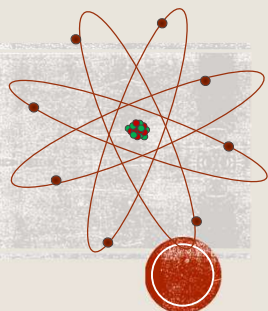


โครงสร้างอะตอม

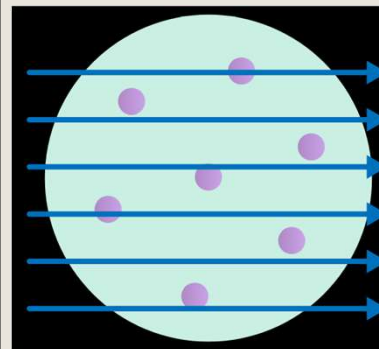


อาจารย์ ดร.นิรพรรณ ธรรมจันทร์

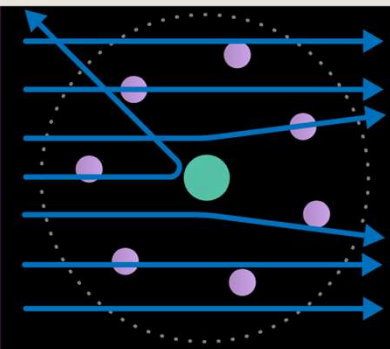
วิชา คม 331

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.

2020

2

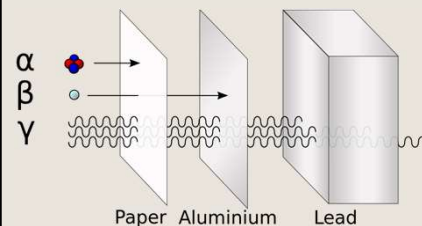
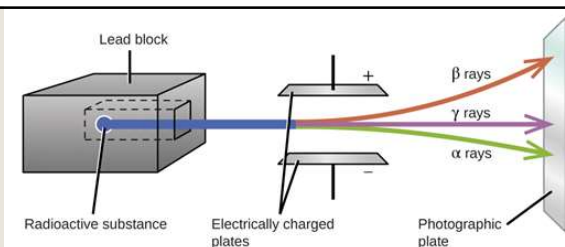
กัมมันตรังสี

รังสีทั้ง 3 เกิดจากการสลายตัวของสารกัมมันตรังสี เช่น ยูเรเนียม

α จะเบี่ยงเบนกับขั้วโลหะประจุบวก

β จะเบี่ยงเบนกับขั้วโลหะประจุลบ

γ เหมือนรังสีเอกซ์ ไม่มีประจุ



α (${}^4_2\text{He}$) อำนาจทะลุทะลวงต่ำมาก กระดาษเพียง 1 แผ่น หรือ 2 แผ่นก็สามารถกั้นได้

β มีอิเล็กตรอน (${}^0_{-1}\text{e}$) และโพสิตรอน (${}^0_{+1}\text{e}$)

γ สามารถทะลุผ่านแผ่นอะลูมิเนียมและทะลุผ่านแผ่นตะกั่วหนา 8 mm ได้

2020

3

นีลส์ โบร์ (Niels Bohr) เสนอว่า อิเล็กตรอนอยู่เป็นชั้น ๆ รอบนิวเคลียส



2020

4

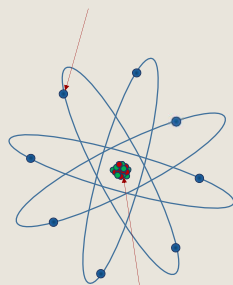
ภายในอะตอมประกอบไปด้วยอนุภาค 3 ชนิด คือ โปรตอน นิวตรอน และอิเล็กตรอน

อะตอม (atom) หมายถึง สิ่งที่ไม่สามารถแบ่งย่อยให้เล็กลงได้อีก

โปรตอนและนิวตรอนอัดแน่นรวมกันอยู่ใจกลางอะตอม 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}

อิเล็กตรอนวิ่งรอบนิวเคลียสอย่างรวดเร็ว



นิวเคลียสประกอบด้วยโปรตอนและนิวตรอน

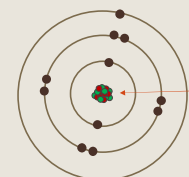
2020



สัญลักษณ์การเขียนเลขอะตอมและมวลอะตอมของธาตุใด ๆ (X) $\frac{A}{Z}X$

แผนภาพแสดงอะตอมของโซเดียม

เลขมวล $\rightarrow 23$
เลขอะตอม $\rightarrow 11$ **Na**



11 โปรตอน และ
12 นิวตรอน

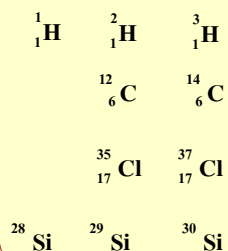
เราสามารถหาจำนวนโปรตอน นิวตรอนและอิเล็กตรอนใน $^{16}_8\text{O}$ และ $^{31}_{15}\text{P}$ ได้หรือไม่

2020



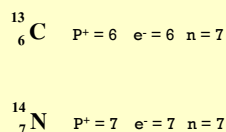
Isotope

ไอโซโทป คือ อะตอมของธาตุชนิดเดียวกันที่มีจำนวนโปรตอนเท่ากัน แต่จำนวนนิวตรอนต่างกัน



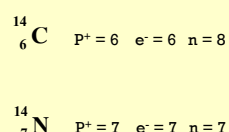
Isotone

ไอโซโทน คือ อะตอมของธาตุต่างชนิดกันมีเลขอะตอมและเลขมวลต่างกัน แต่มีจำนวนนิวตรอนเท่ากัน



Isobar

ไอโซบาร์ คือ อะตอมของธาตุต่างชนิดกัน แต่มีเลขมวลเท่ากัน

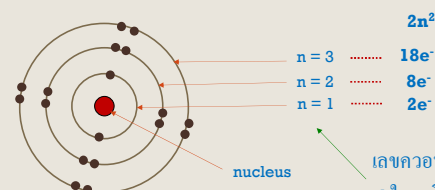


2020



วงชั้นหรือระดับพลังงานของอิเล็กตรอน

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

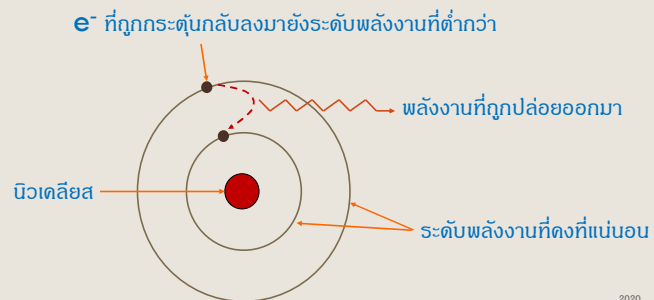


เลขควอนตัม = เลขที่บ่งถึงสมบัติและพลังงานของ e^- ในวงโคจร (ระดับพลังงานของ e^-)

2020



นีลส์ โบร์ (Niels Bohr) อธิบายปรากฏการณ์การเกิดสเปกตรัมของอะตอม ซึ่งก็คือค่าพลังงานที่จะถูกปล่อยออกมาหรือถูกดูดเข้าไปของอะตอมชนิดต่าง ๆ



2020

9

แบบจำลอง H-atom ของ Bohr

Bohr เสนอสมการหาพลังงานของอิเล็กตรอนของอะตอม H

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

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

Z = เลขอะตอม (จำนวนโปรตอน)

n = เลขจำนวนเต็ม (เลขควอนตัม) มีค่าตั้งแต่ 1 ถึง ∞

- พลังงานของอิเล็กตรอนในวงโคจรหนึ่งจะขึ้นกับค่า n
- เมื่อ n เท่ากับ ∞ พลังงานของอิเล็กตรอนมีค่าเป็นศูนย์
- เมื่ออิเล็กตรอนเข้าใกล้นิวเคลียสมากขึ้นจะมีพลังงานคิดลบมากขึ้น

2020

10

เมื่ออิเล็กตรอนเปลี่ยนวงโคจร จะมีการดูดหรือคายพลังงาน

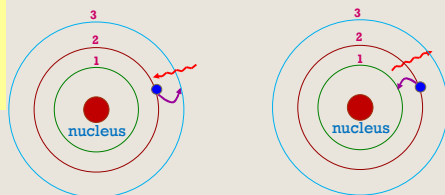
ถ้าเปลี่ยนจากระดับ n_i ไป n_f

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

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

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

รับพลังงานจาก
สิ่งแวดล้อม
ดูดพลังงาน

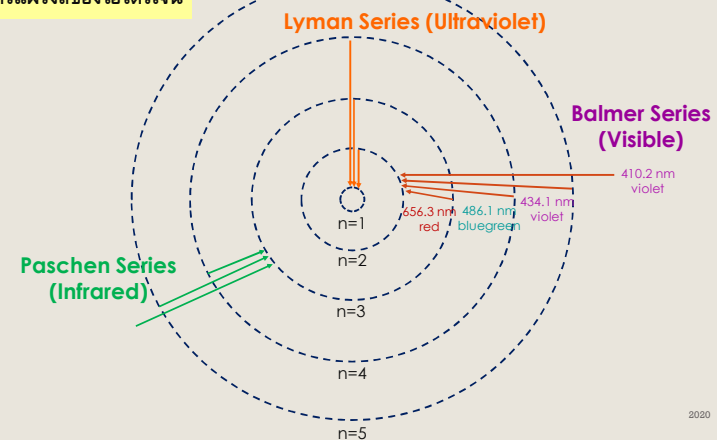


พลังงานสูญเสียให้กับ
สิ่งแวดล้อม
คายพลังงาน

2020

11

อนุกรมการแผ่รังสีของไฮโดรเจน



2020

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

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

2020

13

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

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

$$\therefore \lambda = \frac{hc}{\Delta E} = \frac{(6.63 \times 10^{-34} \text{ Js})(3 \times 10^8 \text{ m/s})}{(4.58 \times 10^{-19} \text{ J})}$$

$$= 4.34 \times 10^{-7} \text{ m}$$

$$\lambda = 434 \text{ nm}$$

2020

14

เลขควอนตัม

- * เลขควอนตัมหลัก (principle quantum number, n)
 - * เลขควอนตัมโมเมนตัมเชิงมุม (orbital angular momentum quantum number, ℓ)
 - * เลขควอนตัมแม่เหล็ก (magnetic quantum number, m_ℓ)
 - * เลขควอนตัมสปิน (Spin quantum number, m_s) $\rightarrow$ บอกถึงพฤติกรรมของอิเล็กตรอนหนึ่งๆ
- } อธิบายการกระจายอิเล็กตรอนในอะตอม

2020

15

เลขควอนตัมหลัก (n)

n เป็นเลขจำนวนเต็ม 1, 2, 3,

n บอกถึง ระดับพลังงานของออร์บิทัล

n ขึ้นกับระยะเฉลี่ยระหว่างอิเล็กตรอนในออร์บิทัลหนึ่งๆ กับนิวเคลียส

ยิ่ง n มีค่ามาก ระยะเฉลี่ยจากอิเล็กตรอนในออร์บิทัลถึงนิวเคลียสยิ่งมาก

ออร์บิทัลจึงมีขนาดใหญ่ขึ้นด้วย

2020

16

เลขควอนตัมโมเมนตัมเชิงมุม (l)

บอกถึงรูปร่างของออร์บิทัลโดย l ขึ้นกับค่าของ n

l เป็น subshell ของ n

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

$n=2, l=0, 1$

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

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

2020

17

เลขควอนตัมแม่เหล็ก (m_l)

m_l บอกถึงแนวการจัดตัว (ทิศทาง) ของออร์บิทัล

m_l ขึ้นกับค่า l โดย $m_l = -l, -(l+1), \dots, 0, \dots, (l-1), +l$

$l=0, m_l=0$

$l=1, m_l=-1, 0, 1$

$l=2, m_l=-2, -1, 0, 1, 2$

จำนวนค่า m_l บอกถึงจำนวนออร์บิทัล
ในแต่ละชั้นย่อยตามค่า l ที่ระบุ

ถ้า $n=2, l=1, m_l=-1, 0, 1$

ระดับพลังงานที่ 2 มีชั้นย่อยคือ 2p ออร์บิทัล จำนวน 3 ออร์บิทัล

2020

18

S-ออร์บิทัล

1s

2s

3s

ทุก ๆ เลขควอนตัม s ออร์บิทัลมีรูปร่างเป็นทรงกลมเหมือนกัน แต่
ต่างกันที่ขนาดที่จะเพิ่มขึ้นตามเลขควอนตัมหลัก

2020

19

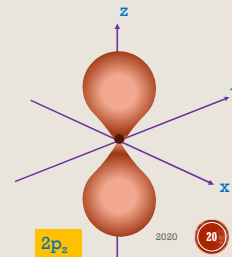
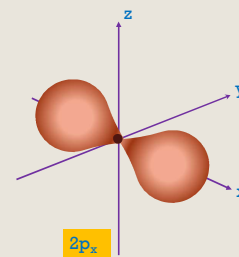
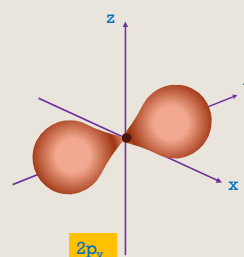
p-ออร์บิทัล

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 มีค่าเป็นไปได้อีก 3 ค่า จึงมี p ออร์บิทัล 3 ออร์บิทัลที่มีขนาดรูปร่างและพลังงาน
เหมือนกัน แต่มีแนวหลักต่างทิศทางกัน



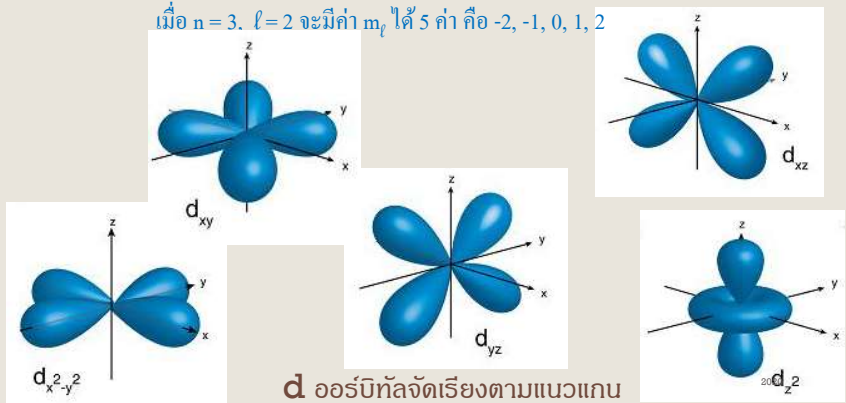
2020

20

d-ออร์บิทัล

ค่า n ต่ำสุดที่เป็นไปได้สำหรับ d ออร์บิทัล คือ 3 จึงเริ่มจาก 3d ออร์บิทัล

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



d ออร์บิทัลจัดเรียงตามแนวแกน

ความสัมพันธ์ระหว่างเลขควอนตัมกับอะตอมมีดออร์บิทัล

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	$3d_{xy}, 3d_{xz}, 3d_{yz}, 3d_{x^2-y^2}, 3d_{z^2}$
.	.	.	.	.
.	.	.	.	.
.	.	.	.	.

2020

22

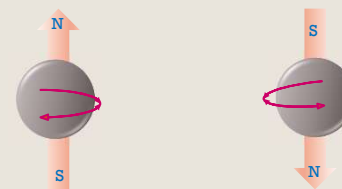
เลขควอนตัมสปิน (m_s)

- * เพื่ออธิบายเส้นสเปกตรัมที่แยกออกมาเมื่อได้รับอิทธิพลสนามแม่เหล็กจากภายนอก
- * โดยอธิบายว่าให้อิเล็กตรอน มีลักษณะคล้ายกับแม่เหล็กเล็กๆ ซึ่งหมุนรอบแกนกลางของตัวเอง
- * ทำให้เกิดสมบัติแม่เหล็กเพราะประจุที่หมุนจะก่อให้เกิด สนามแม่เหล็ก ขึ้น
- * อิเล็กตรอนหมุนรอบตัวเองได้ 2 แบบ คือตามเข็มนาฬิกาและทวนเข็มนาฬิกา ซึ่งแทนด้วยเลขควอนตัมสปินที่มีค่าเป็น $+1/2$ และ $-1/2$ ตามทิศทางการหมุน

2020



ประจุที่หมุนรอบตัวให้สนามแม่เหล็กออกมา การเคลื่อนที่รูปแบบดังกล่าวทำให้อิเล็กตรอนประพฤติตัวคล้ายแท่งแม่เหล็ก

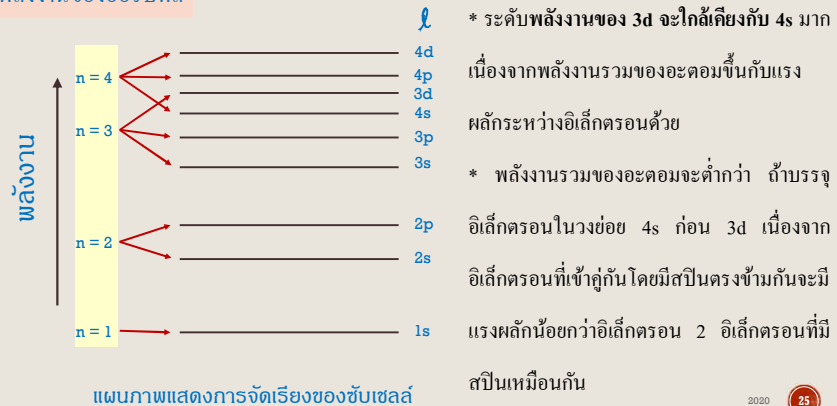


รูปแสดงการสปินหมุนตามเข็มนาฬิกาและทวนเข็มนาฬิกาของอิเล็กตรอน สนามแม่เหล็กจากการหมุนรอบตัวนี้คล้ายกับที่เกิดจากแท่งแม่เหล็ก

2020

24

พลังงานของออร์บิทัล



2020

25

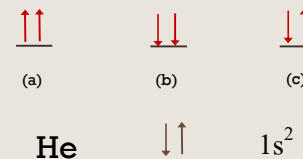
การบรรจุอิเล็กตรอนในออร์บิทัล

หลักการกีดกันของเพาลี

กรณีอะตอมที่มีอิเล็กตรอนมากกว่าหนึ่ง หลักนี้กล่าวว่า **ไม่มีอิเล็กตรอนคู่หนึ่งคู่ใดในอะตอมเดียวกันที่มีเลขควอนตัมทั้งสี่เหมือนกันหมด**

กล่าวคือหากอิเล็กตรอนคู่หนึ่งในออร์บิทัลมีค่า n, l และ m_l เท่ากันแล้ว ค่า m_s ต้องต่างกัน

เช่น He



2020

26

สมบัติไออะแมกเนติกและพาราแมกเนติก

สารพาราแมกเนติกคือ สารที่มีสปินเดี่ยวไม่เข้าคู่ และดึงดูดกับแม่เหล็ก

สารไดอะแมกเนติกคือ สารที่ไม่มีสปินเดี่ยวหรืออิเล็กตรอนจับคู่กันในทิศตรงข้ามกันและมีแรงผลักละเอียดกับแม่เหล็ก

เช่น Li ($z=3$)

Be ($z=4$)

2020

27

กฎของฮุนด์ (Hund's rule)

การจัดอิเล็กตรอนในชั้นย่อยที่เสถียรที่สุดคือ การบรรจุอิเล็กตรอนในออร์บิทัลที่มีระดับพลังงานเท่ากัน (degenerate) จะบรรจุให้มีจำนวนอิเล็กตรอนเดี่ยวมากที่สุดเท่าที่จะทำได้

เช่น $2p^4$

$3d^5$

$3d^8$

2020

28

หลักเอาฟบาว (Aufbau principle)

กล่าวว่า เมื่อโปรตอนถูกเติมไปยังนิวเคลียสครั้งแรกหนึ่งตัวเพื่อสร้างธาตุใหม่ อิเล็กตรอนจะถูกเติมไปยังอะตอมที่มีคอร์ดบิทัลเช่นกัน สรุปคือ **เป็นหลักการวางอิเล็กตรอนเพื่อสร้างอะตอม** โดยอาศัยหลักดังนี้

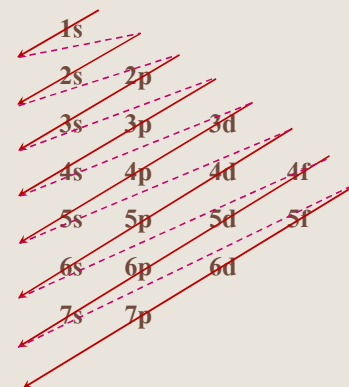
1. ใช้หลักของเพาลี ในการบรรจุอิเล็กตรอน คือ ในแต่ละออร์บิทัลจะบรรจุอิเล็กตรอนได้อย่างมากที่สุด 2 ตัว (มีสปินต่างกัน)  เรียกออิเล็กตรอนคู่ (paired electron)

ถ้ามีอิเล็กตรอนเพียงครึ่งหนึ่งนิยมเขียนเป็นสปินขึ้น (spin up) และเรียกว่าอิเล็กตรอนเดี่ยว (unpaired electron)

2. บรรจุอิเล็กตรอนในออร์บิทัลที่มีระดับพลังงานต่ำสุดที่ยังว่างก่อน (เรียงลำดับออร์บิทัลตามลูกศรในรูป) จนครบจำนวนอิเล็กตรอนทั้งหมดในอะตอมนั้น การจัดเรียงอิเล็กตรอนแบบนี้จะทำให้อะตอมมีสถานะเสถียรที่สุดเพราะพลังงานรวมทั้งหมดของอะตอมมีต่ำที่สุด

2020

29

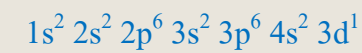


ตัวอย่าง

Al (z=13)



Sc (z=21)

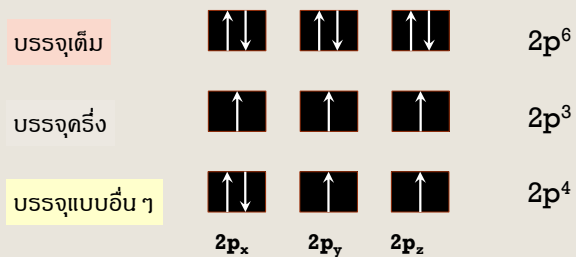


2020

30

3. ถ้ามีออร์บิทัลที่มีพลังงานมากกว่าหนึ่งขึ้นไป การบรรจุอิเล็กตรอนให้อาศัยกฎของฮุนด์

4. การบรรจุเต็มและบรรจุครึ่งจะมีเสถียรภาพมากกว่าแบบอื่น



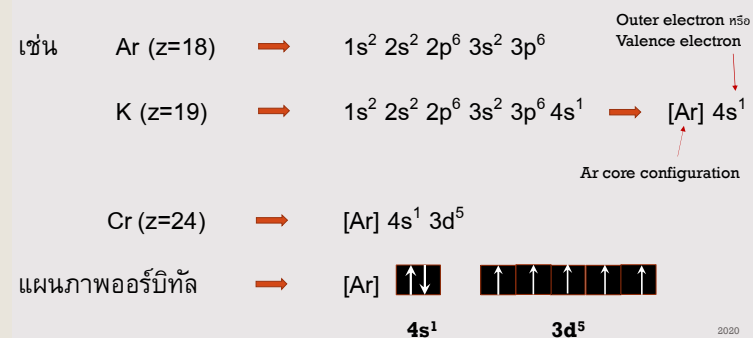
$2p^6$ เสถียรกว่า $2p^3$ แต่ $2p^3$ เสถียรกว่า $2p^4$

2020

31

การจัดอิเล็กตรอนในทุกธาตุยกเว้นไฮโดรเจนและฮีเลียมจะแสดงในรูปแบบ

แก๊สเฉื่อย (noble gas core)



2020

32

เคมีกับการใช้งาน: อะตอมและอิเล็กทรอนิกส์

γ (gamma-rays)

$${}_{27}^{59}\text{Co} + {}_0^1\text{n} \longrightarrow {}_{27}^{60}\text{Co} \longrightarrow {}_{28}^{60}\text{Ni} + {}_{-1}^0\text{e} + \gamma$$

${}^{60}\text{Co}$ ได้จากการใช้อุณหภูมิความร้อน (neutron) ยิงเข้า ไปยัง ${}^{59}\text{Co}$ ภายในถึงปฏิกิริยานิวเคลียร์ (nuclear reactor) เมื่อ ${}^{60}\text{Co}$ สลายตัวจะปล่อยรังสีแกมมาออกมาโดยมีพลังงาน 1.17 และ 1.33 เมกะอิเล็กตรอนโวลต์ (MeV) และเมื่อรังสีแกมมาผ่านแล้ว จะกลายเป็นธาตุนิเคิล (nickel) ซึ่งไม่เป็นสารกัมมันตรังสี

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

นอกจากการใช้อินอามารแล้ว การฉายรังสีแกมมายังใช้ในการเปลี่ยนสีอัญมณีได้ด้วยเช่น **Tourmaline** ในการแพทย์ใช้รังสีแกมมาทำลายเซลล์มะเร็ง



ทัวมาลีนฉายรังสีแกมมา

2020

34

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

$$2s+1L_J \text{ หรือ } 2s+1L$$

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

2020

35

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

orbital angular momentum

spin multiplicity $\rightarrow 2S+1$

$\swarrow \quad \searrow$

$L \quad J$

$\uparrow$

spin orbit coupling

$J = L+S, L+S-1, \dots, |L-S|$

$L = 0$ S term

$L = 1$ P term

$L = 2$ D term

$L = 3$ F term

$S = 0$ spin multiplicity = 1 (singlet) เช่น e^- เดี่ยวหนึ่งตัว $m_s = +1/2$ หรือ $m_s = -1/2$

$S = 1/2$ spin multiplicity = 2 (doublet) ดังนั้น $s = 1/2$ $S = 1/2$

เพราะฉะนั้น $2S+1 = 2$

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

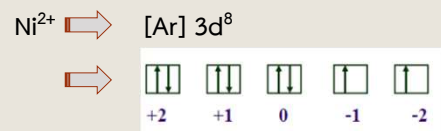
เป็นการคู่ควบที่ได้จากผลของสปินและออร์บิทัลรวมกันเรียกว่า การคู่ควบรัสเซลล์-ฮอนเดอร์ (Russell-Saunders) ปกติไม่ค่อยนิยมระบุค่า J ใน term symbol เว้นแต่จะตมอยู่ในสนามแม่เหล็ก

การทำ Ground term ที่มีระดับพลังงานต่ำสุด (อย่างรวดเร็ว)

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+}



M_S สูงสุด คือ +1 (ค่าที่เป็นไปได้ 1, 0, -1)

M_L สูงสุด คือ +3 (ค่าที่เป็นไปได้ 3, 2, ..., -3)



$$S = +1$$

$$L = +3$$

2020

37

$$L = +3 \quad \text{symbol คือ F}$$

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

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

เนื่องจาก Ni^{2+} มี e- เกินครึ่ง ดังนั้น J ค่าสูง จะมีระดับพลังงานต่ำ

เพราะฉะนั้น Ground state คือ 3F_4

ค่า J ที่น้อยที่สุด (minimum) จะเสถียรที่สุดในชั้นที่มี e- น้อยกว่าครึ่ง

ค่า J ที่มากที่สุด (maximum) จะเสถียรที่สุดในชั้นที่มี e- มากกว่าครึ่ง

2020

38