรัมของธาตุไฮโดรเจน



สเปกตรัมของธาตุไฮโดรเจน

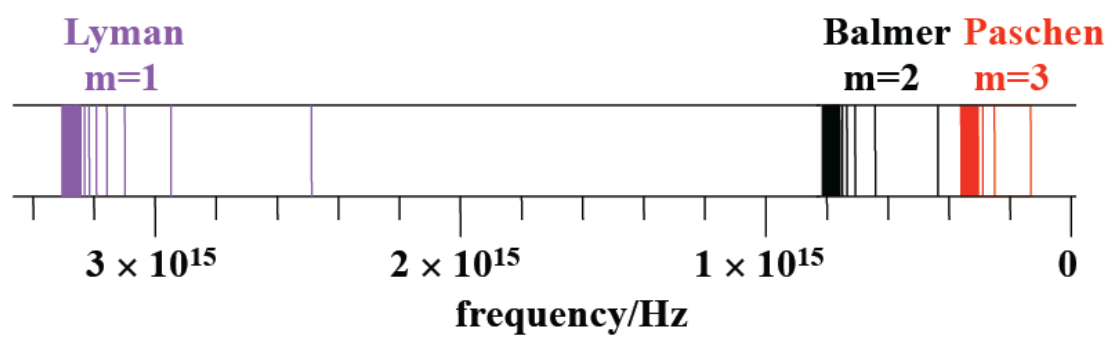
$n_f = 1$ Lyman

$n_f = 2$ Balmer

$n_f = 3$ Paschen

$n_f = 4$ Brakett

$n_f = 5$ Pfund

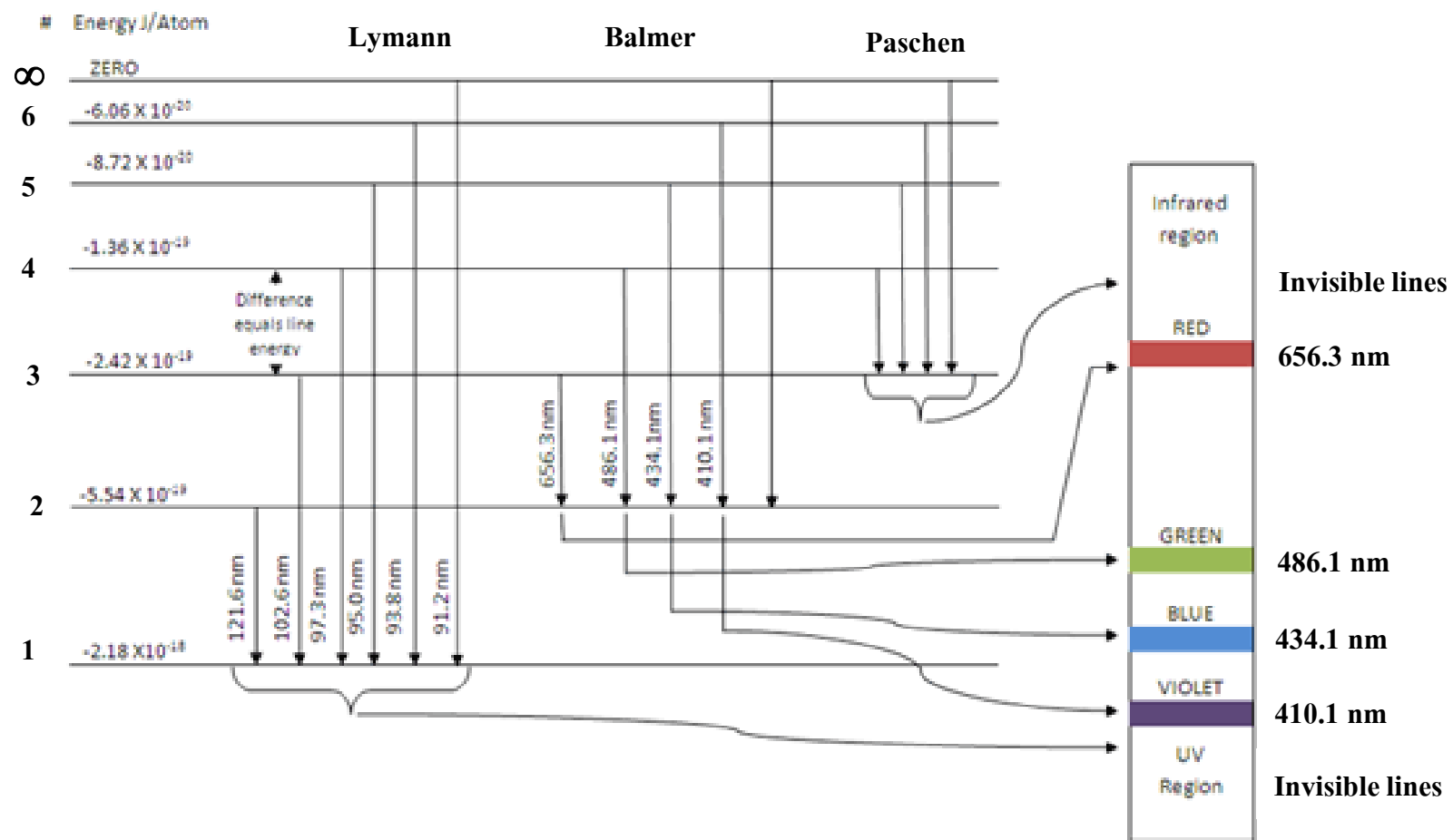


อนุกรม Lyman

$$\frac{1}{\lambda} = 1.09678 \times 10^{-2} \text{ nm}^{-1} \left[\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right]$$

อนุกรม Balmer

$$\frac{1}{\lambda} = 1.09678 \times 10^{-2} \text{ nm}^{-1} \left[\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right]$$



Color Observed	Observed λ (nm)	Energy Change (ΔE) from Observed λ	Energy Change (ΔE) from Bohr Model	Energy Level Transition
Red	660	3.01×10^{-19} J	3.03×10^{-19} J	$3 \rightarrow 2$
Blue Green	480	4.14×10^{-19} J	4.09×10^{-19} J	$4 \rightarrow 2$
Violet	430	4.63×10^{-19} J	4.58×10^{-19} J	$5 \rightarrow 2$
Violet	415 (may not be seen)	4.79×10^{-19} J	4.84×10^{-19} J	$6 \rightarrow 2$

ตัวอย่าง

1. สเปกตรัมของไฮโดรเจนประกอบด้วยแสงสีหลายชนิด จงคำนวณพลังงาน (J/mol) ของแสงสีม่วงซึ่งมีความยาวคลื่น $4.36 \times 10^{-7} \text{ m}$ และแสงสีแดงซึ่งมีความยาวคลื่น $6.56 \times 10^{-7} \text{ m}$

กำหนดให้ $h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ Js}$

$$c = 3.00 \times 10^8 \text{ m/s}$$

จาก
$$\Delta E = \frac{hc}{\lambda}$$
$$= \frac{(6.63 \times 10^{-34} \text{ Js})(3.00 \times 10^8 \text{ m/s})}{4.36 \times 10^{-7} \text{ m}}$$

$$\text{พลังงานของแสงสีม่วง} = 4.56 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$= \frac{(6.63 \times 10^{-34} \text{ Js})(3.00 \times 10^8 \text{ m/s})}{6.56 \times 10^{-7} \text{ m}}$$

$$\text{พลังงานของแสงสีแดง} = 3.03 \times 10^{-19} \text{ J}$$

ตัวอย่าง

2. จะต้องให้พลังงานกับอะตอมไฮโดรเจนเท่าใด (หน่วย J) เพื่อกระตุ้นอิเล็กตรอนจากวงโคจรแรกไปสู่วงโคจรที่ 3

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

$$R_H = \text{Rydberg constant} = 2.18 \times 10^{-18} \text{ J}$$

$$n = \text{principle quantum number} = 1, 2, 3, \dots$$

$$\begin{aligned} \Delta E &= 2.18 \times 10^{-18} \text{ J} [(1/1^2) - (1/3^2)] \\ &= 1.94 \times 10^{-18} \text{ J} \end{aligned}$$

สมมติฐานของเดอบรอยล์

Louis de Broglie (1925) ได้เสนอความคิดเกี่ยวกับ dual nature ของอิเล็กตรอน นำไปสู่ข้อสรุปที่ว่าคลื่นแสดงตัวเป็นอนุภาคได้และอนุภาคก็แสดงตัวเป็นคลื่นได้

จากทฤษฎี

$$E = h\nu = hc/\lambda$$

และทฤษฎีสัมพัทธภาพพิเศษ

$$E = pc \text{ เมื่อ } p \text{ คือ โมเมนตัมของ photon (} p = mv \text{)}$$

ทั้งสองทฤษฎีสรุปได้ว่า $pc = hc/\lambda$

$$p = h/\lambda \quad \text{สมการแสดงสมบัติเชิงอนุภาคและคลื่นมีความสัมพันธ์}$$

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

λ = wavelength of matter wave

p = momentum of particle

$$h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ Js}$$

} dual nature

หลักความไม่แน่นอนของไฮเซนเบิร์ก (Heisenberg uncertainty principle):

ไฮเซนเบิร์กเสนอว่า เป็นไปไม่ได้ที่จะทราบค่าที่แน่นอนทั้ง โมเมนตัมและตำแหน่งของอนุภาคพร้อมๆกัน นั่นคือ

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

change in momentum
↑
change in position

Δx = uncertainty of position ความไม่แน่นอนในการวัดตำแหน่งตามแนวแกน x

Δp = uncertainty of momentum ความไม่แน่นอนสำหรับค่าโมเมนตัมเชิงเส้นตรง

จาก uncertainty principle ไม่สามารถบอกวงโคจรที่แน่นอนของอิเล็กตรอนรอบนิวเคลียสได้ ตำแหน่งของอิเล็กตรอนเป็นเพียงความน่าจะเป็นที่จะพบอิเล็กตรอนในตำแหน่งหนึ่งๆเท่านั้น

แนวคิดพื้นฐานของ quantum mechanics ที่ใช้อธิบายปรากฏการณ์ของอิเล็กตรอนในอะตอม

1. สสารมีสมบัติของคลื่น จึงวิเคราะห์หาสมบัติต่างๆของอิเล็กตรอน โดยใช้ wave equation
2. อิเล็กตรอนมีขนาดเล็กเกินกว่าหาสมบัติได้โดยตรง จึงพิจารณาสมบัติต่างๆของอิเล็กตรอนได้แค่ระดับ โอกาสหรือความน่าจะเป็น (probability) จึงนิยมใช้คำว่า ความหนาแน่นอิเล็กตรอน (electron density) หรือ โอกาสที่จะพบอิเล็กตรอน ที่บริเวณต่างๆ

1.4 กลศาสตร์คลื่น

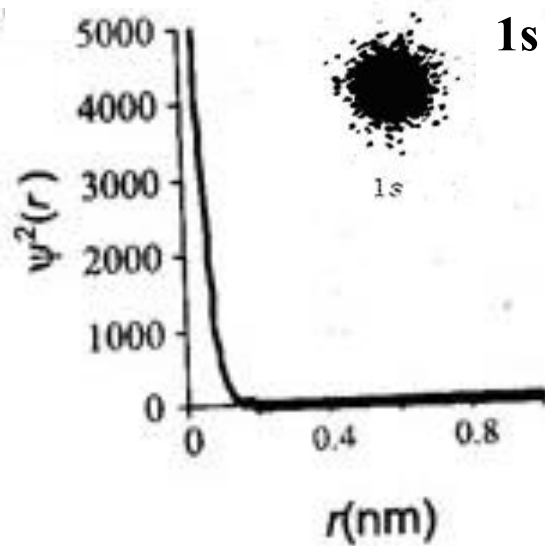
Wave mechanics (กลศาสตร์คลื่น)

ทฤษฎีที่ใช้อธิบายโครงสร้างอะตอมและสมบัติของอนุภาคภายในอะตอม ซึ่งมีรากฐานจากสมมติฐานของ Louis de Broglie

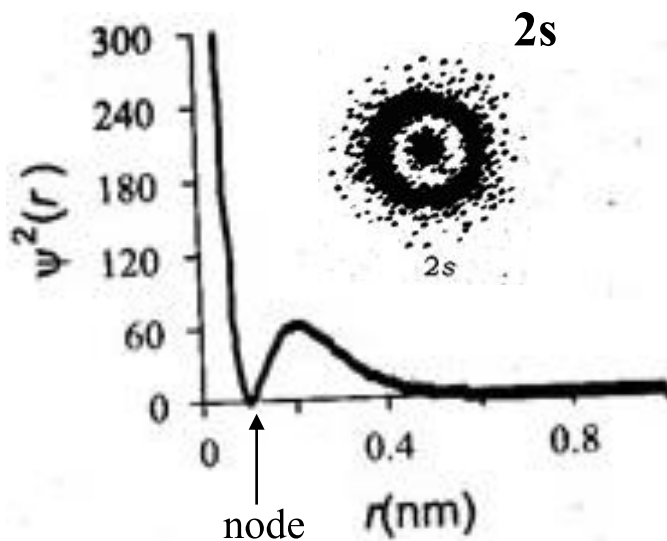
อิเล็กตรอนมีสมบัติเป็นคลื่นได้ การอธิบายปรากฏการณ์หรือพฤติกรรมต่างๆของอิเล็กตรอนจึงใช้สมการคลื่น (wave equation) ของ Schrödinger ซึ่งใช้ได้สำหรับ H atom และอะตอมบางอะตอมที่มีอิเล็กตรอนมากกว่า 1

เนื่องจากอิเล็กตรอนมีขนาดเล็กมาก จึงพิจารณาสมบัติต่างๆของอิเล็กตรอนได้จากความน่าจะเป็น หรือ โอกาส (probability) เท่านั้น ในการแก้ปัญหาต่างๆจึงใช้คำว่า ความหนาแน่นของอิเล็กตรอน (electron density) หรือ โอกาสที่จะพบอิเล็กตรอนที่บริเวณต่างๆ

พิจารณาโอกาสการกระจาย (probability distribution) ของอิเล็กตรอนใน 1s orbital ของ H atom ซึ่งแทนด้วยกราฟระหว่าง Ψ^2 กับระยะทางจากนิวเคลียส (r)

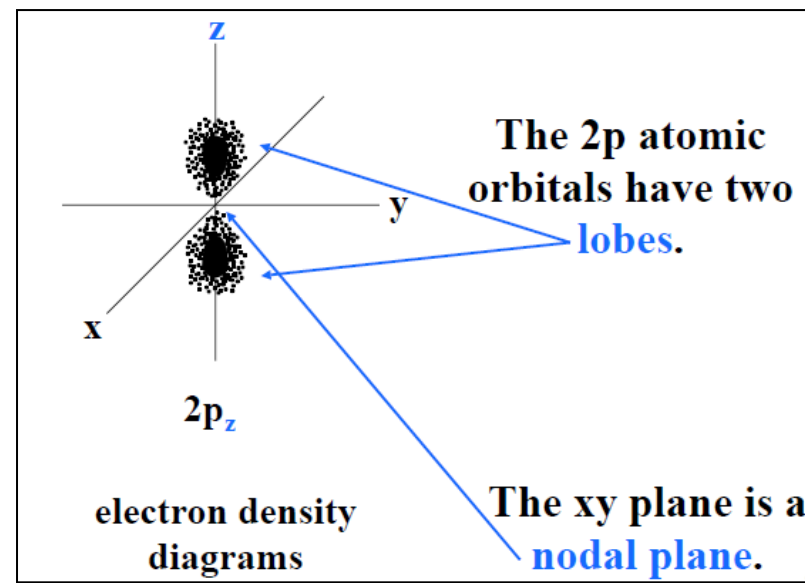
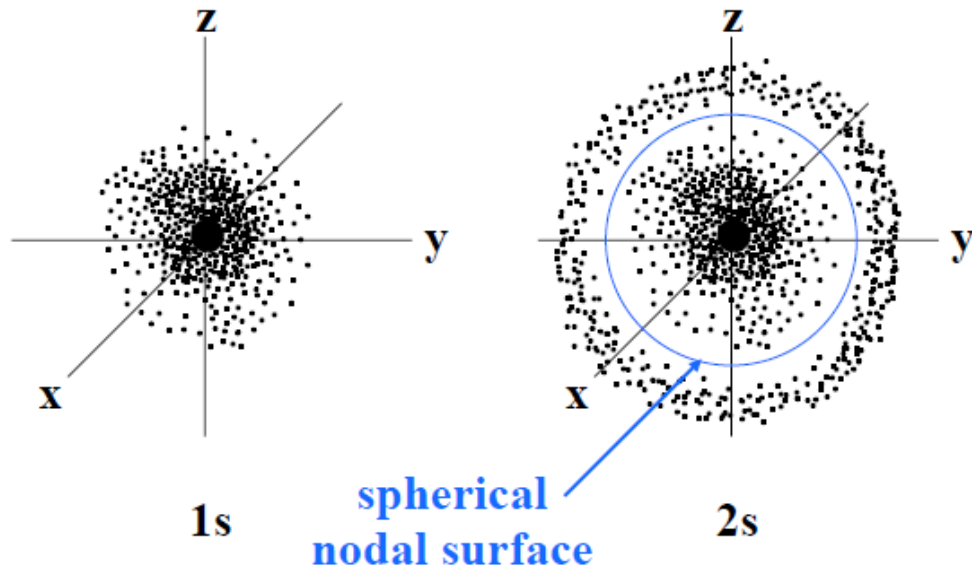


โอกาสที่พบใน 1s orbital มากที่สุดอยู่ที่ระยะ 0.05 nm จากนิวเคลียส ถ้าไกลกว่านี้โอกาสการพบอิเล็กตรอนจะน้อยลง และถ้า r มากกว่า 0.4 nm แล้ว โอกาสที่จะพบ 1s electron เกือบไม่มีเลย

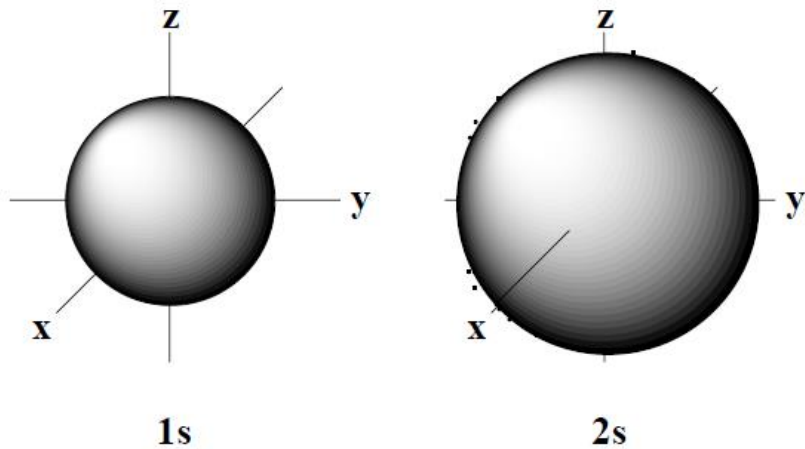


2s orbital ที่ตำแหน่งห่างจากนิวเคลียส ความหนาแน่นของอิเล็กตรอนลดลงจนเป็นศูนย์แล้วเพิ่มขึ้นอีกครั้ง บริเวณที่ความหนาแน่นของอิเล็กตรอนลดลงจนเป็นศูนย์ เรียกว่า node

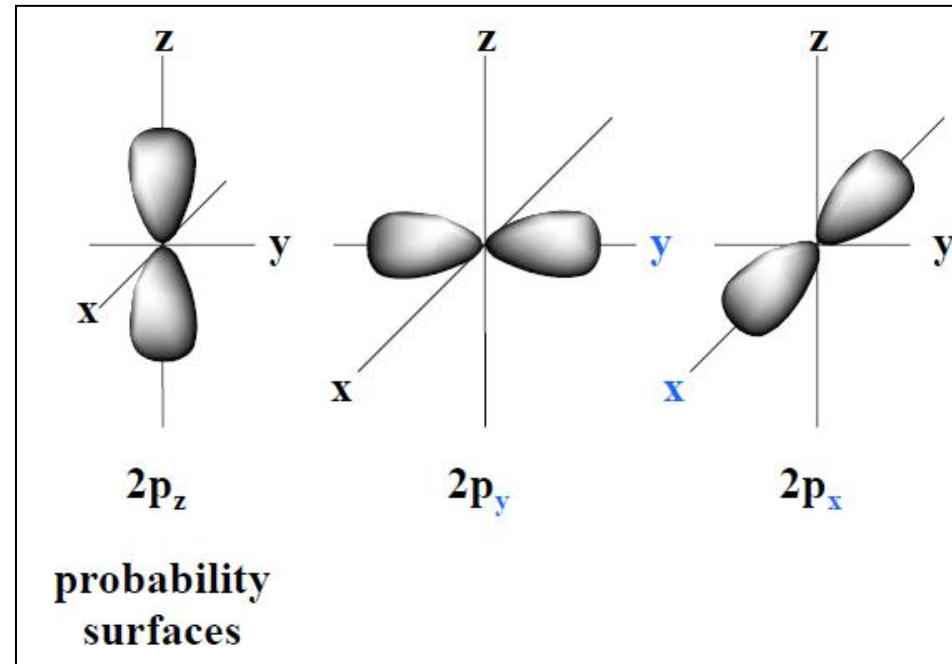
เขียนผิวของบริเวณที่มีโอกาสที่จะพบอิเล็กตรอน จะได้ผิวเป็นรูปทรงกลม ดังนั้น s orbital มีรูปร่างเป็นทรงกลม (spherical)



electron density diagrams



probability surfaces



1.5 เลขควอนตัมต่างๆ

Electron configuration (โครงสร้างแบบอิเล็กตรอนในอะตอม) หมายถึงการจัดเรียงอิเล็กตรอนในออร์บิทัลของอะตอม (atomic orbital) ออร์บิทัลของอะตอมถูกกำหนดด้วยเลขควอนตัม 3 ชนิด

1. n (the principle quantum number): เลขควอนตัมหลัก


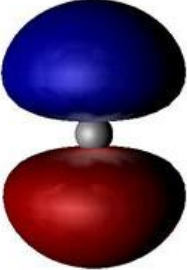
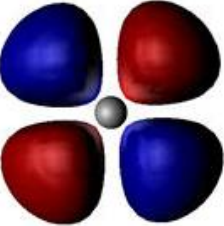
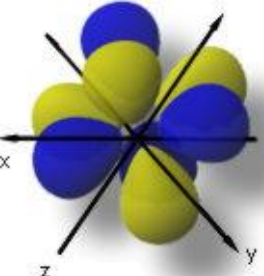
แสดงระดับพลังงานในอะตอมซึ่งถูกจัดเป็นระดับหลักหรือวง (shell)

$n = 1$	K shell
$n = 2$	L shell
$n = 3$	M shell
$n = 4$	N shell
$n = 5$	O shell etc.

2. l (azimuthal quantum number หรือ the angular momentum quantum number) เลขควอนตัมโมเมนตัมเชิงมุม

l แสดงวงโคจรย่อย (subshell หรือ sublevel) ซึ่งบอกถึงรูปร่างของออร์บิทัล

l มีค่าตั้งแต่ 0, 1, 2, 3, ..., (n-1)

l	0	1	2	3
	s (sharp)	p (principle)	d (diffuse)	f (fundamental)
				

$n = 1$	$l = 0$	K-shell มี 1 subshell คือ s orbital
$n = 2$	$l = 0, 1$	L-shell มี 2 subshell คือ s, p orbital
$n = 3$	$l = 0, 1, 2$	M-shell มี 3 subshell คือ s, p, d orbital
$n = 4$	$l = 0, 1, 2, 3$	N-shell มี 4 subshell คือ s, p, d, f orbital

3. m_ℓ (the magnetic quantum number) เลขควอนตัมแม่เหล็ก

m_ℓ แสดงการวางตัว (orientation) ของออร์บิทัล

จำนวนของออร์บิทัลในแต่ละชั้นย่อยถูกกำหนดโดยจำนวนค่าของ m_ℓ ที่มีได้ และออร์บิทัลที่อยู่ในชั้นย่อยเดียวกัน มีระดับพลังงานเท่ากัน (degeneracy)

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

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

$m_\ell = 0$ ใน s subshell ประกอบด้วย 1 orbital

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

$m_\ell = 0$ ใน s subshell ประกอบด้วย 1 orbitals

$$\ell = 1$$

$m_\ell = -1, 0, 1$ ใน p subshell ประกอบด้วย 3 orbitals

$$n = 3, \quad \ell = 0$$

$m_\ell = 0$ ใน s subshell ประกอบด้วย 1 orbital

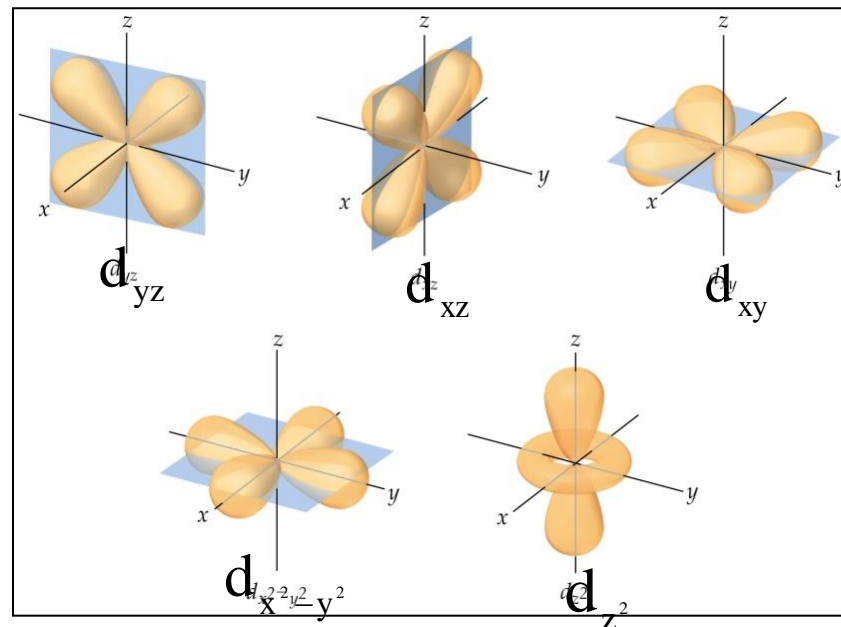
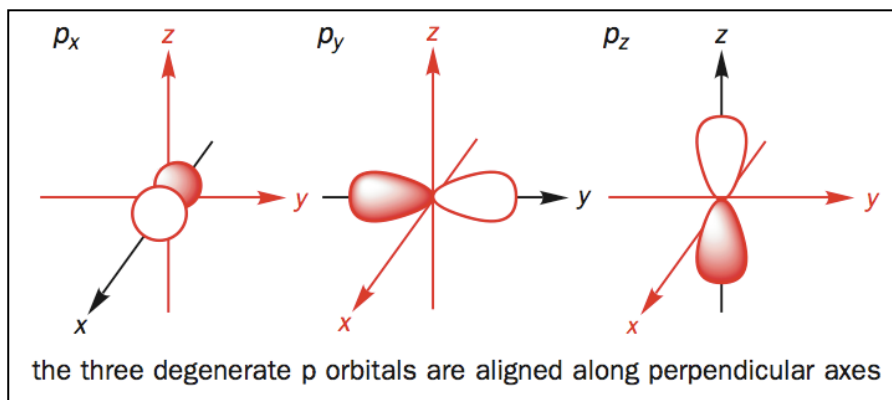
$$\ell = 1$$

$m_\ell = -1, 0, 1$ ใน p subshell ประกอบด้วย 3 orbitals

$$\ell = 2$$

$m_\ell = -2, -1, 0, 1, 2$ ใน d subshell ประกอบด้วย 5 orbitals

ℓ	m_ℓ	จำนวน degeneracy	จำนวน ออร์บิทัล	ชนิดออร์บิทัล
0 (s)	0	1	1	s
1 (p)	-1, 0, 1	3	3	p_x, p_y, p_z
2 (d)	-2, -1, 0, 1, 2	5	5	$d_{x^2-y^2}, d_{z^2}, d_{xy}, d_{yz}, d_{xz}$
3 (f)	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3	7	7	
4 (g)	-4, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, 4	9	9	



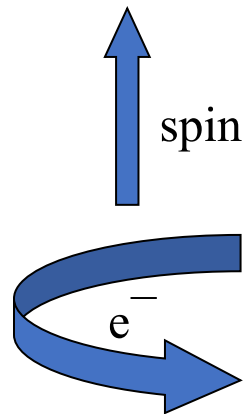
สรุปค่าต่างๆของเลขควอนตัม

n	shell	Allowed values of l	subshell	Allowed values of m_l	Number of orbital	Number of electron
1	K	0	1s	0	1	$2 e^-$
2	L	0	2s	0	1	$2 e^-$
		1	2p	-1,0,1	3	$6 e^-$
3	M	0	3s	0	1	$2 e^-$
		1	3p	-1,0,1	3	$6 e^-$
		2	3d	-2, -1,0,1,2	5	$10 e^-$
4	N	0	4s	0	1	$2 e^-$
		1	4p	-1,0,1	3	$6 e^-$
		2	4d	-2, -1,0,1,2	5	$10 e^-$
		3	4f	-3, -2, -1,0,1,2,3	7	$14 e^-$

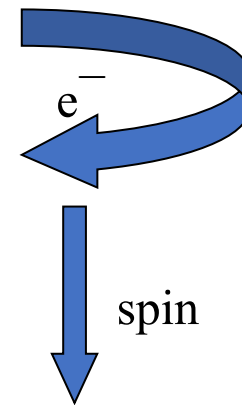
m_s (spin quantum number) เลขควอนตัมสปิน

เกิดจากอิเล็กตรอนมีการหมุนรอบตัวเอง ทำให้เกิดสนามแม่เหล็กอ่อนๆขึ้น ซึ่งอิเล็กตรอนเกิดการสปินได้ 2 ทิศทาง

m_s จึงมี 2 ค่า คือ $+1/2$ (spin up) และ $-1/2$ (spin down)



$m_s = +1/2$ (spin up)



$m_s = -1/2$ (spin down)

orbital	n	ℓ	m_ℓ
1s	1	0	0
2s	2	0	0
2p	2	1	-1, 0, +1
3s	3	0	0

การจัดเลขควอนตัมแบบใดที่เป็นไปไม่ได้ เพราะเหตุใด

	n	ℓ	m_ℓ	m_s
ก	3	2	-1	1/2
ข	2	3	-1	1/2
ค	3	2	-3	1/2
ง	4	1	1	3/2
จ	4	5	3	-1/2

1.6 การจัดเรียงอิเล็กตรอนของธาตุในตารางธาตุ

การจัดเรียงอิเล็กตรอนเป็นไปตามกฎดังนี้

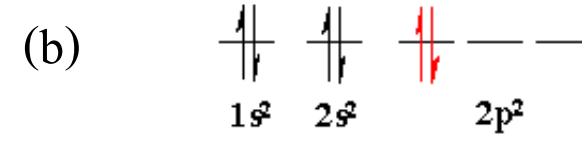
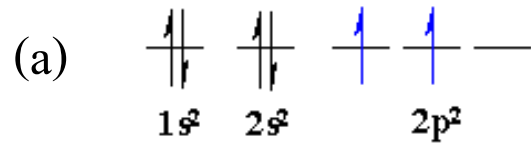
1. Pauli exclusion principle (หลักการกีดกันของเพาลี)

“อิเล็กตรอนคู่ใดๆในอะตอมจะมีค่า n , l , m_l และ m_s เหมือนกันทั้ง 4 ค่าไม่ได้” แต่จะมีเหมือนกันได้มากที่สุด 3 ค่า โดยที่อิเล็กตรอนคู่นี้ต้องมีสปินในทิศทางตรงกันข้าม



2. Hund's rule

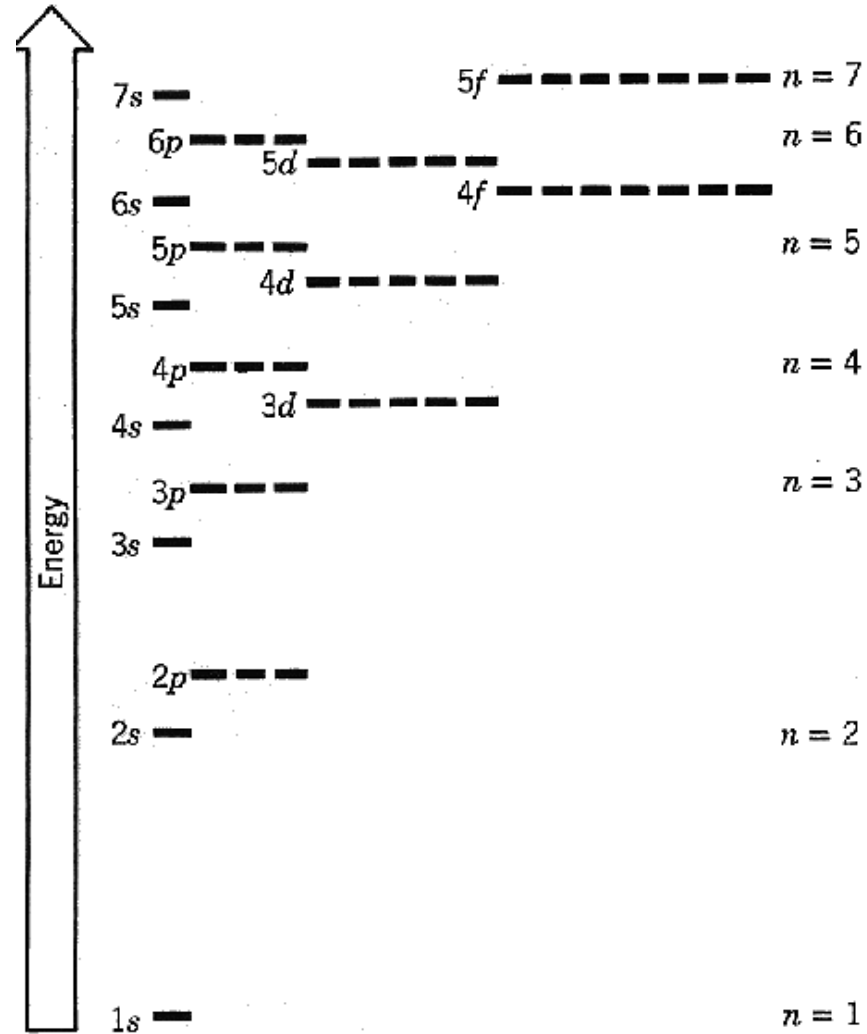
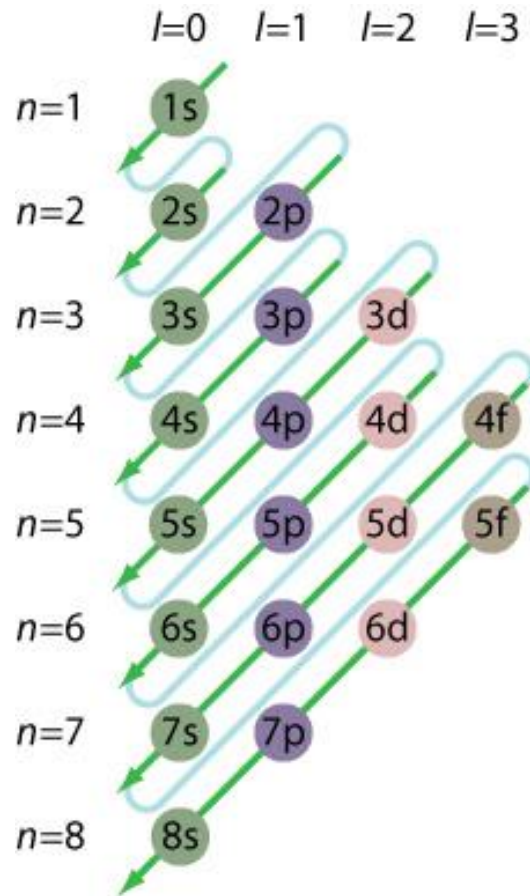
“การเติมอิเล็กตรอนในออร์บิทัลที่มีพลังงานเท่ากัน ให้เติมอิเล็กตรอนเดี่ยวๆ ให้เต็มออร์บิทัลก่อน แล้วจึงเติมอิเล็กตรอนให้เข้าคู่กัน”



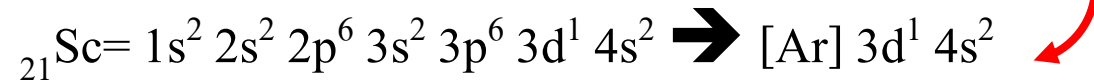
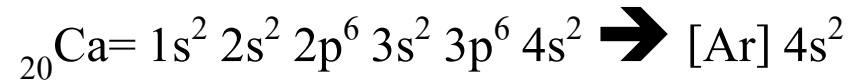
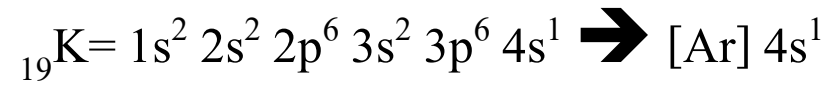
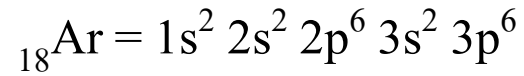
Number of Electrons	Arrangement	Unpaired e^-	
1	\uparrow --- ---	1	} paramagnetic
2	\uparrow \uparrow ---	2	
3	\uparrow \uparrow \uparrow	3	
4	$\uparrow\downarrow$ \uparrow \uparrow	2	
5	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ \uparrow	1	
6	$\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$	0	diamagnetic

3. Aufbau (Building up principle)

ต้องเติมอิเล็กตรอนในระดับพลังงานต่ำกว่าให้เต็มก่อน แล้วจึงเติมในออร์บิทัลที่พลังงานสูงขึ้น



				K	L	M	N	ໜຶ່ງ	1s	2s	2p
hydrogen	${}_1\text{H}$	$1s^1$		1				1	↑		
helium	${}_2\text{He}$	$1s^2$		2					↑↓		
lithium	${}_3\text{Li}$	$1s^2 2s^1$	$[\text{He}] 2s^1$	2	1			1	↑↓	↑	
beryllium	${}_4\text{Be}$	$1s^2 2s^2$	$[\text{He}] 2s^2$	2	2			2	↑↓	↑↓	
boron	${}_5\text{B}$	$1s^2 2s^2 2p^1$	$[\text{He}] 2s^2 2p^1$	2	3			3	↑↓	↑↓	↑
carbon	${}_6\text{C}$	$1s^2 2s^2 2p^2$	$[\text{He}] 2s^2 2p^2$	2	4			4	↑↓	↑↓	↑↑
nitrogen	${}_7\text{N}$	$1s^2 2s^2 2p^3$	$[\text{He}] 2s^2 2p^3$	2	5			5	↑↓	↑↓	↑↑↑
oxygen	${}_8\text{O}$	$1s^2 2s^2 2p^4$	$[\text{He}] 2s^2 2p^4$	2	6			6	↑↓	↑↓	↑↓↑↑
fluorine	${}_9\text{F}$	$1s^2 2s^2 2p^5$	$[\text{He}] 2s^2 2p^5$	2	7			7	↑↓	↑↓	↑↓↑↓↑
neon	${}_{10}\text{Ne}$	$1s^2 2s^2 2p^6$	$[\text{He}] 2s^2 2p^6$	2	8			8	↑↓	↑↓	↑↓↑↓↑↓



${}_{21}\text{Sc} = [\text{Ar}] 3d^1 4s^2$	$\text{Sc}^+ = [\text{Ar}] 3d^1 4s^1$	$\text{Sc}^{2+} = [\text{Ar}] 3d^1$	$\text{Sc}^{3+} = [\text{Ar}]$
${}_{22}\text{Ti} = [\text{Ar}] 3d^2 4s^2$	$\text{Ti}^{1+} = [\text{Ar}] 3d^2 4s^1$	$\text{Ti}^{2+} = [\text{Ar}] 3d^2$	$\text{Ti}^{3+} = [\text{Ar}] 3d^1$
${}_{24}\text{Cr} = [\text{Ar}] 3d^5 4s^1$ (half filled)	$\text{Cr}^{1+} = [\text{Ar}] 3d^5$	$\text{Cr}^{2+} = [\text{Ar}] 3d^4$	$\text{Cr}^{3+} = [\text{Ar}] 3d^3$
${}_{26}\text{Fe} = [\text{Ar}] 3d^6 4s^2$	$\text{Fe}^{1+} = [\text{Ar}] 3d^6 4s^1$	$\text{Fe}^{2+} = [\text{Ar}] 3d^6$	$\text{Fe}^{3+} = [\text{Ar}] 3d^5$
${}_{29}\text{Cu} = [\text{Ar}] 3d^{10} 4s^1$ (full filled)	$\text{Cu}^{1+} = [\text{Ar}] 3d^{10}$	$\text{Cu}^{2+} = [\text{Ar}] 3d^9$	

การจัดเรียงอิเล็กตรอนแบบ half filled และ full filled เป็นการจัดเรียงที่เสถียรเพราะมีพลังงานต่ำ

แบบฝึกหัด

1. อิเล็กตรอนจากวงโคจร 3 ไปสู่วงโคจรที่ 5 ต้องดูดพลังงานหรือคายพลังงาน
2. วัสดุชนิดใดใช้เป็นวัสดุกำบังอนุภาคเบต้า
3. ${}_{16}\text{S}^{2-}$ มีจำนวนอิเล็กตรอนกี่ตัว
4. จากสูตรที่กำหนดให้ $E_n = -(13.605 \text{ eV}) (1/n^2)$
จงคำนวณค่าพลังงานของอิเล็กตรอน เมื่ออยู่ในระดับพลังงานที่อินฟินิตี้
5. s orbital มีรูปร่างอย่างไร