โครงสร้างอะตอม (Atomic structure)

คม 105 เคมีพื้นฐาน (1/2565)

1.1 โมเดลอะตอมแบบต่างๆ

1.2 อนุภาคต่างๆในอะตอม

1.3 ทฤษฎีอะตอมสมัยใหม่

1.4 ทฤษฎีอะตอมของบอร์หและสเปกตรัมของธาตุไฮโดรเจน

1.5 กลศาสตร์คลื่น

1.6 เลขควอนตัมต่างๆ

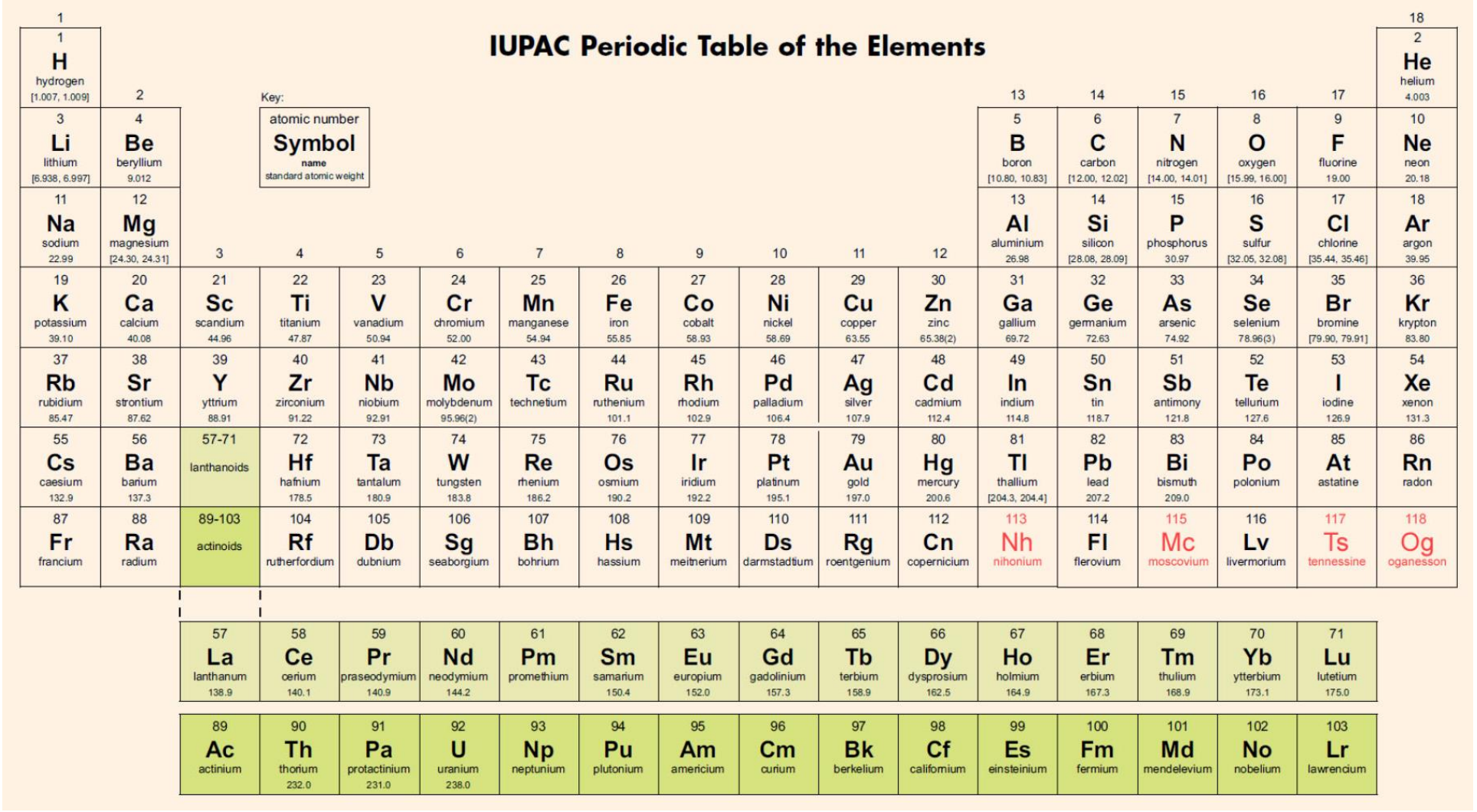
1.7 การจัดเรียงอิเล็กตรอนของธาตุในตารางธาตุ

รัชดาภรณ์ ปันทะรส

สาขาวิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยแม่โจ้

www.chemistry.mju.ac.th

email: ratchadaporn_p@mju.ac.th



'Nihonium' 'Nh' for 113

'Moscovium' 'Mc' for 115

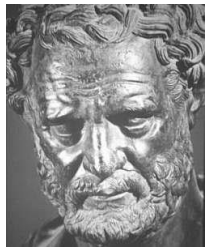
'Tennessine' 'Ts' for 117

'Oganesson' 'Og' for 118

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

1.1 โมเดลอะตอมแบบต่างๆ

460 BC



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

- อะตอมเป็นส่วนประกอบที่เล็กที่สุดของสาร ทำลายและแบ่งแยกไม่ได้

-ค้นพบคุณสมบัติของสารใหม่หลายอย่าง เช่น ทอง เกลือ แอลกอฮอล์

-พัฒนาเทคนิคการทดลอง เช่น การกลั่น การระเหิด การตกผลึก

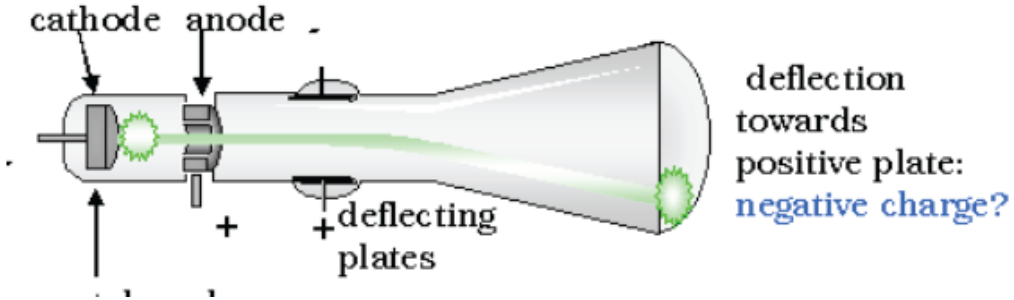
1808

John Dalton "ATOMS"

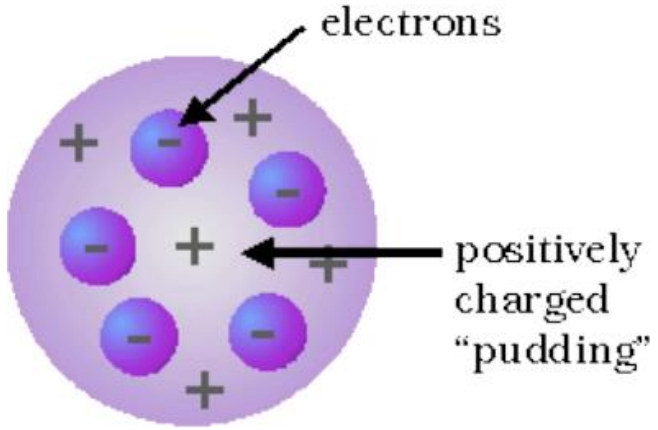
- อะตอมคือธาตุที่ประกอบด้วยอนุภาคที่เล็กมากและแบ่งแยกต่อไปอีกไม่ได้
- อะตอมของธาตุชนิดเดียวกันจะเหมือนกัน และต่างจากอะตอมของธาตุชนิดอื่น

- 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 โดยค้นพบอิเล็คตรอนมีประจุไฟฟ้าลบ ค่า e/m ของอิเล็คตรอนมีค่ามากกว่าของโปรตอน ประมาณ 1000 เท่า
- ประจุของอิเล็คตรอนอาจมากกว่าของโปรตอนหรือน้ำหนักของอิเล็คตรอนน้อยกว่า

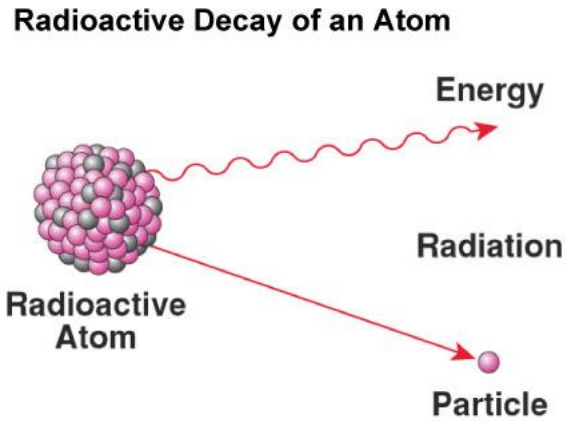
R.A. Mullikan (1909) ได้ทำการทดลองพบว่า

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

อะตอมไม่ใช่สิ่งที่เล็กที่สุด แต่ประกอบด้วยอิเล็คตรอนและอนุภาคอื่น

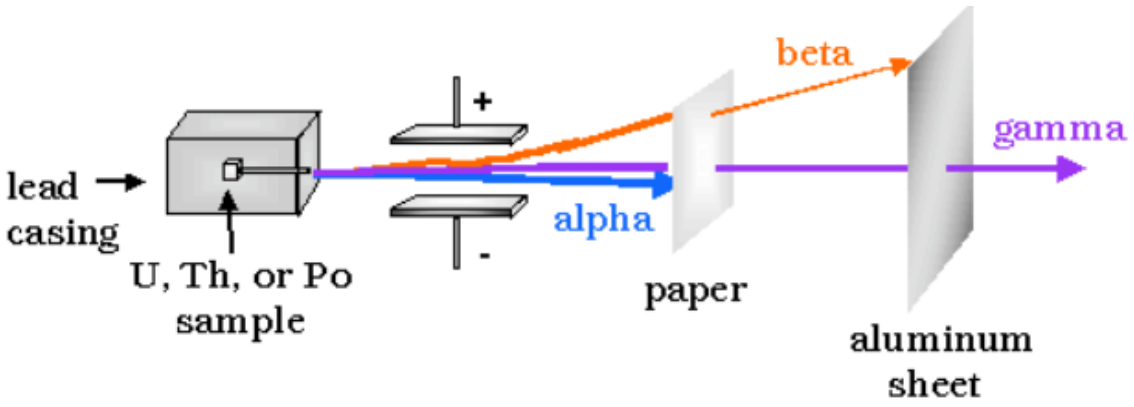
การค้นพบที่ส่งเสริมวิวัฒนาการของทฤษฎีอะตอมยุคใหม่

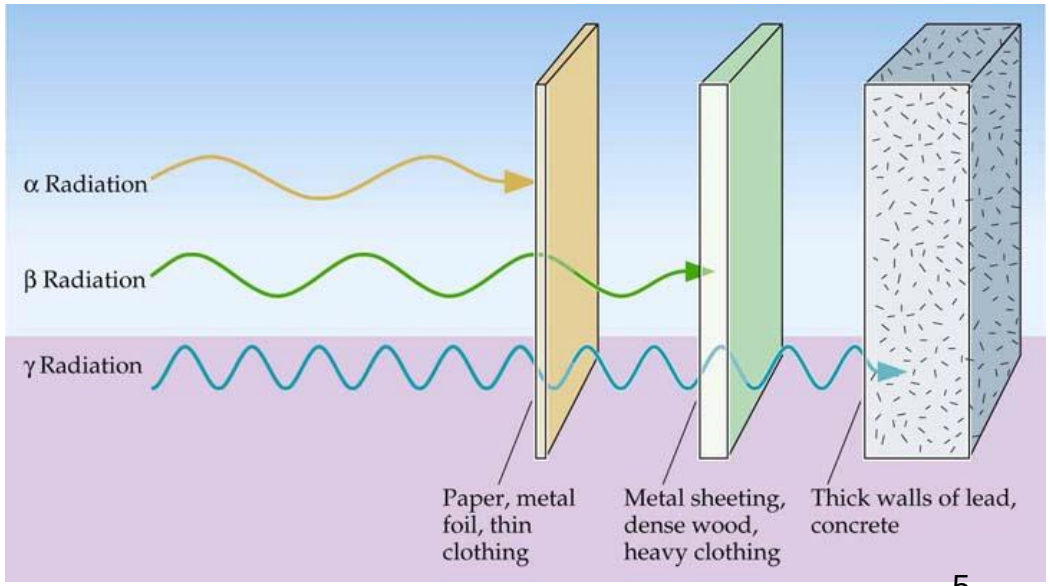
Pierre และ Marie Curie (1898)



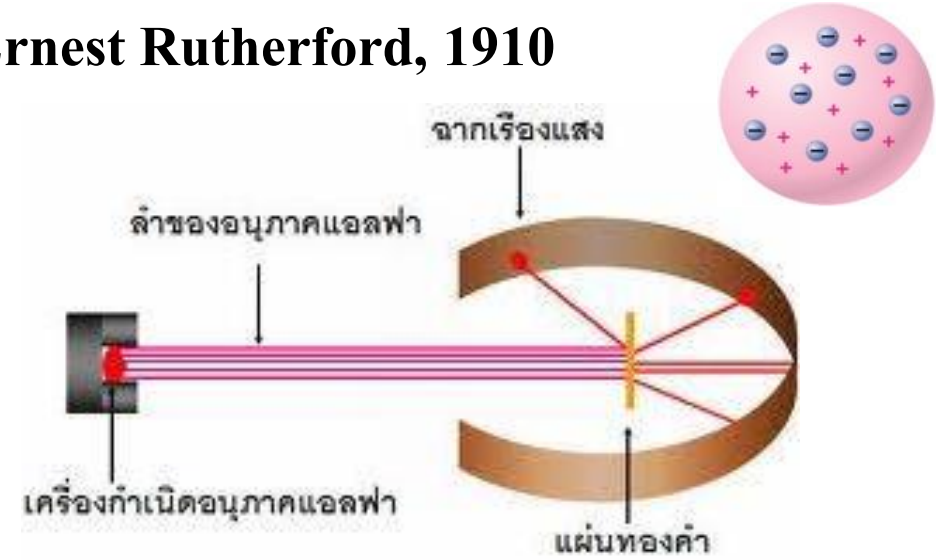
- ธาตุกัมมันตรังสีมีการแตกตัวแล้วเปล่งแสงออกมา ได้อะตอมชนิดอื่นและอนุภาค
- ดังนั้น อะตอมจึงไม่ใช่อนุภาคที่แบ่งแยกไม่ได้

Ernest Rutherford (1910)

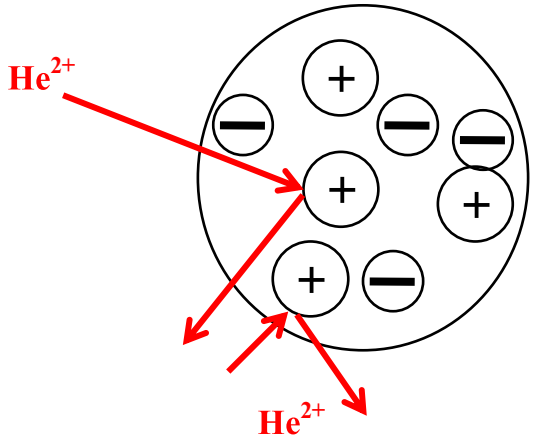




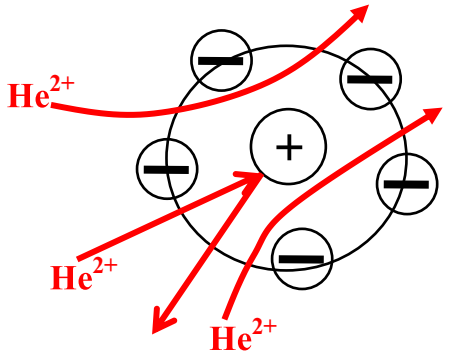
Ernest Rutherford, 1910



Thomson

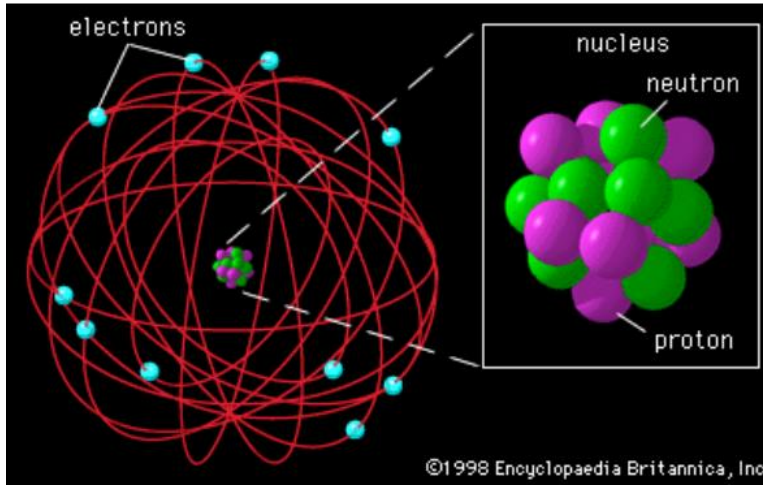


จากการทดลองของ Rutherford



หากแบบจำลองอะตอมเป็นไปตามของทอมสัน รังสีทั้งหมดควรกระเจิงหรือสะท้อนกลับทางเดิมเนื่องจากเกิดการชนและผลักระหว่างอนุภาคแอลฟา (He^{2+}) และนิวเคลียส

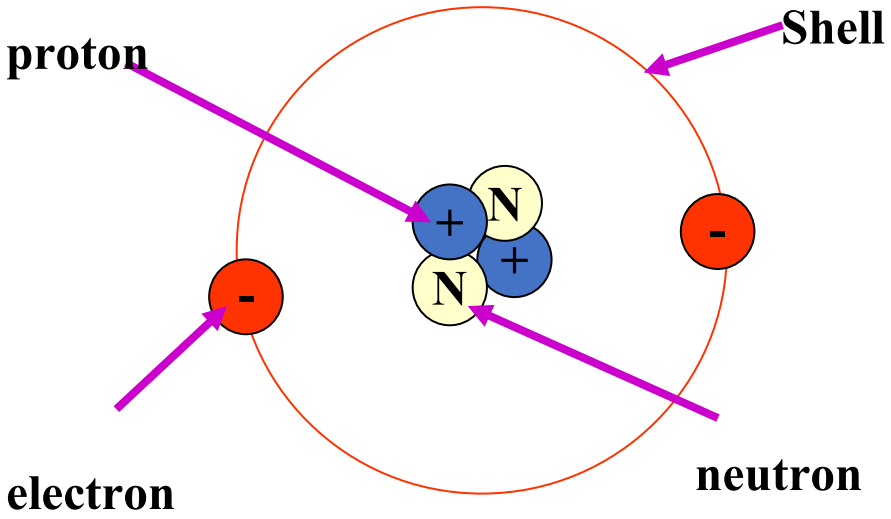
แต่กลับพบว่ารังสีแอลฟาส่วนใหญ่สามารถวิ่งผ่านได้เป็นจำนวนมาก มีเพียงส่วนน้อยที่เป็นกระเจิงหรือสะท้อนกลับทางเดิม



แบบจำลองอะตอมของรัทเทอร์ฟอร์ด: อะตอมประกอบด้วยนิวเคลียสซึ่งเป็นอนุภาคประจุบวกที่รวมตัวเป็นกลุ่มอยู่ตรงกลาง และมีอิเล็คตรอนเคลื่อนที่เป็นวงล้อมรอบ จำนวนอิเล็คตรอนเท่ากับจำนวนประจุบวกในนิวเคลียส

1.2 อนุภาคต่างๆในอะตอม

Helium atom: He



Particles	Symbol	Charge		Weight	
			Coulombs	kg	amu
Electron	e^-	–1	1.6×10^{-19}	9.1094×10^{-31}	0.000549
Protron	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 $^{A}_{Z}X$

X = ชนิดของธาตุ

A = เลขมวลอะตอม = จำนวนโปรตอน + จำนวนนิวตรอน = จำนวนนิวคลีออน ➔ A = Z+n

Z = เลขอะตอม = จำนวนโปรตอน = จำนวนอิเล็กตรอน

Isotope (ไอโซโทป) อะตอมของธาตุเดียวกัน (มีโปรตอนเท่ากัน) แต่มีจำนวนนิวตรอนต่างกัน

สัญลักษณ์ของไอโซโทปมี 2 แบบ คือ ${}^{A}_{Z}X$ หรือ X-A

	จำนวนโปรตอน	จำนวนอิเล็กตรอน	จำนวนนิวตรอน	เลขมวลอะตอม
${}^{12}_{6}C$	**6**	6	6	12
${}^{13}_{6}C$	**6**	6	7	13
${}^{14}_{6}C$	**6**	6	8	14

Isotone (ไอโซโทน) อะตอมต่างชนิดกันที่มีจำนวนนิวตรอนเท่ากัน แต่มีเลขมวลอะตอม (A) และเลขอะตอม (Z) ไม่เท่ากัน เช่น ${}^{18}_{8}O$ ${}^{19}_{9}F$ เป็นไอโซโทนกัน มีนิวตรอนเท่ากันคือ n = 10

	จำนวนโปรตอน	จำนวนอิเล็กตรอน	**จำนวนนิวตรอน**	เลขมวลอะตอม
${}^{18}O$	8	8	**10**	18
${}^{19}F$	9	9	**10**	19

Isobar (ไอโซบาร์) อะตอมต่างชนิดกันที่มีเลขมวลอะตอมเท่ากัน แต่มีเลขอะตอมและจำนวนนิวตรอนไม่เท่ากัน

เช่น $^{30}_{14}Si$ กับ $^{30}_{15}P$ มีเลขมวลเท่ากันคือ 30

เฉพาะ A เท่านั้นที่เท่ากัน แต่ Z และ n ไม่เท่ากัน จึงเป็นไอโซบาร์

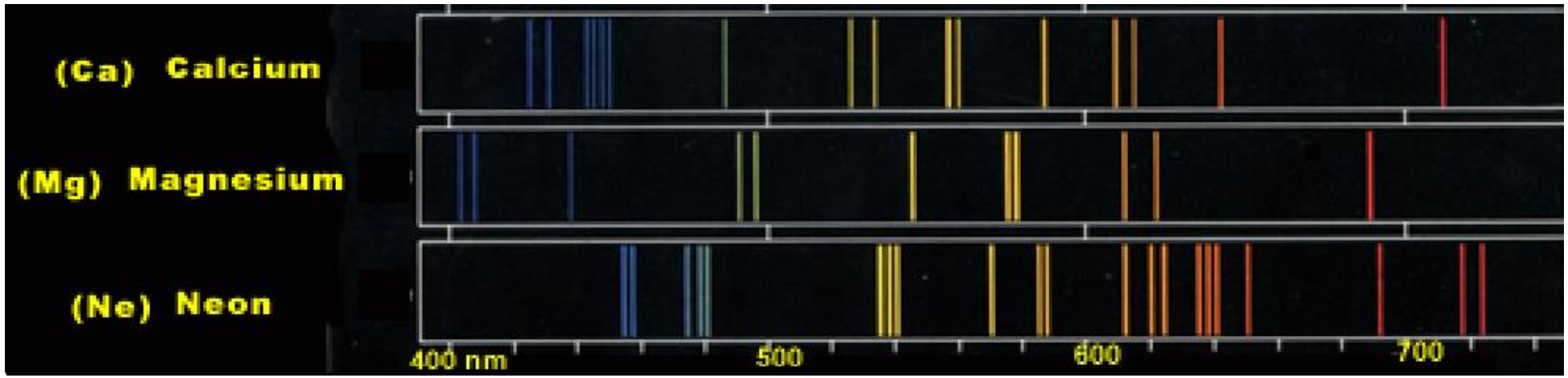
	จำนวนโปรตอน	จำนวนอิเล็กตรอน	จำนวนนิวตรอน	**เลขมวลอะตอม**
$^{30}_{14}Si$	14	14	16	**30**
$^{30}_{15}P$	15	15	15	**30**

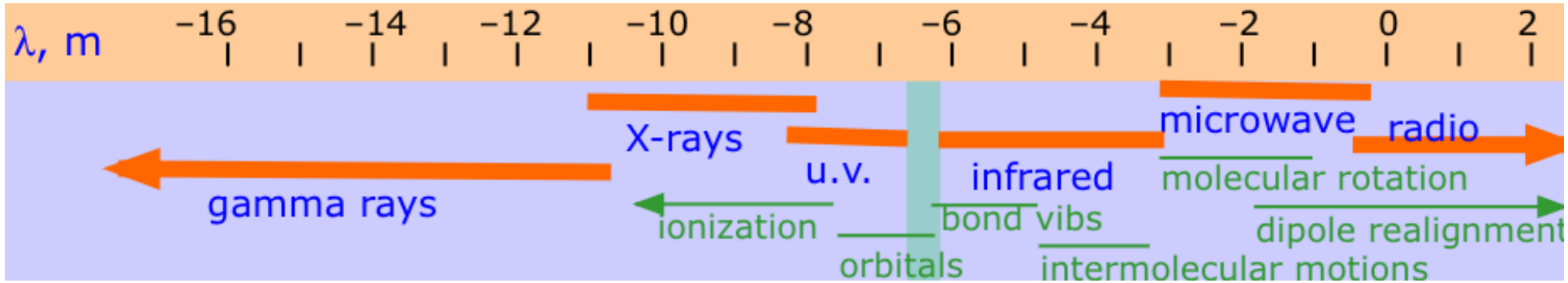
อะตอม	จำนวนโปรตอน	จำนวนอิเล็กตรอน	จำนวนนิวตรอน	เลขอะตอม	เลขมวลอะตอม
$^{27}_{13}Al$					
$^{35}_{17}Cl$					
$^{36}_{17}Cl$					
$^{40}_{20}Ca$					

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

1.3 ทฤษฎีอะตอมสมัยใหม่

Max Plank ศึกษาข้อมูลการแผ่รังสีของของแข็งเมื่อได้รับความร้อน พบว่าอะตอมและโมเลกุลปลดปล่อยพลังงานเป็นปริมาณไม่ต่อเนื่อง แต่มีค่าแน่นอน เรียกว่า quanta ซึ่งในขณะนั้น นักฟิสิกส์ทั่วไปมีสมมติฐานว่าค่าพลังงานรังสีต่างๆ เป็นค่าต่อเนื่อง เช่น คลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าชนิดต่างๆ

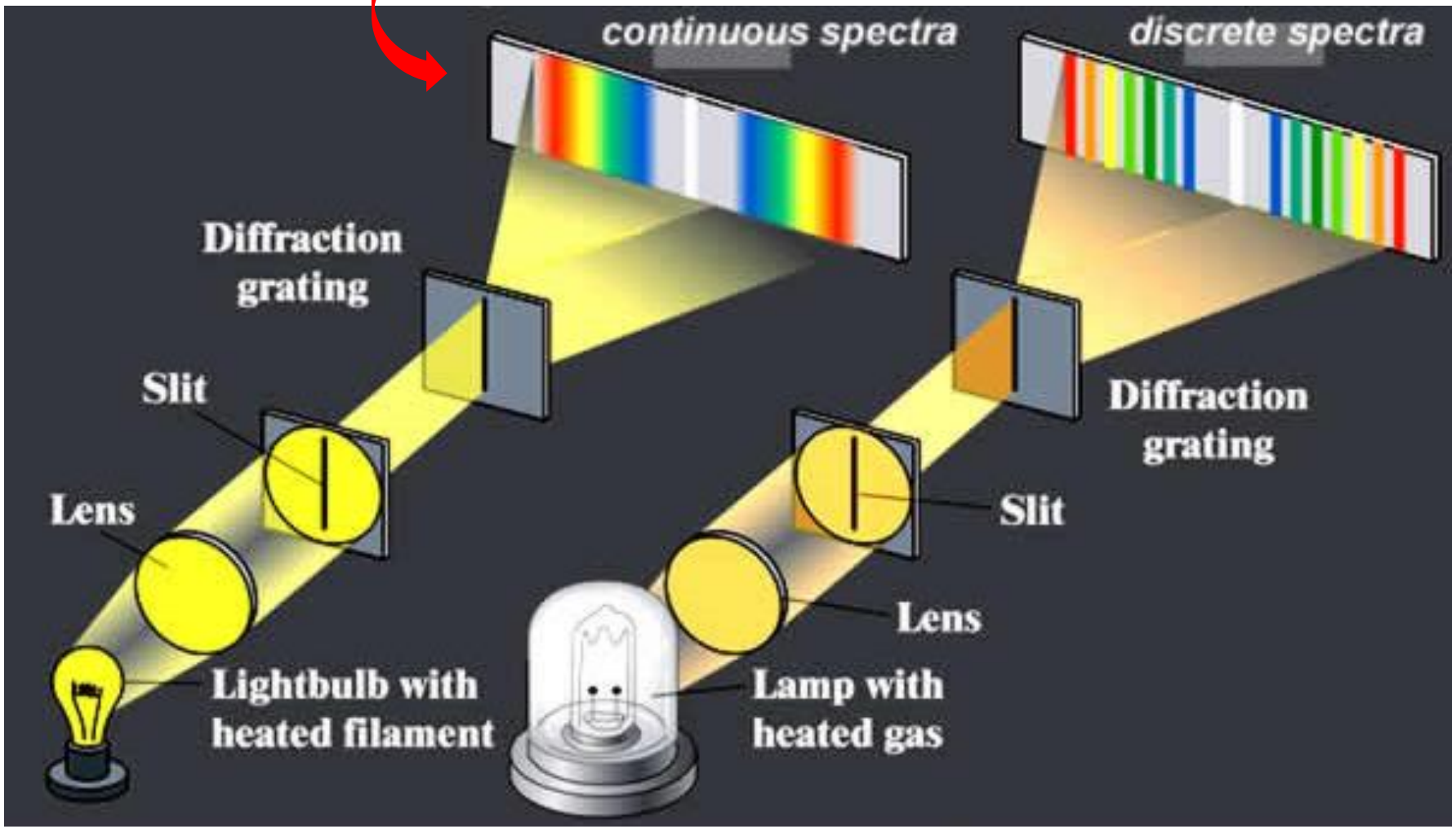




http://chemwiki.ucdavis.edu/

นักฟิสิกส์ทั่วไปมีสมมติฐานว่าค่าพลังงานรังสีต่างๆเป็นค่าต่อเนื่อง

“Max Plank” ของแข็งเมื่อได้รับความร้อน มีการแผ่รังสีที่มีพลังงานเป็นปริมาณไม่ต่อเนื่อง แต่มีค่าแน่นอน เรียกว่า quanta



http://sdsu-physics.org/physics180/physics180B/Topics/modern/phys180Bch28.html

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

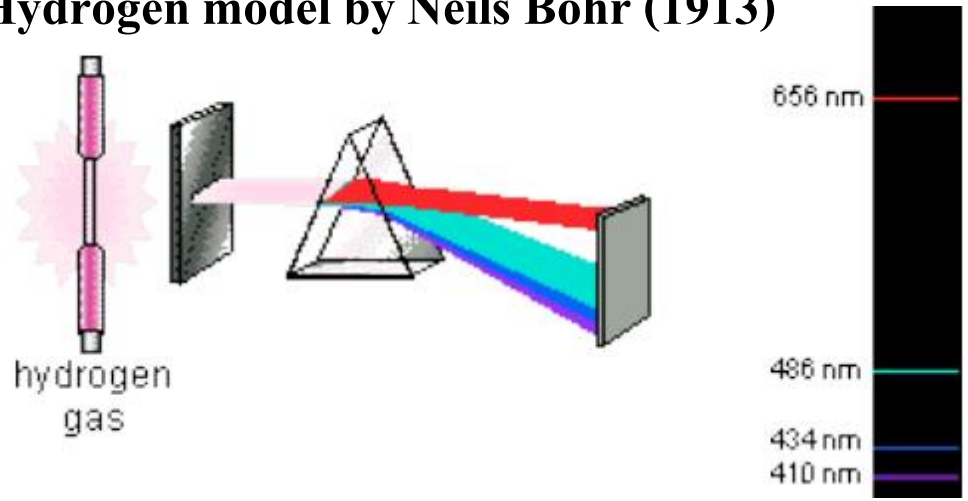
ν= frequency of radiation บางครั้งเขียนในรูปของ f

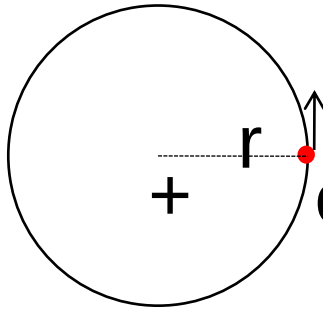
c = ความเร็วแสง (3×10^{8} m)

λ = ความยาวคลื่น

1.4 ทฤษฎีอะตอมของบอร์หและสเปกตรัมของธาตุไฮโดรเจน

Hydrogen model by Neils Bohr (1913)





$\mathbf{r = n^2 a_0}$

a_0 = Bohr radius (0.529 Å)

หรือ 0.529×10^{-10} m

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

จากการตั้งสมมติฐานของ Bohr สรุปความได้ว่า

1. อิเล็กตรอนเคลื่อนที่รอบๆนิวเคลียสในลักษณะวงกลมที่มีรัศมี r โดยอิเล็กตรอนมีมวล m_e และความเร็ว v การเคลื่อนที่นี้อิเล็กตรอนไม่มีการสูญเสียพลังงาน อยู่ในสถานะคงตัว (stationary state)

$m_e vr = n\hbar$ ($\hbar = h/2\pi$) เมื่อ h = Plank's constant

n = เลขควอนตัม = 1, 2, 3, ….

$$E_n = -\frac{(2\pi^2 m_e Z^2 e^4)}{h^2}\frac{1}{n^2}$$

$$E_n = -(1311.65\ \text{kJ/mol})\left(\frac{1}{n^2}\right)$$

$$E_n = -(13.605\ \text{eV})\left(\frac{1}{n^2}\right)$$

m_e (มวลของอิเล็คตรอน) = 9.11×10^{-28} g)

e (ประจุของอิเล็คตรอน) = 4.8×10^{-10} esu)

J

Z (atomic number of hydrogen) = 1

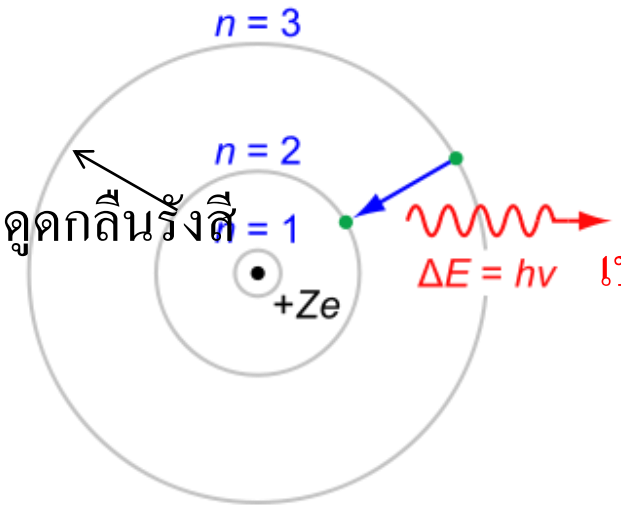
h = 6.6262 × 10-27 erg-sec

esu = electrostatic unit (1C = 3×10^9 esu)

จากการตั้งสมมติฐานของ Bohr สรุปความได้ว่า

2. เมื่ออิเล็กตรอนเปลี่ยนวงโคจร จะมีการดูดกลืนหรือเปล่งรังสีแม่เหล็กไฟฟ้า

- ถ้าวงโคจรใหม่มีพลังงานต่ำกว่าวงโคจรเดิม→อะตอมจะเปล่งรังสีออกมา
- ถ้าวงโคจรใหม่มีพลังงานสูงกว่าวงโคจรเดิม→อะตอมจะดูดกลืนรังสี



ดูดกลืนรังสี เปล่งรังสีออกมา

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

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

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

n_i = ระดับพลังงานเริ่มต้น

n_f = ระดับพลังงานสุดท้าย

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

$$\frac{1}{\lambda} = R_H\left[\frac{1}{n_i^2}-\frac{1}{n_f^2}\right]$$

R_H = Rydberg's constant = 1.09678×10^{-2} nm^{-1}

ตัวอย่าง จงคำนวณค่าความยาวคลื่นของแสง เมื่ออิเล็กตรอนของอะตอมไฮโดรเจนเคลื่อนที่จากระดับชั้นพลังงานที่สองไปยังระดับชั้นพลังงานที่สี่

$$\frac{1}{\lambda} = R_H\left[\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2}\right]$$

$$\frac{1}{\lambda} = (1.09678\times10^{-2}\,\text{nm}^{-1})\left[\frac{1}{2^2} - \frac{1}{4^2}\right]$$

$$\frac{1}{\lambda} = 0.002056\,\text{nm}^{-1}$$

$$\boldsymbol{\lambda = 486.3\ \text{nm}}$$

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

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

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

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

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

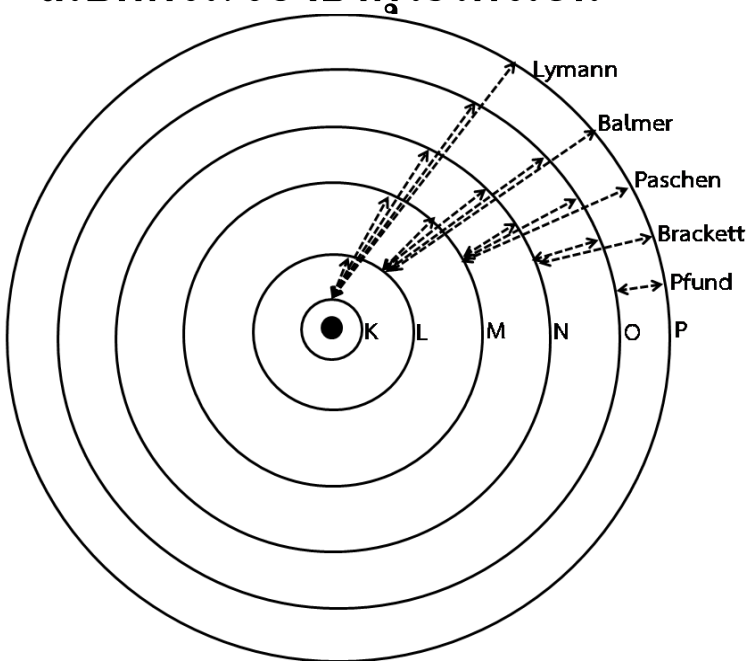
จาก $r = n^2a_0$

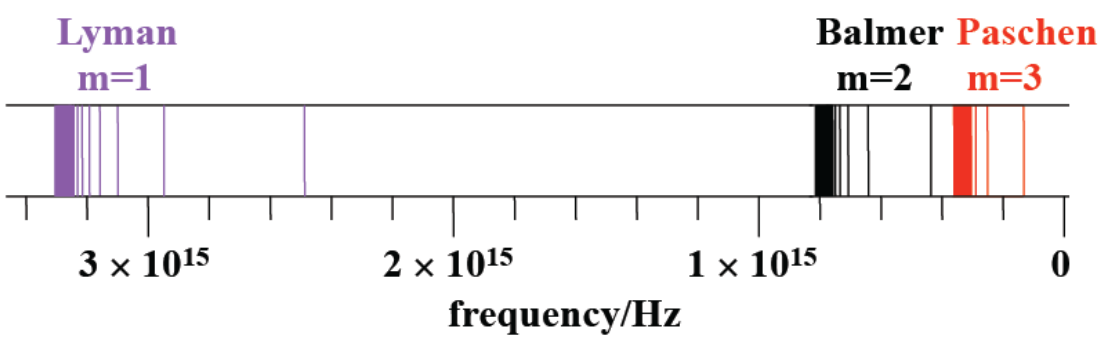
$r_1 = 1^2(0.529\times10^{-10}\ \text{m}) = 0.529\times10^{-10}\ \text{m} = 0.529\ \text{Å}$

$r_2 = 2^2(0.529\times10^{-10}\ \text{m}) = 2.116\times10^{-10}\ \text{m} = 2.116\ \text{Å}$

$r_3 = 3^2(0.529\times10^{-10}\ \text{m}) = 4.76\times10^{-10}\ \text{m} = 4.76\ \text{Å}$

สเปคตรัมของธาตุไฮโดรเจน





สเปคตรัมของธาตุไฮโดรเจน

$n_f = 1$ **Lymann**

$n_f = 2$ **Balmer**

$n_f = 3$ **Paschen**

$n_f = 4$ **Brakett**

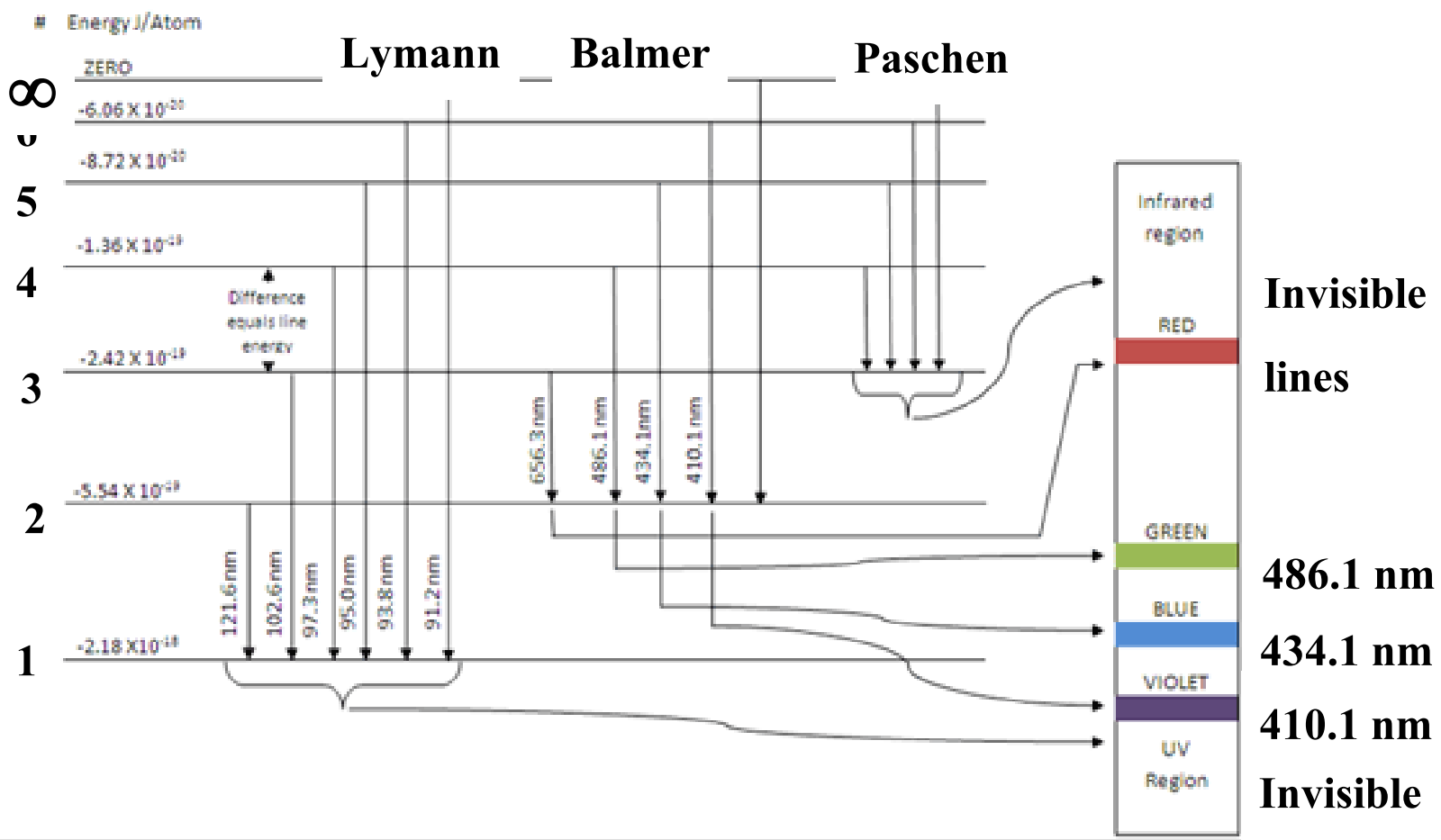
$n_f = 5$ **Pfund**

อนุกรม Lyman

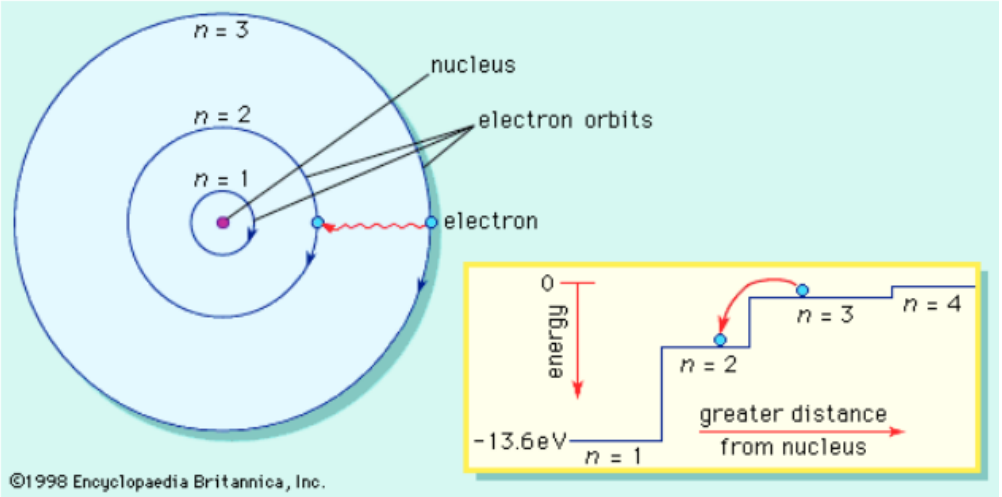
$$\frac{1}{\lambda} = 1.09678 \times 10^{-2}\ \text{nm}^{-1} \left[\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right]$$

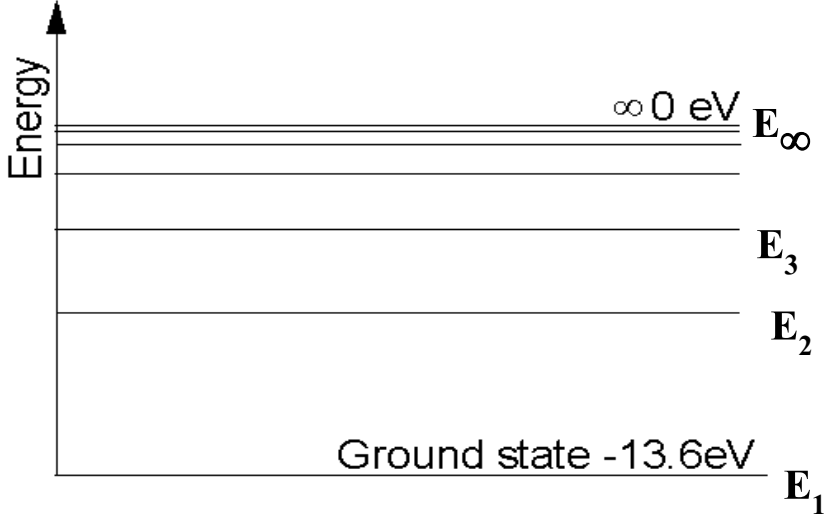
อนุกรม Balmer

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



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





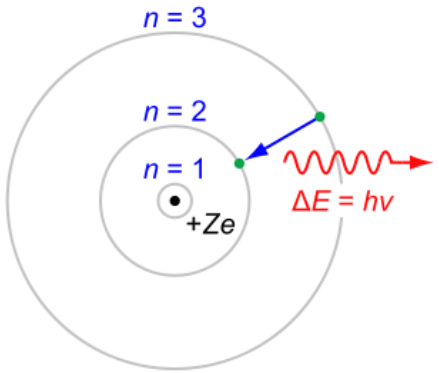
- เมื่ออิเล็คตรอนเปลี่ยนวงโคจร จะมีการดูดกลืนหรือเปล่งรังสีแม่เหล็กไฟฟ้า สำหรับอะตอมหนึ่งๆ เมื่อมีการเปลี่ยนสถานะครั้งหนึ่งจะมีโฟตอนเกี่ยวข้องเพียง 1 ตัวเท่านั้น

ถ้า $E_{n2} > E_{n1}$; ΔE มีค่ามากกว่าศูนย์ แสดงว่าอะตอมดูดรังสีแม่เหล็กไฟฟ้า

ถ้า $E_{n2} < E_{n1}$; ΔE มีค่าน้อยกว่าศูนย์ แสดงว่าอะตอมคาย(เปล่ง)รังสีแม่เหล็กไฟฟ้าออกมา

- เมื่อ $n = \infty$ ได้ค่า $E_\infty = 0$ เรียกว่า Zero energy เป็นพลังงานของอิเล็กตรอนอิสระ (อิเล็กตรอนที่หลุดออกไปจากอะตอม)
- เมื่อ $n = 1$ ได้ค่า E1= -13.605 eV พลังงานของสถานะพื้นจะเป็นลบมากที่สุดซึ่งหมายถึงพลังงานมีค่าต่ำที่สุด อิเล็คตรอนในสถานะนี้จะเสถียรกว่าสถานะอื่นๆ
- ถ้า $n > 1$ เรียก excited state (สถานะเร้าหรือสถานะกระตุ้น)

จากสเปกตรัมของไฮโดรเจนอะตอมดังทฤษฎีของ Bohr อะตอมในสถานะพื้น (ground state) ได้รับพลังงานจากภายนอก เช่น ไฟฟ้า ความร้อน หรือแสง อย่างเพียงพอ อะตอมอาจเปลี่ยนไปอยู่ในสถานะเร้า (excited state) จากนั้นถ้าทิ้งไว้เฉยๆ อะตอมนั้นๆจะพยายามกลับเข้าสู่สถานะที่มีพลังงานต่ำกว่า (ซึ่งเสถียรกว่า) และในขณะเดียวกันก็จะเปล่งรังสีแม่เหล็กไฟฟ้าออกมาด้วยความถี่ต่างๆกัน ขึ้นอยู่กับว่าอะตอมเหล่านั้นถูกเร้าขึ้นไปสู่สถานะใดและกลับเข้าสู่สถานะใด



จุดอ่อนของทฤษฎีของ Bohr

1. อธิบายได้เพียงสเปกตรัมของไฮโดรเจนและไอออนที่มีอิเล็กตรอนเพียงตัวเดียว เช่น He^{+} และ Li^{2+} เท่านั้น แม้แต่อะตอมของโลหะอัลคาไลซึ่งมีเวเลนซ์อิเล็คตรอนเพียงตัวเดียวก็ตาม (ns^1)

2. ทฤษฎีของ Bohr อธิบายโครงสร้างอะตอมในสองมิติเท่านั้น

ตัวอย่าง

1. สเปกตรัมของไอปรอทประกอบด้วยแสงสีหลายชนิด จงคำนวณพลังงาน (J/mol) ที่อะตอมปรอทรับเข้าไป เพื่อจะเปล่งแสงสีม่วงซึ่งมีความยาวคลื่น 4.36×10^{-7} m

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

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

1 mole $= 6.02 \times 10^{23}$ โฟตอน

จาก $\Delta E = \frac{hc}{\lambda}$

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

$= 4.56 \times 10^{-19}$ J (ต่อ 1 โฟตอน)

$$= \frac{4.56 \times 10^{-19}\ \text{J}}{1\ \text{โฟตอน}} \times \frac{6.02 \times 10^{23}\ \text{โฟตอน}}{1\ \text{mole}}$$

$= 2.75 \times 10^{5}$ J/mole

ตัวอย่าง

2. จะต้องให้พลังงานกับอะตอมไฮโดรเจนเท่าใด (หน่วย J) เพื่อกระตุ้นอิเล็กตรอนจากวงโคจรแรกไปสู่วงโคจรที่ 3 โดยใช้แบบจำลองของ Bohr

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

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

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

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

$$= 1.94 \times 10^{-18} \text{ J}$$

ตัวอย่าง

3. จงคำนวณความยาวคลื่นของแสง (nm) ที่ตรงกับการเกิดทรานสิชันจากระดับพลังงาน n =5 ไปยัง n =2 ของอะตอมไฮโดรเจน

$$\frac{1}{\lambda} = R_H\left[\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2}\right]$$

R_H = Rydberg's constant = $1.09678 \times 10^{-2}\ nm^{-1}$

$$\frac{1}{\lambda} = 1.09678 \times 10^{-2}\ nm^{-1}\left[\frac{1}{5^2} - \frac{1}{2^2}\right]$$

$\lambda =$ nm

ความยาวคลื่นแสงที่คายออกมา เท่ากับ nm

สมมติฐานของเดอบรอยล์

Louis de Broglie (1925) ได้เสนอความคิดเกี่ยวกับ dual nature ของอิเล็คตรอน นำไปสู่ข้อสรุปที่ว่าคลื่นแสดงตัวเป็นอนุภาคได้ และอนุภาคก็แสดงตัวเป็นคลื่นได้

จากทฤษฎี $E = h\nu = hc/\lambda$

และทฤษฎีสัมพัทธภาพพิเศษ $E = pc$ เมื่อ p คือ โมเมนตัมของ photon ($p = mv$)

ทั้งสองทฤษฎีสรุปได้ว่า $pc = hc/\lambda$

$p = h/\lambda$ สมการแสดงสมบัติเชิงอนุภาคและคลื่นมีความสัมพันธ์

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

λ= wavelength of matter wave

p = momentum of particle

} dual nature

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

ตัวอย่าง

จงคำนวณความยาว (nm) ของอะตอมไฮโดรเจน (มวล = 1.67×10^{-27} kg) ซึ่งเคลื่อนที่ด้วยความเร็ว 7.00×10^{2} cm/s

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

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

$1\ J = 1\ kgm^2s^{-2}$

$$\lambda = \frac{(6.63 \times 10^{-34}\ Js)\ (kgm^2s^{-2} / J) \qquad (100\ cm/1m)}{(1.67 \times 10^{-27}\ kg)\ (7.00 \times 10^{2}\ cm/s)}$$

$$= 5.67 \times 10^{-8}\ m \quad (10^{9}\ nm/1m)$$

$$= 56.7\ nm$$

27

หลักความไม่แน่นอนของไฮเซนเบิร์ก (Heisenberg uncertainty principle):

ไฮเซนเบิร์กเสนอว่า เป็นไปไม่ได้ที่จะทราบค่าที่แน่นอนทั้งโมเมนตัมและตำแหน่งของอนุภาคพร้อมๆกัน นั่นคือ

change in momentum

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

change in position

Δx = uncertainty of position ความไม่แน่นอนในการวัดตำแหน่งตามแนวแกน x

Δp = uncertainty of momentum ความไม่แน่นอนสำหรับค่าโมเมนตัมเชิงเส้นตรง

จาก uncertainty principle ไม่สามารถบอกวงโคจรที่แน่นอนของอิเล็คตรอนรอบนิวเคลียสได้ ตำแหน่งของอิเล็คตรอนเป็นเพียงความน่าจะเป็นที่จะพบอิเล็คตรอนในตำแหน่งหนึ่งๆเท่านั้น

แนวคิดพื้นฐานของ quantum mechanics ที่ใช้อธิบายปรากฏการณ์ของอิเล็คตรอนในอะตอม

1. สสารมีสมบัติของคลื่น จึงวิเคราะห์หาสมบัติต่างๆของอิเล็คตรอนโดยใช้ wave equation

2. อิเล็คตรอนมีขนาดเล็กเกินกว่าหาสมบัติได้โดยตรง จึงพิจารณาสมบัติต่างๆของอิเล็คตรอนได้แค่ระดับ โอกาสหรือความน่าจะเป็น (probability) จึงนิยมใช้คำว่า ความหนาแน่นอิเล็คตรอน (electron density) หรือ โอกาสที่จะพบอิเล็คตรอน ที่บริเวณต่างๆ

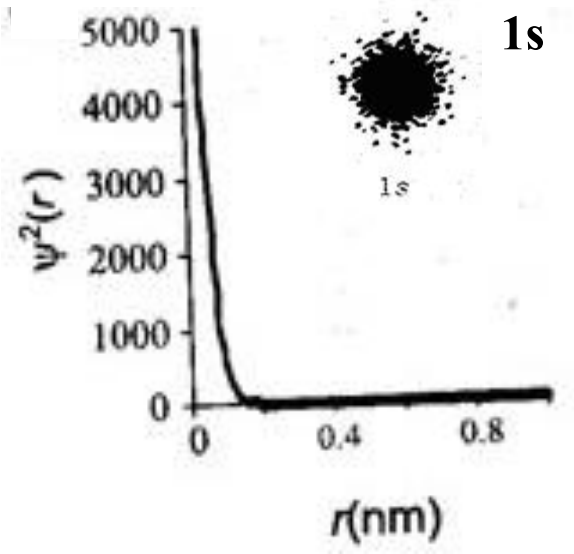
1.5 กลศาสตร์คลื่น (Wave mechanics)

ทฤษฎีที่ใช้อธิบายโครงสร้างอะตอมและสมบัติของอนุภาคภายในอะตอม ซึ่งมีรากฐานจากสมมติฐานของ Louis de Broglie

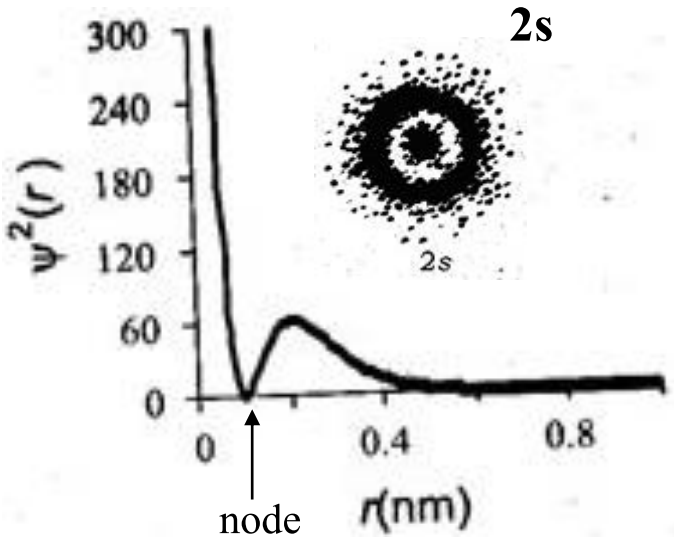
อิเล็คตรอนมีสมบัติเป็นคลื่นได้ การอธิบายปรากฏการณ์หรือพฤติกรรมต่างๆของอิเล็คตรอนจึงใช้สมการคลื่น (wave equation) ของ Schrödinger ซึ่งใช้ได้สำหรับ H atom และอะตอมบางอะตอมที่มีอิเล็คตรอนมากกว่า 1

เนื่องจากอิเล็คตรอนมีขนาดเล็กมาก จึงพิจารณาสมบัติต่างๆของอิเล็คตรอนได้จากความน่าจะเป็น หรือโอกาส (probability) เท่านั้น ในการแก้ปัญหาต่างๆจึงใช้คำว่า ความหนาแน่นของอิเล็คตรอน (electron density) หรือ โอกาสที่จะพบอิเล็คตรอนที่บริเวณต่างๆ

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



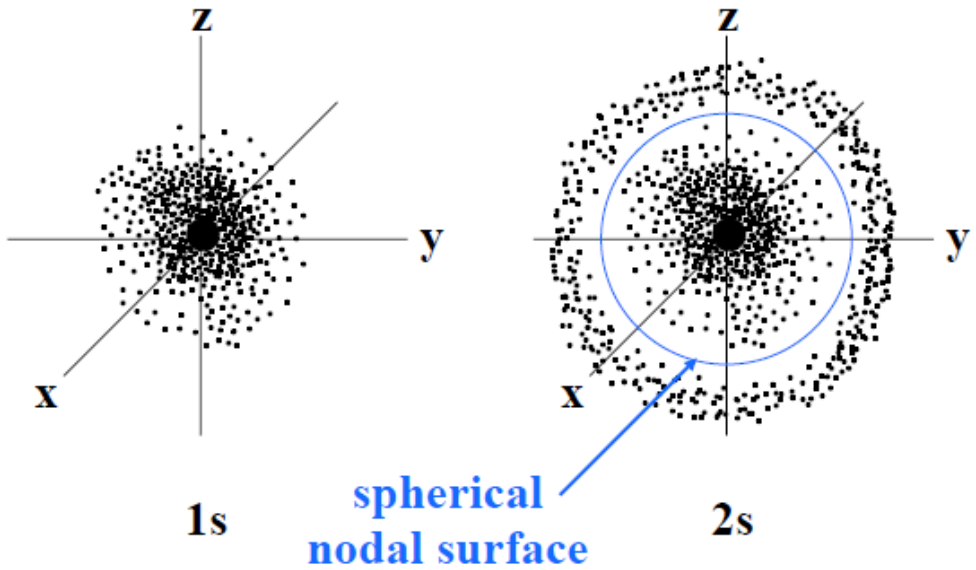
โอกาสที่พบใน 1s orbital มากที่สุดอยู่ที่ระยะ 0.05 nm จากนิวเคลียส ถ้าไกลกว่านี้โอกาสการพบอิเล็คตรอนจะน้อยลง และถ้า r มากกว่า 0.4 nm แล้ว โอกาสที่จะพบ 1s electron เกือบไม่มีเลย



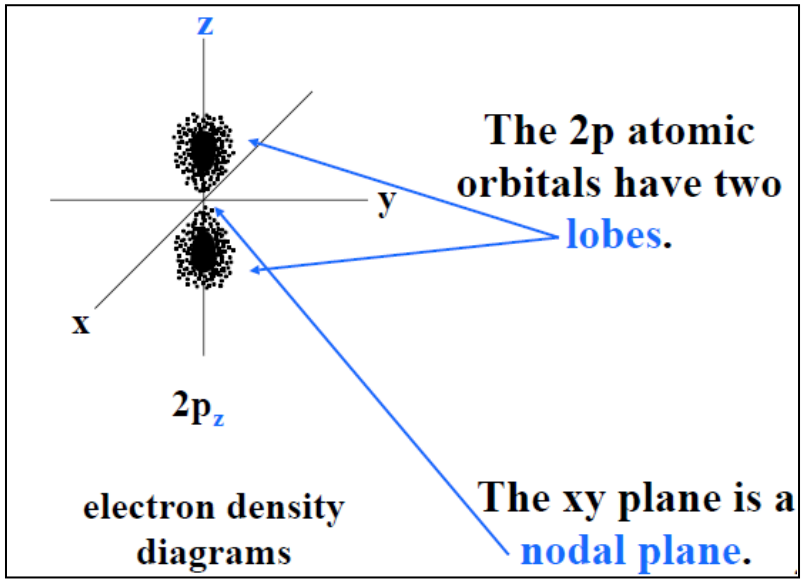
2s orbital ที่ตำแหน่งห่างจากนิวเคลียส ความหนาแน่นของอิเล็คตรอนลดลงจนเป็นศูนย์แล้วเพิ่มขึ้นอีกครั้ง บริเวณที่ความหนาแน่นของอิเล็คตรอนลดลงจนเป็นศูนย์เรียกว่า node

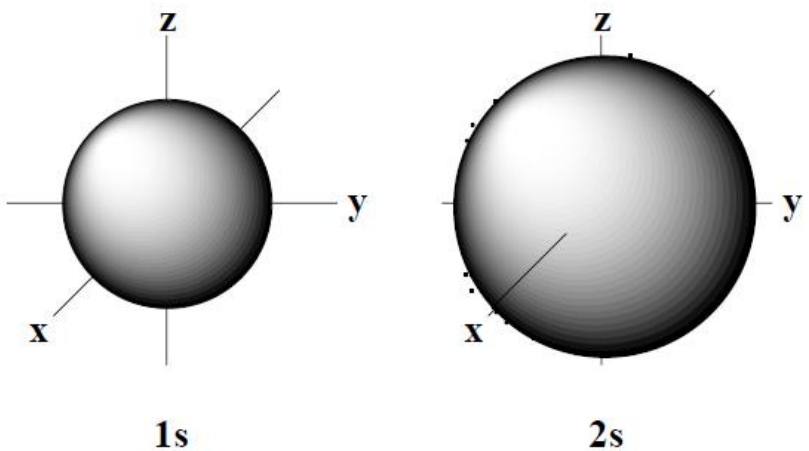
เขียนผิวของบริเวณที่มีโอกาสที่จะพบอิเล็คตรอน จะได้ผิวเป็นรูปทรงกลม ดังนั้น s orbital มีรูปร่างเป็นทรงกลม (spherical)

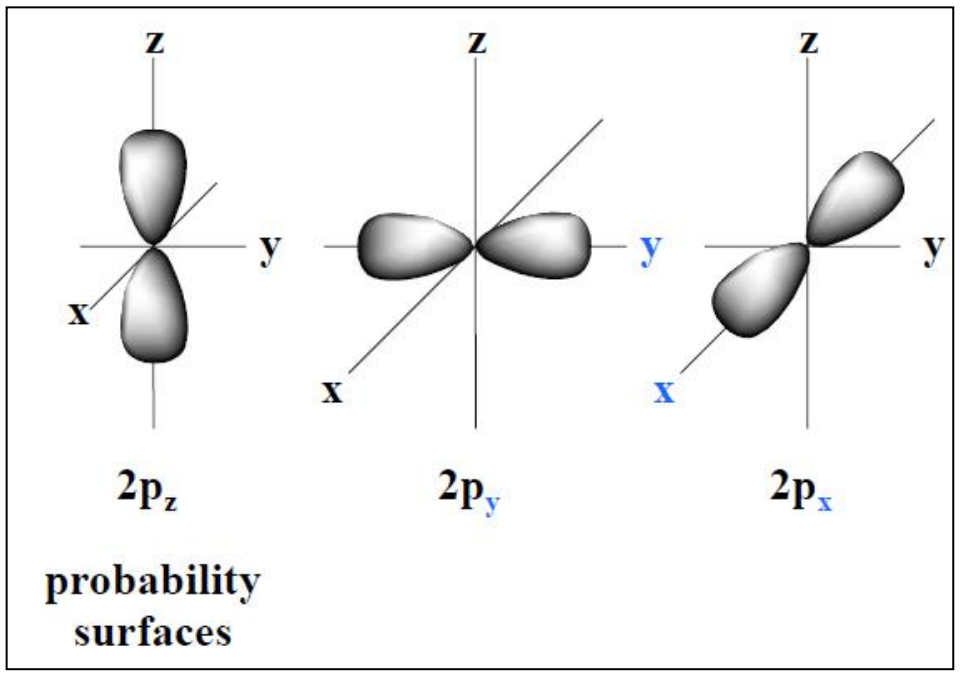
http://chemmaster.co.in/showchapter.php?id=2&id2=46&title=Structure%20of%20Atom



electron density diagrams







1.6 เลขควอนตัมต่างๆ

Electron configuration (โครงสร้างแบบอิเล็คตรอนในอะตอม)

หมายถึงการจัดเรียงอิเล็คตรอนในออร์บิทัลของอะตอม (atomic orbital)

ออร์บิทัลของอะตอมถูกกำหนดด้วยเลขควอนตัม 3 ชนิด

1. *n* (the principle quantum number): เลขควอนตัมหลัก

แสดงระดับพลังงานในอะตอมซึ่งถูกจัดเป็นระดับหลักหรือวง (shell)

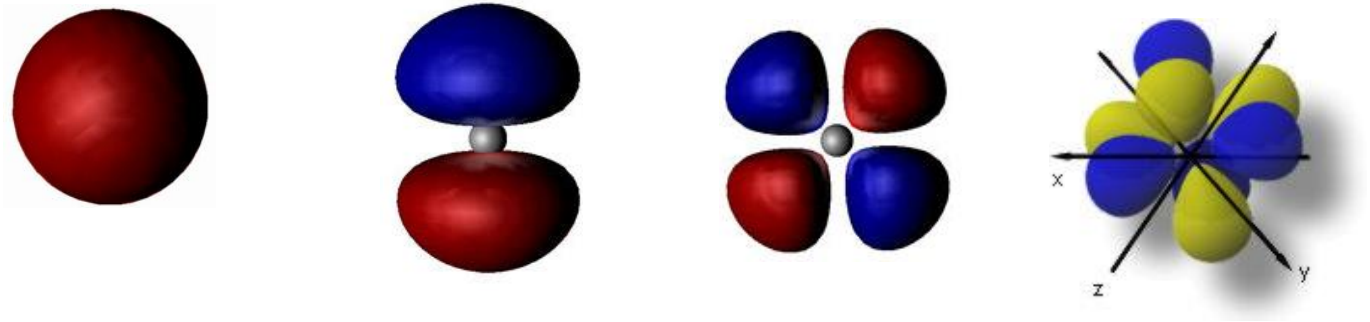
n **= 1**	**K shell**
n **= 2**	**L shell**
n **= 3**	**M shell**
n **= 4**	**N shell**
n **= 5**	**O shell etc.**

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_ℓแสดงการวางตัว (orientation) ของออร์บิทัล

จำนวนของออร์บิทัลในแต่ละชั้นย่อยถูกกำหนดโดยจำนวนค่าของ m_l ที่มีได้ และออร์บิทัลที่อยู่ในชั้นย่อยเดียวกัน มีระดับพลังงานเท่ากัน (degeneracy)

$m_l = -\ell,\ldots 0,\ldots \ell$

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

n = 2, $\ell = 0$ $m_\ell = 0$ ใน s subshell ประกอบด้วย 1 orbitals

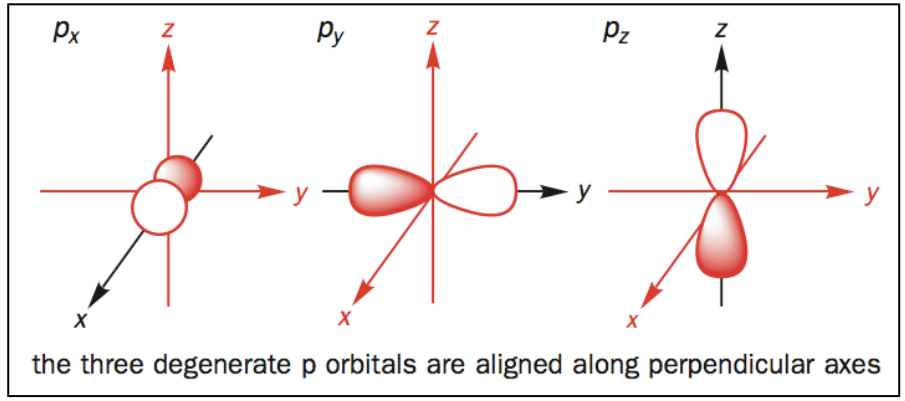
$\ell = 1$ $m_\ell = -1,0,1$ ใน p subshell ประกอบด้วย 3 orbitals

n = 3, $\ell = 0$ $m_\ell = 0$ ใน s subshell ประกอบด้วย 1 orbital

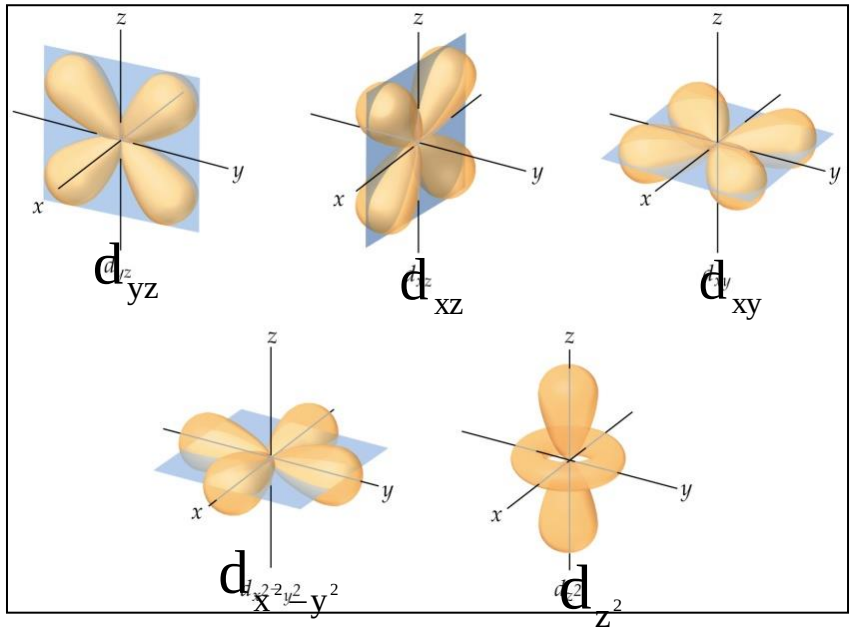
$\ell = 1$ $m_\ell = -1,0,1$ ใน p subshell ประกอบด้วย 3 orbitals

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

ℓ	m_ℓ	จำนวน degeneracy	จำนวนออร์บิทัล	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	



the three degenerate p orbitals are aligned along perpendicular axes



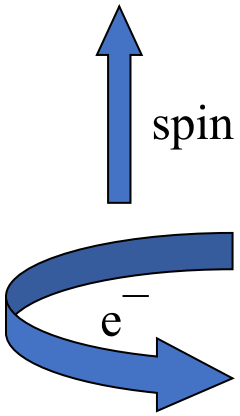
สรุปค่าต่างๆของเลขควอนตัม

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^-

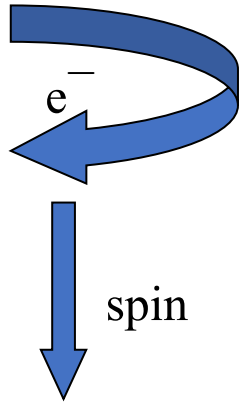
m_s (spin quantum number) เลขควอนตัมสปิน

เกิดจากอิเล็คตรอนมีการหมุนรอบตัวเอง ทำให้เกิดสนามแม่เหล็กอ่อนๆขึ้น ซึ่งอิเล็คตรอนเกิดการสปินได้ 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

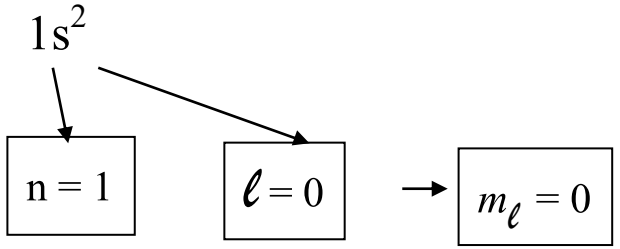
	n	ℓ	m_ℓ	m_s
ก	3	2	–1	1/2
ข	2	3	–1	1/2
ค	3	2	–3	1/2
ง	4	1	1	3/2
จ	4	5	3	–1/2

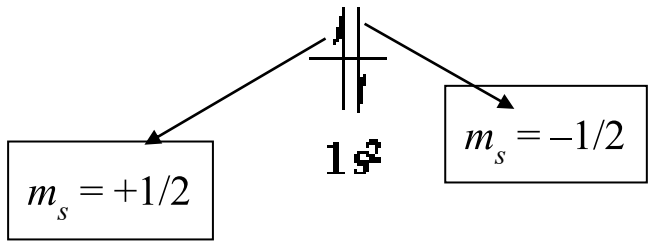
1.7 การจัดเรียงอิเล็กตรอนของธาตุในตารางธาตุ

การจัดเรียงอิเล็กตรอนเป็นไปตามกฎดังนี้

1. Pauli exclusion principle (หลักการกีดกันของเพาลี)

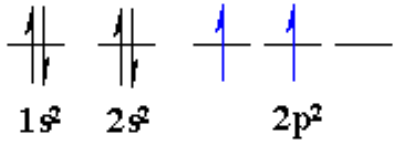
“อิเล็คตรอนคู่ใดๆในอะตอมจะมีค่า n, ℓ, m_ℓ และ m_s เหมือนกันทั้ง 4 ค่าไม่ได้” แต่จะมีเหมือนกันได้มากที่สุด 3 ค่า โดยที่อิเล็คตรอนคู่นี้ต้องมีสปินในทิศทางตรงกันข้าม

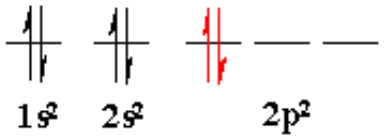




2. Hund's rule

"การเติมอิเล็คตรอนในออร์บิทัลที่มีพลังงานเท่ากัน ให้เติมอิเล็คตรอนเดี่ยวๆ ให้เต็มออร์บิทัลก่อน แล้วจึงเติมอิเล็คตรอนให้เข้าคู่กัน"

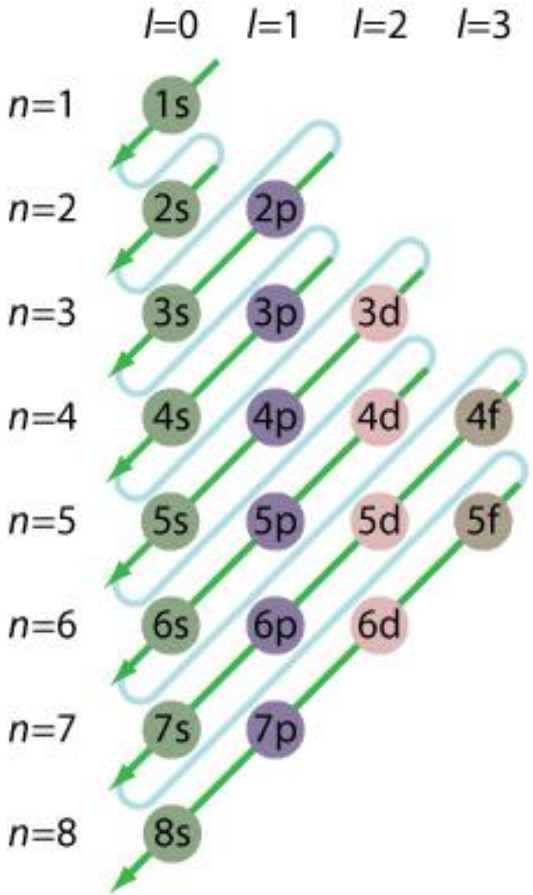
(a) 

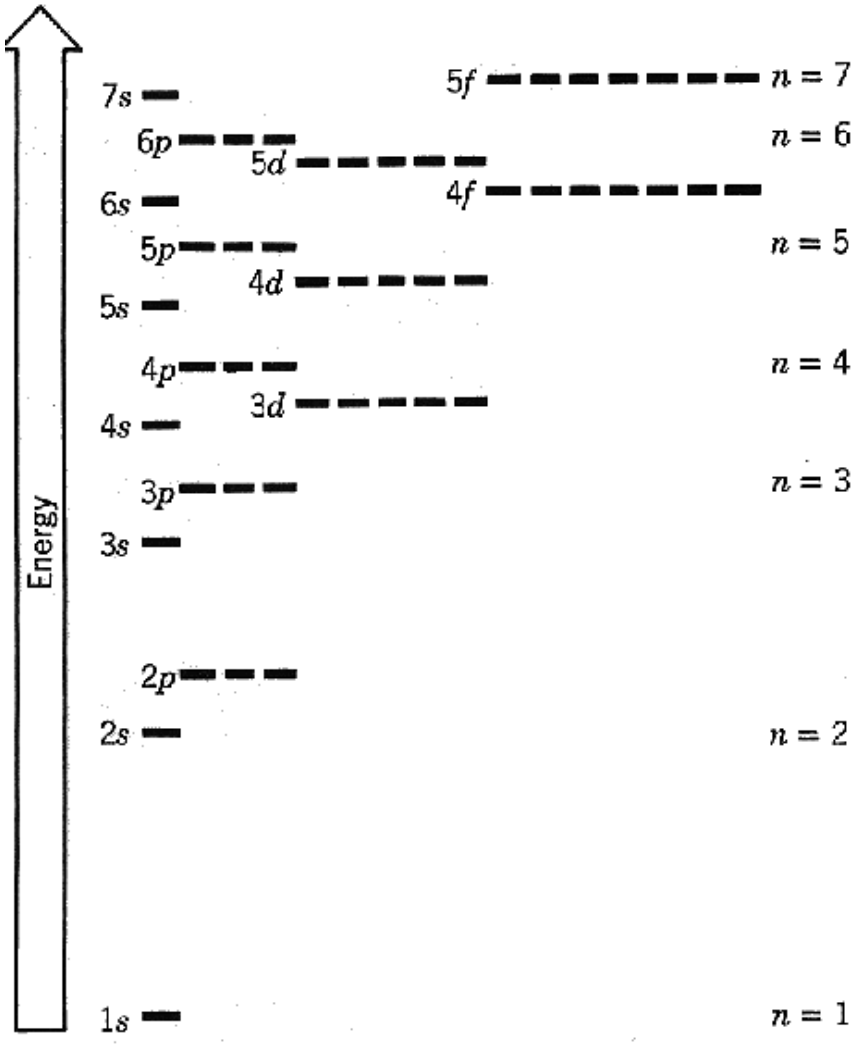
(b) 

Number of Electrons	*Arrangement*	*Unpaired e⁻*	
1	↑ _ _	1	paramagnetic
2	↑ ↑ _	2	
3	↑ ↑ ↑	3	
4	↑↓ ↑ ↑	2	
5	↑↓ ↑↓ ↑	1	
6	↑↓ ↑↓ ↑↓	0	diamagnetic

3. Aufbau (Building up principle)

ต้องเติมอิเล็คตรอนในระดับพลังงานต่ำกว่าให้เต็มก่อน แล้วจึงเติมในออร์บิทัลที่พลังงานสูงขึ้น





				K	L	M	N	หมู่	1s	2s	2p
hydrogen	$_{1}H$	$1s^1$		1				1			
helium	$_{2}He$	$1s^2$		2							
lithium	$_{3}Li$	$1s^2\ 2s^1$	[He] $2s^1$	2	1			1			
beryllium	$_{4}Be$	$1s^2\ 2s^2$	[He] $2s^2$	2	2			2			
boron	$_{5}B$	$1s^2\ 2s^2\ 2p^1$	[He] $2s^2\ 2p^1$	2	3			3			
carbon	$_{6}C$	$1s^2\ 2s^2\ 2p^2$	[He] $2s^2\ 2p^2$	2	4			4			
nitrogen	$_{7}N$	$1s^2\ 2s^2\ 2p^3$	[He] $2s^2\ 2p^3$	2	5			5			
oxygen	$_{8}O$	$1s^2\ 2s^2\ 2p^4$	[He] $2s^2\ 2p^4$	2	6			6			
fluorine	$_{9}F$	$1s^2\ 2s^2\ 2p^5$	[He] $2s^2\ 2p^5$	2	7			7			
neon	$_{10}Ne$	$1s^2\ 2s^2\ 2p^6$	[He] $2s^2\ 2p^6$	2	8			8			

$_{18}Ar = 1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6$

$_{19}K = 1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^1 \rightarrow [Ar]\ 4s^1$

$_{20}Ca = 1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^2 \rightarrow [Ar]\ 4s^2$

$_{21}Sc = 1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 4s^2\ 3d^1 \rightarrow [Ar]\ 4s^2\ 3d^1$

$_{21}Sc = 1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^1\ 4s^2 \rightarrow [Ar]\ 3d^1\ 4s^2$

$_{21}Sc = [Ar]\ 3d^1\ 4s^2$ $\qquad$ $Sc^+ = [Ar]\ 3d^1\ 4s^1$

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

การจัดเรียงอิเล็กตรอนแบบ half filled และ full filled เป็นการจัดเรียงที่เสถียรเพราะมีพลังงานต่ำ

เมื่ออะตอมถูกเร้า อิเล็กตรอนที่มีเลขควอนตัมสูงสุดมักรับพลังงาน ทำให้อิเล็กตรอนนั้นมีพลังงานสูงขึ้น เช่น

$1s^2\ 2s^1$ สถานะพื้น

$1s^2\ 2s^2\ 2p^1$ สถานะพื้น

$1s^2\ 2s^1 2p^2$ สถานะเร้า อิเล็กตรอนจาก 2s ไปยัง 2p

$1s^2\ 2s^2\ 2p^4\ 3s^1$ สถานะ_____

$1s^2\ 2s^2 2p^2$ สถานะ_____

แบบฝึกหัด

1. จะต้องให้พลังงานกับอะตอมไฮโดรเจนเท่าใด (หน่วย J) เพื่อกระตุ้นอิเล็กตรอนจากวงโคจร3ไปสู่วงโคจรที่ 5 โดยใช้แบบจำลองของ Bohr
2. วัสดุชนิดใดใช้เป็นวัสดุกำบังอนุภาคเบต้า
3. ระดับพลังงานของอิเล็คตรอนระดับใดที่มีค่าพลังงานมากที่สุด
4. อิเล็คตรอนของไฮโดรเจนต้องใช้พลังงานเท่าใดเพื่อให้อิเล็คตรอนจากวงโคจรหนึ่งไปสู่วงโคจรสี่
5. s orbital มีรูปร่างอย่างไร เพราะเหตุใดจึงมีรูปร่างเช่นนั้น
6. จงเขียนการจัดเรียงอิเล็กตรอนของอะตอมและไอออนต่อไปนี้

   Cs, Ca, Ba^{2+}, Fe, Cu^{2+}
7. จงระบุค่า n, ℓ, m_ℓ ของ 5d orbital