

# เคมีทั่วไป

รศ. อินทิรา หาญพงษ์พันธ์

## โครงสร้างโมเลกุล

เพื่อให้การเรียนการสอนวิชาเคมีให้มีคุณภาพและ  
เพิ่มพูนความรู้ให้มีการต่อเนื่องจากชั้นมัธยมศึกษาตอนปลายกับ  
มหาวิทยาลัย นิสิตควรจะเรียนเป็นขั้นเป็นตอน โดยใช้สมบัติ  
ของ Be, B และ C ในตารางธาตุเป็นหลักดังนี้

## 1. ความหมายของตัวเลขต่างๆของธาตุในตารางธาตุ ได้แก่

4	9.01218
2745	2
1560	Be
1.85	
1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup>	
Beryllium	

- สัญลักษณ์ Beryllium = Be - มวลอะตอม Be = 9.01
- เลขอะตอม Be = 4 - เลขออกซิเดชัน Be = +2
- Electron configuration Be = 1s<sup>2</sup> 2s<sup>2</sup>
- จุดเดือด = 2745 °C , จุดหลอมเหลว = 1560 °C
- ความหนาแน่น = 1.85 g/cm<sup>3</sup> ที่ 300 K
- โครงสร้างอะตอม = hexagonal

## 2. ค่าพลังงานไอออไนเซชัน (Ionization Energy ; IE)

ทำให้เราทราบการจัดเรียงอิเล็กตรอน ใช้ทฤษฎี Quantum มาอธิบาย electron configuration

ค่า IE (kJ/mol)	IE <sub>1</sub>	IE <sub>2</sub>	IE <sub>3</sub>	IE <sub>4</sub>
Be	900	1757	14,850	21,000

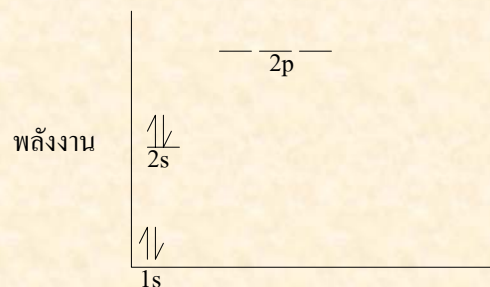
การเรียง e/n ของ Be = 2,2

### 3. Quantum number ทั้ง 4 ของ Be

n	l	m	s	จำนวนElectron
1	0 (s)	0	+1/2, -1/2	2
2	0 (s)	0	+1/2, -1/2	2

- Electron configuration ของ Be =  $1s^2 2s^2$

### 4. การบรรจุ Electron ของ ${}_4\text{Be}$ ในระดับพลังงาน (n) ใน ground state มีดังนี้



5. ใช้ Lewis dot structure ของ Be เพื่อนำไปอธิบายการเกิดสารประกอบระหว่าง Be กับธาตุอื่นๆดังนี้ • Be•

ใช้วิธีการเขียนโครงสร้างโมเลกุลของสารประกอบระหว่าง Be กับ H หรือ Cl คือ  $\text{BeH}_2$  หรือ  $\text{BeCl}_2$  ตามหลักของ Lewis ดังนี้

1. หา Valence electron รวมของ Be กับ H ได้  $= 2+2 = 4$
2. เขียนโครงสร้างของ Be กับ H , Be กับ Cl



หมายเหตุ เราต้องรู้ว่า Be เป็นอะตอมกลางเพราะใช้อิเล็กตรอนร่วมได้มากที่สุดคือ 2 •Be•

3. ลากเส้น 1 เส้นแทน  $2 e^-$  ระหว่าง Be กับ H ในข้อ 2 ได้ดังนี้



6. ใช้ทฤษฎี Valence Shell Electron-pair repulsion

(VSEPR) มาอธิบายโครงสร้างโมเลกุล

กำหนดให้ A = อะตอมกลาง

X = จำนวนพันธะของอะตอมกลาง

P = Electron คู่ว่าง

ตัวอย่าง Be มี Valence electron = 2 สร้างพันธะกับอะตอมอื่น

เช่น H หรือ Cl ได้เท่ากับ 2 ค่าของ X และ P เท่ากับเท่าใด

หมายเหตุ ในการสร้างพันธะจะต้องใช้ 1 อิเล็กตรอนของอะตอมกลางกับ 1 อิเล็กตรอนของตัวล้อมอะตอมกลาง

ตอบ  $X = 2$  (อะตอมกลางสร้างได้ 2 พันธะ)

$P = 0$

ตัวอย่าง ตาม VSEPR โครงสร้างของโมเลกุล  $\text{BeH}_2$  มีรูปร่างเป็นอย่างไร

ตอบ เพราะว่า - Be ไม่มีอิเล็กตรอนคู่ว่าง

- แรงผลักระหว่าง Be และ H หักล้างกันพอดี

จึงทำให้พันธะระหว่าง Be และ H ห่างกันมากที่สุด

โครงสร้างของ  $\text{BeH}_2$  คือ  $\text{H}-\text{Be}-\text{H}$  เรียกว่า linear มีมุม

ระหว่างพันธะที่อะตอมกลาง (Be) =  $180^\circ$

7. ใช้ Valence bond theory (VBT) อธิบายได้ดังนี้

1. บรรจุอิเล็กตรอนในระดับพลังงานตามหลัก

- Aufbau

- Pauli's Exclusion Principle

- Hund's rule

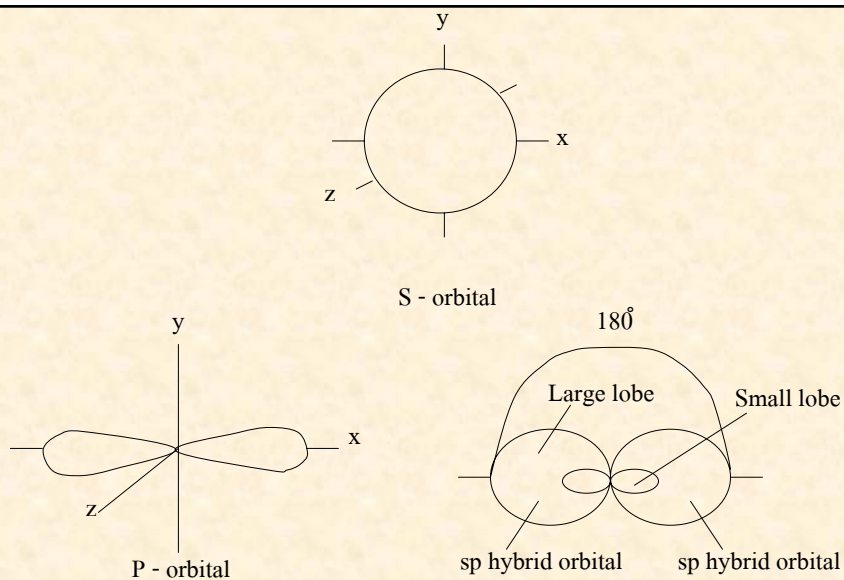
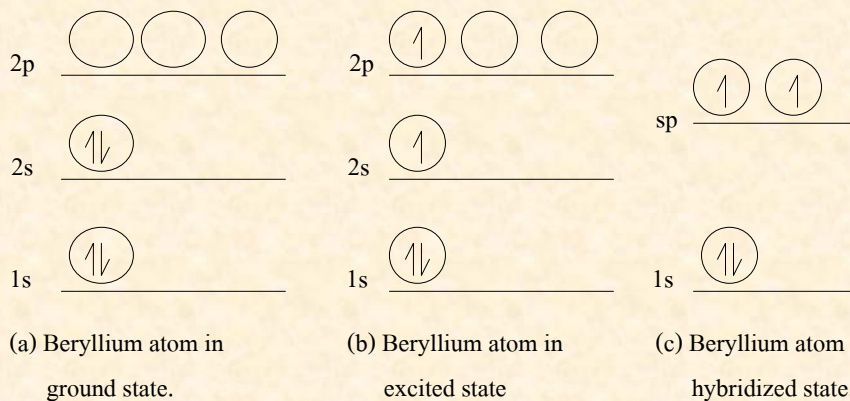
2. อิเล็กตรอนถูกกระตุ้นด้วยพลังงาน  $E=h\nu$  ไปอยู่ใน orbital ที่สูงขึ้น

3. ปรับระดับพลังงานของ orbital ที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่

4. เกิด Hybrid orbital ตามรูป

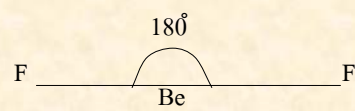
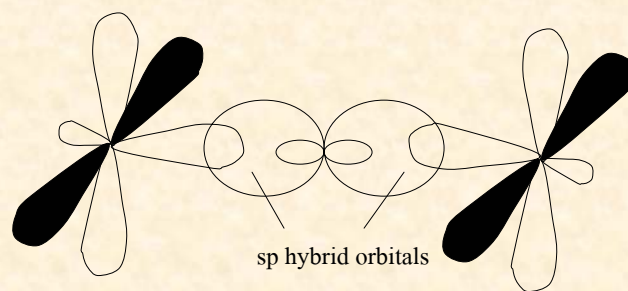
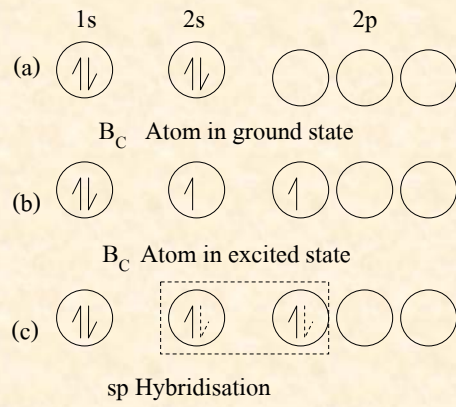
### Hybridisation in Beryllium

Be Beryllium (At. No. 4) :  $1s^2, 2s^2$

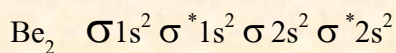
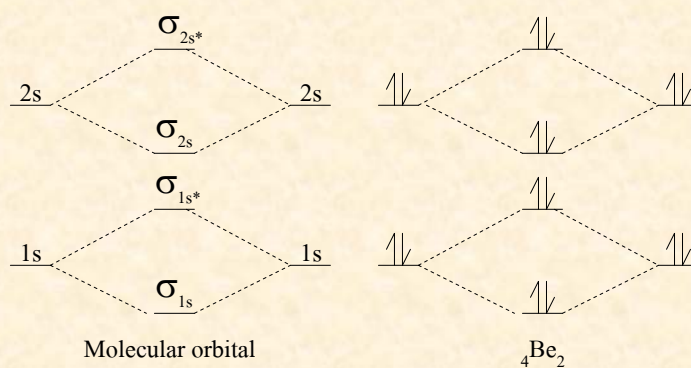


Formation of *sp* hybrid orbitals.

ตัวอย่างการเกิดสารประกอบ  $\text{BeF}_2$



8. ใช้ molecular orbital theory อธิบายการเกิด  $\text{Be}_2$  โดยใช้  
 อิเล็กตรอนรวมของ 2 Be atoms บรรจุใน molecular orbital มี  
 โครงสร้าง ดังนี้



$$\text{bond order} = (\text{bonding } e^- - \text{antibonding } e^-) / 2$$

$$= (4-4) / 2 = 0$$

ทำนองเดียวกัน  $\text{B}$  จะมีการสร้าง bond และมีสูตรโมเลกุล และ  
 โครงสร้างโมเลกุลอย่างไร มีดังนี้

1. ความหมายของตัวเลขต่างๆของ  $\text{B}$  ในตารางธาตุ

ชื่อ	สัญลักษณ์	มวลอะตอม	เลขอะตอม	B.P.	M.P.	Density
Boron	B	10.81	5	40.75° C	2300° C	2.34

โครงสร้างอะตอม = rhombohedral



2. ค่าพลังงานไอออไนเซชัน IE (kJ/mol)

5	10.81
4275	3
2300	
2.34	<b>B</b>
	$1s^2 2s^2 p$
	Boron

IE <sub>1</sub>	IE <sub>2</sub>	IE <sub>3</sub>	IE <sub>4</sub>	IE <sub>5</sub>
800	2,427	3,658	35,024	32,824

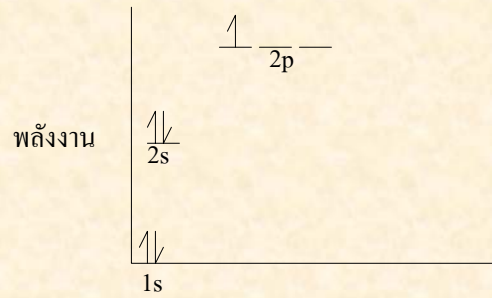
B มีการเรียง e<sup>-</sup> ใน “n” = 2, 3

3. Quantum number ทั้ง 4 ของ B

n	l	m	s	จำนวน e <sup>-</sup>
1	0 (s)	0	$\pm 1/2$	2
2	0 (s)	0	$\pm 1/2$	2
		1 (p)	-1	+1/2
		0	-	-
		+1	-	-

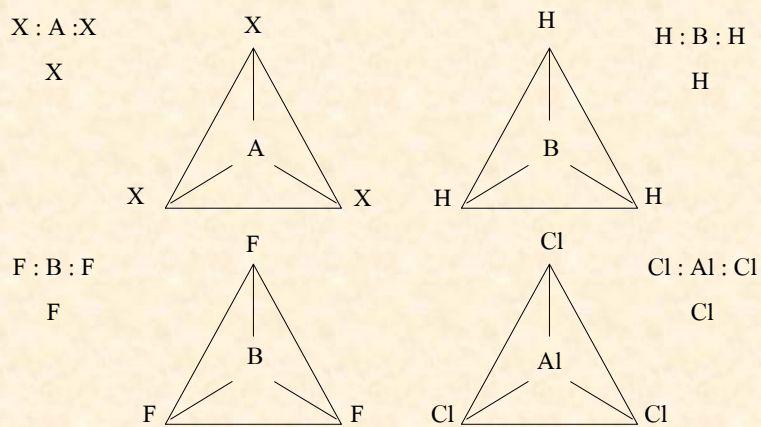
Electron configuration ของ  ${}_5B = 1s^2 2s^2 2p^1$

4. การบรรจุ election ของ  ${}_5\text{B}$  ในระดับพลังงาน (n) ใน ground state มีดังนี้

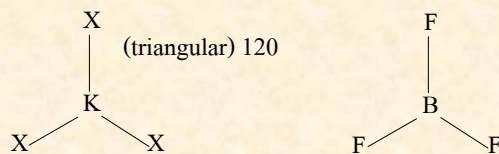


5. ใช้ Lewis dot structure ของ B เพื่ออธิบายการเกิดสารประกอบระหว่าง B กับธาตุอื่นๆ ดังนี้  $\cdot\overset{\cdot}{\text{B}}\cdot$

เขียนโครงสร้างโมเลกุลของสารประกอบระหว่าง B กับ H หรือ Cl คือ  $\text{BCl}_3$  หรือ B กับ F และ Al กับ Cl ตามหลัก Lewis ได้ดังนี้



6. ใช้ Valence Shell Electron pair repulsion theory (VSEPR)  
อธิบาย เช่น  $\text{BF}_3$  ดังตัวอย่าง

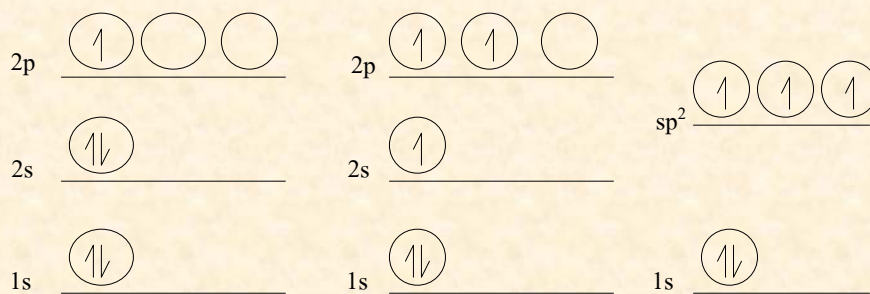


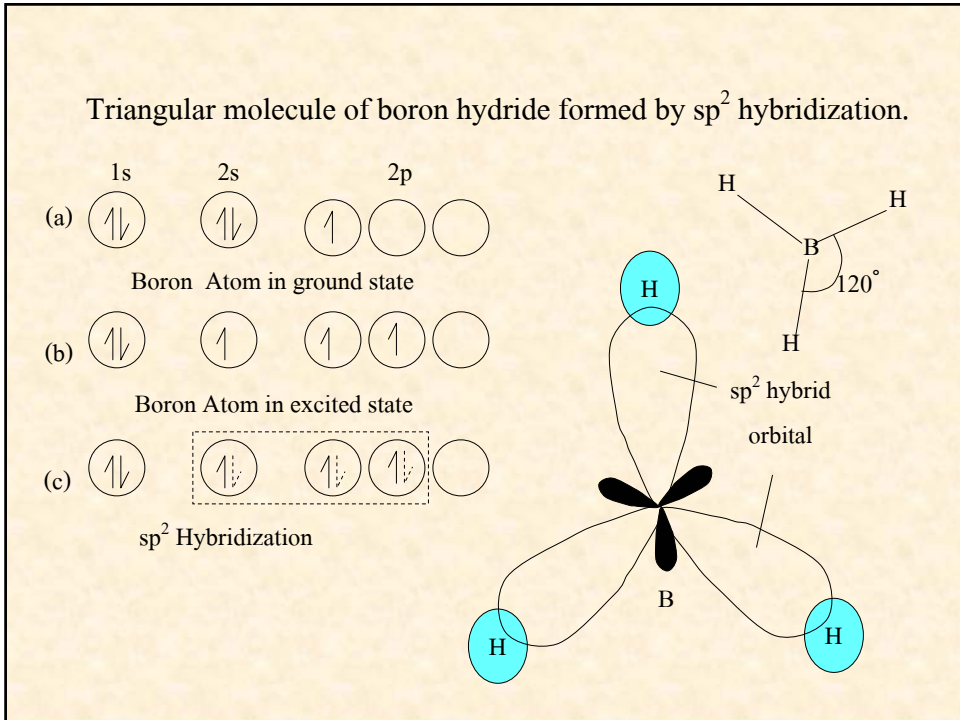
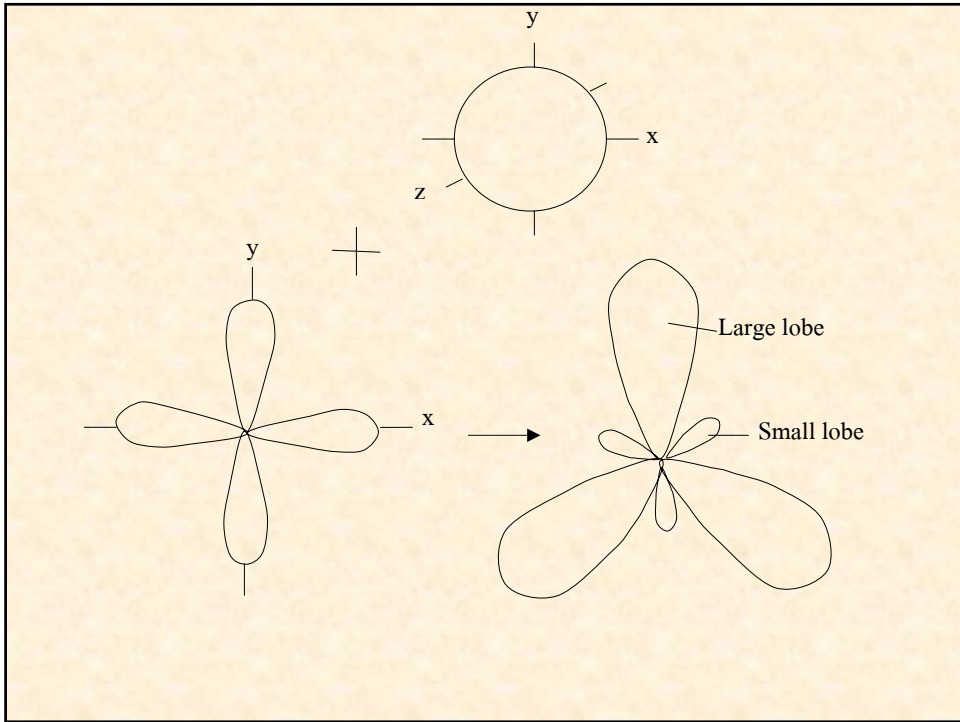
K = อะตอมกลาง

X = จำนวนพันธะของอะตอมที่ใช้  $e^-$  ร่วมกับอะตอมอื่น

7. ใช้ Valence bond theory อธิบายการเกิดสารประกอบ  $\text{BH}_3$ ,  $\text{BF}_3$   
และโครงสร้างอย่างไรได้ ดังนี้

### Hybridization in Boron.





### 1. ความหมายของตัวเลขต่างๆของธาตุ C ได้แก่

- สัญลักษณ์ Carbon = C
- มวลอะตอม C = 12.011
- เลขอะตอม C = 6
- เลขออกซิเดชัน = +4, -2
- Electron configuration =  $1s^2 2s^2 2p^2$
- จุดเดือด = 4,470° C จุดหลอมเหลว = 4,100° C
- ความหนาแน่น = 2.62 g/cm<sup>3</sup> ที่ 300 K
- โครงสร้างอะตอม = hexagonal structure

6	12.601
4470	± 4, 2
4100	
2.62	C
1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup>	
carbon	

### 2. ค่าพลังงานไอออไนเซชัน (Ionization Energy; IE) ทำให้เราทราบการจัดเรียงอิเล็กตรอน โดยใช้ทฤษฎี Quantum มาอธิบาย Electron configuration

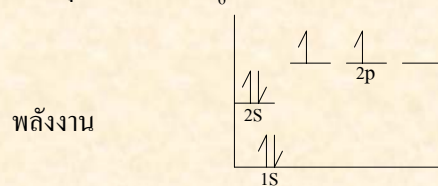
ค่า IE (kJ/mol)	IE1	IE2	IE3	IE4	IE5	IE5
C	1086	2352	4619	6220	37,820	47,280

การเรียง e/n ของ C = 2.4

8. Quantum number ทั้ง 6 ของ C

n	l	m	s	จำนวน e <sup>-</sup>
1	0 (s)	0	± 1/2	2
2	0 (s)	0	± 1/2	2
	1 (p)	- 1	+ 1/2	1
		0	+ 1/2	1
		+ 1	-	-

4. การบรรจุ Electron ของ  ${}_6\text{C}$  ในระดับพลังงาน (n) ใน ground state มีดังนี้

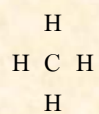


5. ใช้ Lewis dot structure ของ C เพื่อนำไปอธิบายการเกิดสารประกอบระหว่าง C กับธาตุอื่นได้ดังนี้  $\cdot\overset{\cdot}{\underset{\cdot}{\text{C}}}\cdot$

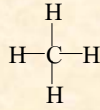
ใช้วิธีการเขียนโครงสร้างโมเลกุลของสารประกอบระหว่าง C กับ H ตามหลักของ Lewis ดังนี้

1. หา Valence electron รวมของ C กับ 4H ได้  $4+4=8$

2. เขียนโครงสร้างของ C กับ 4H



3. ลากเส้น 1 เส้น แทน  $2e^-$  ระหว่าง C กับ 4H ในข้อ 2 ได้ดังนี้



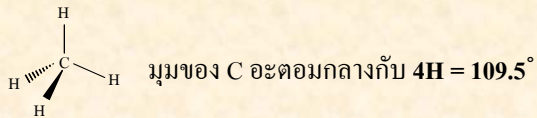
6. ใช้ทฤษฎี Valence Shell Electron-pair repulsion (VSEPR) มาอธิบายโครงสร้างโมเลกุล

C = เป็นอะตอมกลาง

x = จำนวนพันธะของอะตอมกลาง = 4

p = อิเล็กตรอนคู่ว่าง = 0

เพราะว่า C ไม่มีอิเล็กตรอนคู่ว่าง แรงผลักระหว่าง C กับ H ทั้ง 4 อะตอมหักล้างกันพอดี จึงทำให้โครงสร้างของ C กับ 4H เป็นสามมิติ เรียกว่า ทรงเหลี่ยมสี่หน้า tetrahedral ดังนี้



7. ใช้ Valence bond theory (VBT) อธิบายได้ดังนี้

1. บรรจุ Electron ในระดับพลังงานตามหลัก

- aufbau

- Pauli's Exclusive Principle

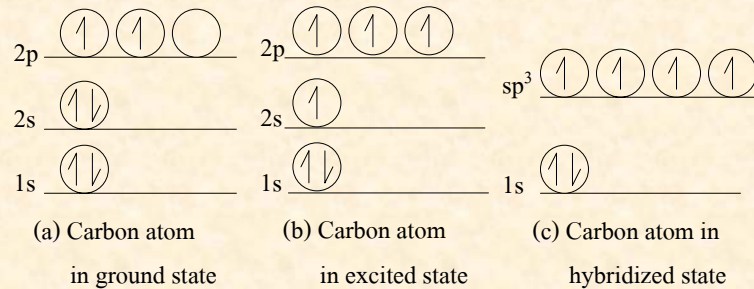
- Hund's rule

2. Electron ถูกกระตุ้นด้วยพลังงาน  $E = h\nu$  ไปอยู่ในระดับพลังงานที่สูงขึ้นไป

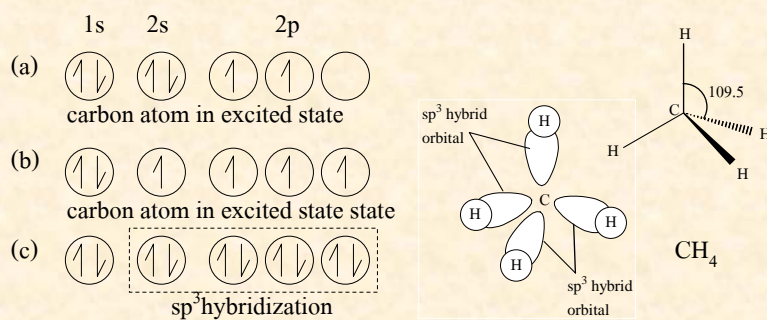
3. ปรับระดับพลังงานของ orbital ที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่

4. เกิด hybrid orbital ตามรูป

Hybridization in carbon atom

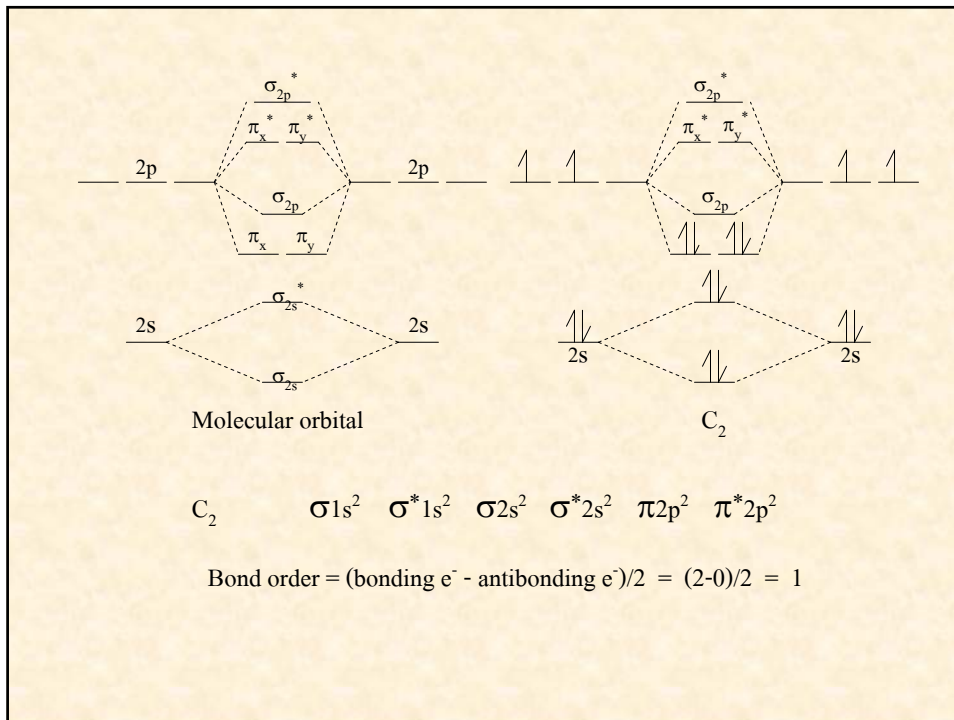


Tetrahedral molecule of methane formed by sp<sup>3</sup> hybridization



8. ใช้ molecular orbital theory อธิบายการเกิด C<sub>2</sub> โดยใช้ Electron รวมของ 2C atoms บรรจุใน orbital มีโครงสร้างดังนี้





สำหรับ  $_6C$  จะเกิด hybrid orbital ได้ 3 แบบ ทำให้ carbon เกิดสารประกอบระหว่าง C กับ C มีพันธะเคมีได้ 3 ชนิด คือ

1. single bond (C-C) มี hybrid orbital เป็น  $sp^3$
2. double bond (C=C) มี  $sp^2$  hybrid orbital และมี one pure p orbital (p)
3. Triple bond (C $\equiv$ C) มี sp hybrid orbital และมี two pure p orbital (p, p)

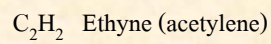
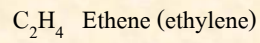
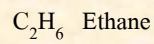
ดังรูป

$sp$  hybrid

$sp^2$  hybrid

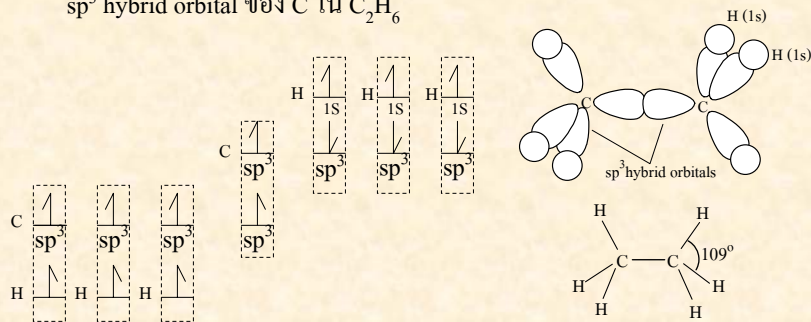
$sp^3$  hybrid

พิจารณาตัวอย่างการเกิดสารประกอบ C กับ H ที่มีพันธะเดี่ยว พันธะคู่ และ พันธะสาม คือ

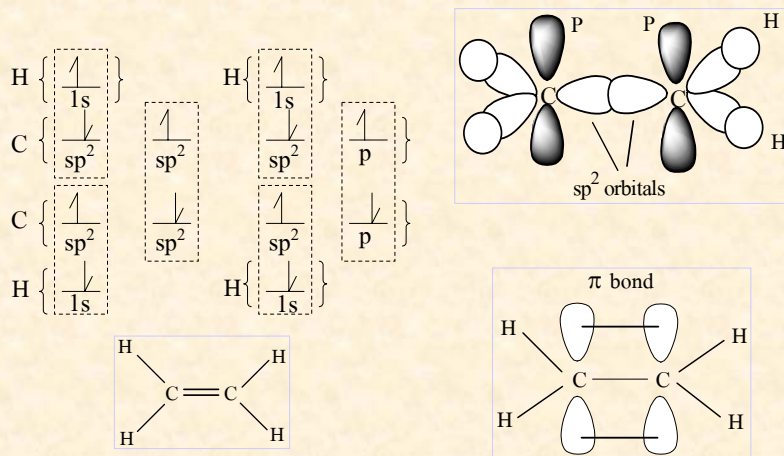


ดังรูป แสดง valence bond และ รูปโครงสร้าง ดังนี้

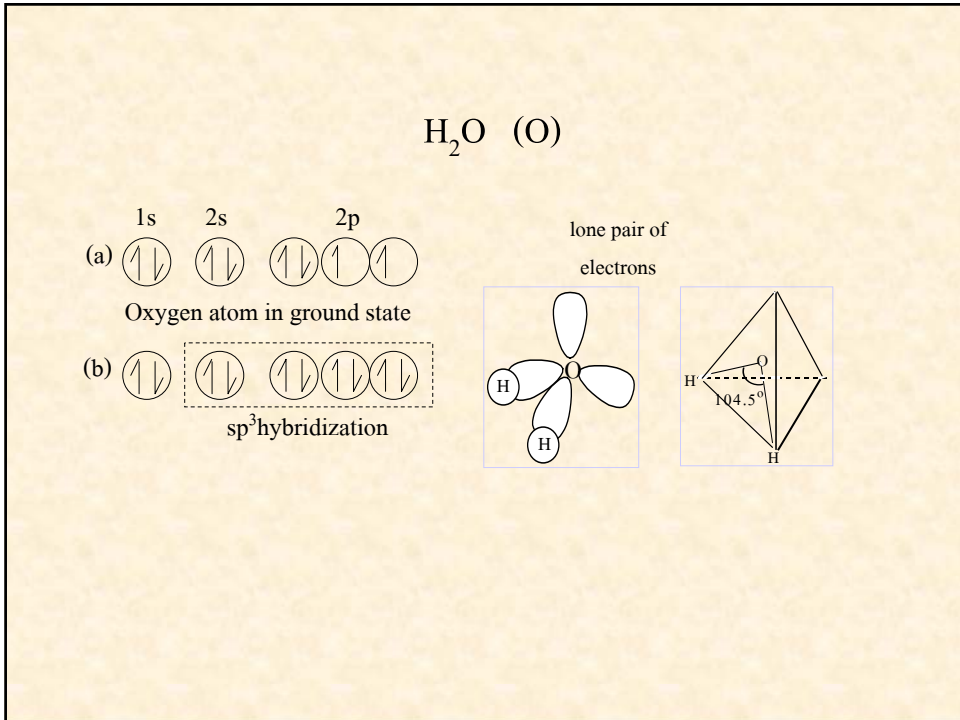
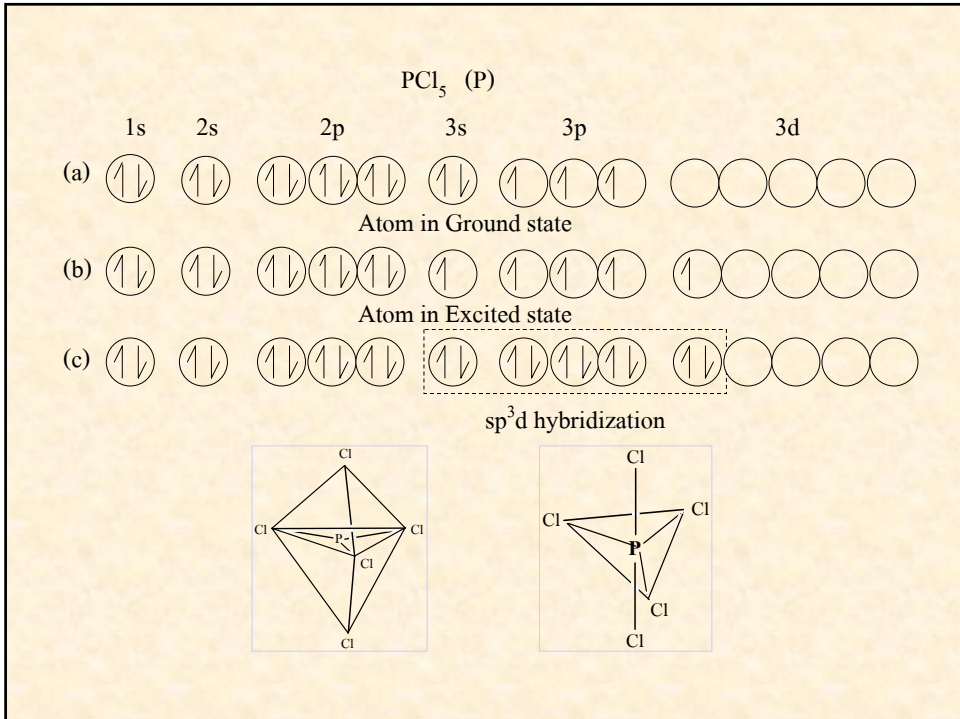
$sp^3$  hybrid orbital ของ C ใน  $C_2H_6$

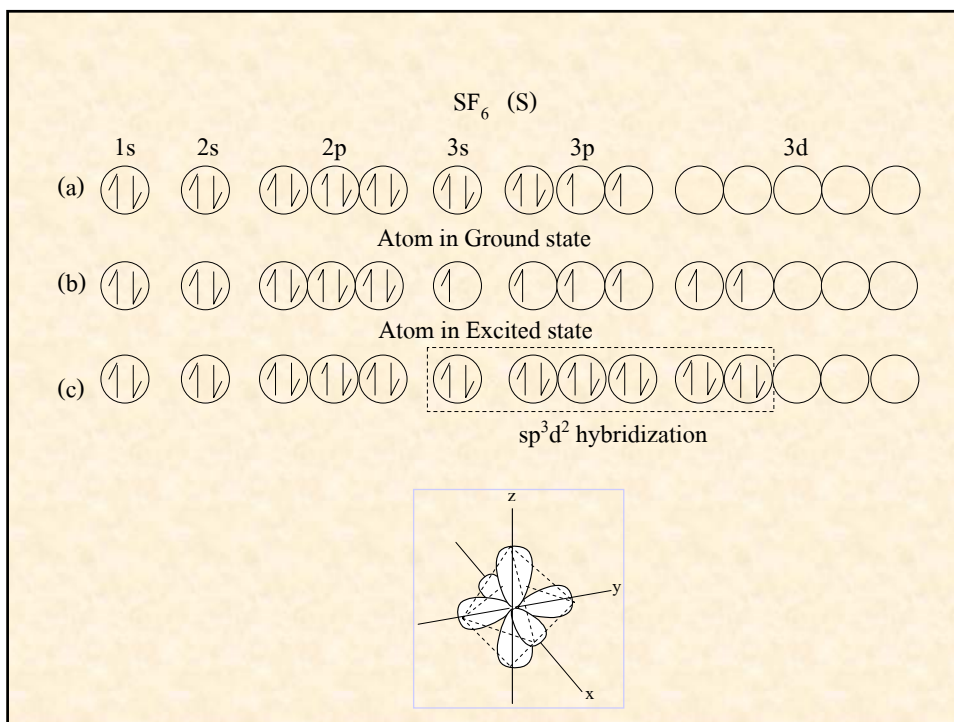


$sp^2$  hybrid orbital ของ C ใน  $C_2H_4$









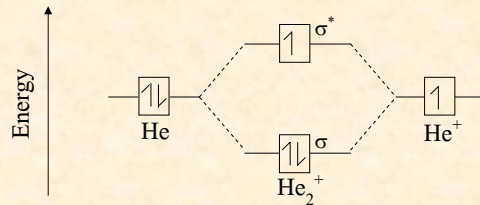
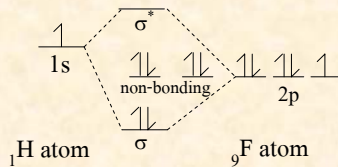
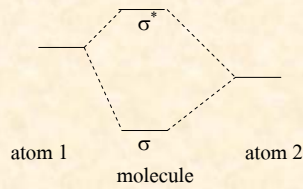
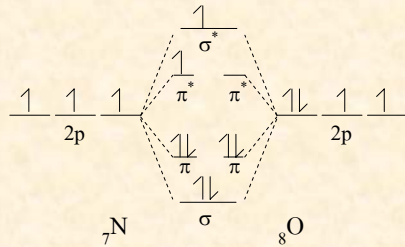
ใช้ molecular orbital theory (MOT) อธิบายการเกิดสารประกอบของธาตุชนิดเดียวกัน homonuclear diatomic molecule ของธาตุในคาบที่ 2 ได้แก่  $Be_2$ ,  $B_2$ ,  $C_2$ ,  $N_2$ ,  $O_2$ ,  $F_2$  และ  $Ne_2$  ดังนี้

	$Be_2$	$B_2$	$C_2$	$N_2$		$O_2$	$F_2$	$Ne_2$
$\sigma^* 2p_x$	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	$\sigma^* 2p_x$	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
$\pi^* 2p_x$ $\pi^* 2p_y$	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	$\pi^* 2p_x$ $\pi^* 2p_y$	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
$\sigma^* 2p_x$	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	$\pi 2p_x$ $\pi 2p_y$	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
$\pi 2p_x$ $\pi 2p_y$	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	$\sigma 2p_x$	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
$\sigma^* 2s$	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	$\sigma^* 2s$	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
$\sigma 2s$	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	$\sigma 2s$	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

สำหรับธาตุต่างชนิดกัน เช่น NO และ HF ซึ่งเป็นธาตุต่างชนิดกัน (heteronuclear diatomic molecules) พลังงานของออร์บิทัลใกล้เคียงกัน

ตัวอย่าง NO มี bond order =  $2 \frac{1}{2}$

ตัวอย่าง HF ที่มี MO Energy Level ที่เกิดจาก AO Energy Level ระดับต่างกันมาก



Relationships Among Types of Hybrid Orbitals, Features of Central Atom and Characteristics of Resulting Molecule

No. of bonds	No of unused e <sup>-</sup> pairs	Type of hybrid orbital	Angle between atoms bonded to the central atom	Geometry of molecule or ion formed	Example
2	0	sp	180°	linear	BeF <sub>2</sub>
3	0	sp <sup>2</sup>	120°	trigonal planar	BF <sub>3</sub>
4	0	sp <sup>3</sup>	109.5°	tetrahedral	CH <sub>4</sub>
3	1	sp <sup>3</sup>	90° to 109.5°	pyramidal	NH <sub>3</sub>
2	2	sp <sup>3</sup>	90° to 109.5°	angular	H <sub>2</sub> O
5	0	dsp <sup>3</sup>	90°, 120°	bipyramidal	PCl <sub>5</sub>
6	0	d <sup>2</sup> sp <sup>3</sup> or sp <sup>3</sup> d	90°	octahedral	SF <sub>6</sub>