โครงการ

การเรียนการสอนเพื่อเสริมประสบการณ์

ชื่อโครงการ การประยุกต์ใช้กราฟอัลกอริทึมสำหรับกราฟทางเคมี
Applications of graph algorithms for chemical graph

ชื่อนิสิต นางสาวพิมลนาฏ สุนเทียน 583 35367 23

ภาควิชา คณิตศาสตร์และวิทยาการคอมพิวเตอร์
สาขาวิชา คณิตศาสตร์

ปีการศึกษา 2561

คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

บทคัดย่อและฉบับเต็มของวิทยานิพนธ์นี้เป็นแฟ้มข้อมูลของนิสิตเจ้าของโครงงานทางวิชาการที่ส่งผ่านทางคณะที่สังกัด (CUIR)
เป็นแฟ้มข้อมูลของนิสิตเจ้าของโครงงานทางวิชาการที่ส่งผ่านทางคณะที่สังกัด
The abstract and full text of senior projects in Chulalongkorn University Intellectual Repository(CUIR)
are the senior project authors' files submitted through the faculty.

การประยุกต์ใช้กราฟอัลกอริทึมสำหรับกราฟทางเคมี

นางสาวพิมลนาฏ สุนเทียน

โครงงานนี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรวิทยาศาสตรบัณฑิต
สาขาวิชาคณิตศาสตร์ ภาควิชาคณิตศาสตร์และวิทยาการคอมพิวเตอร์
คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
ปีการศึกษา 2561
ลิขสิทธิ์ของจุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

Applications of graph algorithms for chemical graph

Pimolnat Suntian

A Project Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements

for the Degree of Bachelor of Science Program in Mathematics

Department of Mathematics and Computer Science

Faculty of Science

Chulalongkorn University

Academic Year 2018

Copyright of Chulalongkorn University

หัวข้อโครงงาน	การประยุกต์ใช้กราฟอัลกอริทึมสำหรับกราฟทางเคมี
โดย	นางสาวพิมลนาฏ สุนเทียน
สาขาวิชา	คณิตศาสตร์
อาจารย์ที่ปรึกษาโครงงานหลัก	อาจารย์ ดร.ทรรปณ์ ปณิธานะรักษ์

ภาควิชาคณิตศาสตร์และวิทยาการคอมพิวเตอร์ คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย อนุมัติให้นับโครงงานฉบับนี้เป็นส่วนหนึ่ง ของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาบัณฑิต ในรายวิชา 2301499 โครงงานวิทยาศาสตร์ (Senior Project)

.....

(ศาสตราจารย์ ดร.กฤษณะ เนียมมณี) หัวหน้าภาควิชาคณิตศาสตร์ และวิทยาการคอมพิวเตอร์

คณะกรรมการสอบโครงงาน

.....

(อาจารย์ ดร.ทรรปณ์ ปณิธานะรักษ์) อาจารย์ที่ปรึกษาโครงงานหลัก

.....

(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.บุญฤทธิ์ อินทิยศ) กรรมการ

.....

(รองศาสตราจารย์ ณัฏฐนาถ ไตรภพ) กรรมการ

นางสาวพิมลนาฏ สุนเทียน: การประยุกต์ใช้กราฟอัลกอริทึมสำหรับกราฟทางเคมี. (Applications of graph algorithms for chemical graph) อ.ที่ปรึกษาโครงงาน: อ.ดร.ทรรปณ์ ปณิธานะรักษ์, 62 หน้า.

โครงงาน เรื่อง การประยุกต์ใช้กราฟอัลกอริทึมสำหรับกราฟทางเคมี มีวัตถุประสงค์เพื่อหาโครงสร้างทางเคมีของสูตรเคมี หาสูตรเคมีของโครงสร้างทางเคมี ตรวจสอบไอโซเมอร์ริซึมของโครงสร้างทางเคมี 2 โครงสร้าง หาสับกราฟที่ใหญ่ที่สุดของโครงสร้างทางเคมี 2 โครงสร้าง และหามอนอเมอร์ของโครงสร้างทางเคมีของพอลิเมอร์ โดยการจัดทำโปรแกรมที่นำความรู้ทางเคมี กราฟทางคณิตศาสตร์ และกราฟอัลกอริทึม มาประยุกต์ใช้ ผลการดำเนินงานที่ได้ แสดงให้เห็นว่าโปรแกรมที่จัดทำขึ้นสามารถหาโครงสร้างทางเคมีจากการรับค่าสูตรเคมีได้ สามารถหาสูตรเคมีจากการอ่านไฟล์โครงสร้างทางเคมี สามารถตรวจสอบโครงสร้างทางเคมี 2 โครงสร้างว่าเป็นไอโซเมอร์ริซึมกันหรือไม่ สามารถหาสับกราฟที่ใหญ่ที่สุดจากการอ่านไฟล์โครงสร้างทางเคมี 2 โครงสร้าง และสามารถหามอนอเมอร์จากโครงสร้างทางเคมีของพอลิเมอร์

ภาควิชา คณิตศาสตร์และวิทยาการคอมพิวเตอร์ ลายมือชื่อนิสิต พิมลนาฏ สุนเทียน

สาขาวิชา คณิตศาสตร์ ลายมือชื่อ อ.ที่ปรึกษาโครงงานหลัก ทรรปณ์ ปณิธานะรักษ์

ปีการศึกษา 2561

5833536723: MAJOR MATHEMATICS

KEYWORDS: GRAPH ALGORITHM / CHEMICAL GRAPH / PYTHON

PIMOLNAT SUNTIAN: APPLICATION OF GRAPH ALGORITHM FOR CHEMICAL GRAPH. ADVISOR: THAP PANITANARAK, Ph. D 62 pp.

The topic of research is "Application of graph algorithm for chemical graph". The objectives of this research are to find chemical graph from chemical formula, find chemical formula from chemical graph, check isomerism of 2 chemical graph, find maximum sub graph of 2 chemical graph and find monomer from polymer by creating program which use knowledge about Chemistry Mathematics and Graph Algorithm. The testing result of the program show the program can be used efficiently.

Department: Mathematics and Computer Science Student's Signature พิมลนาฏ สันเทียน

Field of Study: Mathematics Advisor's Signature ธรรปพร ปณิธานะรักษ์

Academic Year: 2018

กิตติกรรมประกาศ

โครงงาน เรื่อง การประยุกต์ใช้กราฟอัลกอริทึมสำหรับกราฟทางเคมี ได้รับการสนับสนุนอย่างเต็มที่จากอาจารย์ ดร.ทรรปณ์ ปณิธานะรักษ์ อาจารย์ที่ปรึกษาโครงงาน ตั้งแต่การเลือกหัวข้อโครงงาน การศึกษาค้นคว้าหาข้อมูลงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง และการดำเนินงานจัดทำโครงงาน นอกจากนี้ยังได้รับการสนับสนุนจากภาควิชาคณิตศาสตร์และวิทยาการคอมพิวเตอร์ คณะวิทยาสาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย ทั้งในด้านองค์ความรู้เกี่ยวกับการจัดทำโครงงาน และให้งบประมาณในการจัดทำโครงงาน ซึ่งทำให้โครงงานนี้สามารถสำเร็จลุล่วงไปได้ด้วยดี ข้าพเจ้าจึงใคร่ขอขอบพระคุณเป็นอย่างยิ่งสำหรับความช่วยเหลือในทุกๆ ด้าน ที่ได้รับจากอาจารย์ ดร.ทรรปณ์ ปณิธานะรักษ์ และภาควิชาคณิตศาสตร์และวิทยาการคอมพิวเตอร์ คณะวิทยาสาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย และหวังว่าโครงงานนี้จะเป็นประโยชน์ในการศึกษาพัฒนาเกี่ยวกับกราฟทางเคมีต่อไป

สารบัญ

หน้า

บทคัดย่อภาษาไทย ..... ง

บทคัดย่อภาษาอังกฤษ ..... จ

กิตติกรรมประกาศ ..... ฉ

สารบัญ ..... ช

สารบัญตาราง ..... ฌ

สารบัญภาพ ..... ญ

บทที่ 1 บทนำ 1

1.1 ความเป็นมาและเหตุผลของโครงงาน 1

1.2 วัตถุประสงค์ของโครงงาน 1

1.3 ขอบเขตของโครงงาน 2

1.4 ขั้นตอนการดำเนินงาน 2

1.5 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ 2

1.6 โครงสร้างของรายงาน 3

บทที่ 2 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง 4

2.1 ธาตุและสารประกอบ 4

2.2 ตารางธาตุ 8

2.3 พันธะเคมี 12

2.4 ไอโซเมอร์ 16

2.5 พอลิเมอร์ 20

2.6 กราฟ 27

บทที่ 3 วิธีการดำเนินงาน 34

3.1 บทนำ 34

3.2 แผนการดำเนินงาน 34
3.3 แผนงานของโปรแกรม 35
บทที่ 4 ผลการดำเนินงาน 36
4.1 ลักษณะไฟล์ที่ใช้ได้ 36
4.2 การหาโครงสร้างทางเคมีจากสูตรเคมี 38
4.3 การหาสูตรเคมีจากโครงสร้างทางเคมี 39
4.4 การตรวจสอบไอโซเมอร์ริซึมของโครงสร้างทางเคมี 2 โครงสร้าง 40
4.5 หาสับกราฟที่ใหญ่ที่สุดของโครงสร้างทางเคมี 2 โครงสร้าง 41
4.6 การหามอนอเมอร์ของโครงสร้างทางเคมีของพอลิเมอร์ 42
บทที่ 5 ข้อสรุปและข้อเสนอแนะ 43
5.1 ข้อสรุป 43
5.2 ข้อเสนอแนะ 43
รายการอ้างอิง 44
ภาคผนวก ก แบบเสนอหัวข้อโครงงาน รายวิชา 2301399 Project Proposal ปีการศึกษา 2561 . 47
ประวัติผู้เขียน 51

สารบัญตาราง

หน้า

ตารางที่ 2.3.1 ตัวอย่างจำนวนอิเล็กตรอนในการเกิดพันธะโคเวเลนต์.....14
ตารางที่ 2.5.1 แสดงสมบัติบางประการของพลาสติกบาง.....24
ตารางที่ 2.5.2 แสดงสัญลักษณ์เพื่อบ่งชี้ประเภทของพลาสติกรีไซเคิล.....26
ตารางที่ 3.2.1 แสดงระยะเวลาในการดำเนินงาน.....34

สารบัญภาพ

หน้า

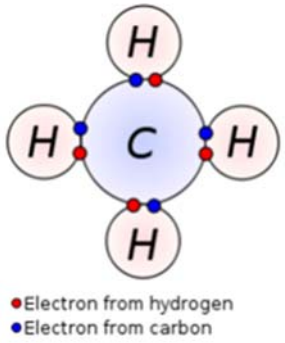
ภาพที่ 2.2.1 ตารางธาตุที่ใช้ในปัจจุบัน....8
ภาพที่ 2.2.2 การวัดขนาดอะตอม....9
ภาพที่ 2.3.1 แสดงการเกิดพันธะโคเวเลนต์....12
ภาพที่ 2.3.2 แสดงการเกิดพันธะโคเวเลนต์ โดย Lewis....13
ภาพที่ 2.3.3 แสดงพันธะคู่....14
ภาพที่ 2.3.4 แสดงพันธะสาม....14
ภาพที่ 2.4.1 แสดงการจำแนกชนิดของไอโซเมอร์....17
ภาพที่ 2.4.2 แสดงโมเลกุลที่สูตรโครงสร้างเหมือนกันที่ไม่เป็นไอโซเมอร์กัน....18
ภาพที่ 2.4.3 แสดงโมเลกุลที่เป็นไอโซเมอร์ของ C_5H_{12}....19
ภาพที่ 2.4.4 แสดงโมเลกุลที่เป็นไอโซเมอร์ของ C_5H_{10}....19
ภาพที่ 2.5.1 แสดงตัวอย่างมอนอเมอร์....20
ภาพที่ 2.5.2 โฮโมพอลิเมอร์....21
ภาพที่ 2.5.3 เฮเทอโรพอลิเมอร์....21
ภาพที่ 2.5.4 พอลิเมอร์แบบเส้น....22
ภาพที่ 2.5.5 พอลิเมอร์แบบกิ่ง....22
ภาพที่ 2.5.6 พอลิเมอร์แบบร่างแห....22
ภาพที่ 2.5.7 เทอร์มอพลาสติก....23
ภาพที่ 2.5.8 พลาสติกเทอร์มอเซต....24
ภาพที่ 2.6.1 องค์ประกอบโครงสร้างข้อมูลแบบกราฟ....27
ภาพที่ 2.6.2 แสดงตัวอย่างการหาอินดีกรีและเอาท์ดีกรีของกราฟทั้ง 2 ชนิด....28
ภาพที่ 2.6.3 แสดงตัวอย่างแอดจาเซนท์โหนด....29
ภาพที่ 2.6.4 แสดงตัวอย่างเส้นทาง....29
ภาพที่ 2.6.5 แสดงตัวอย่างไซเคิล....30
ภาพที่ 2.6.6 แสดงตัวอย่างลูป....30
ภาพที่ 2.6.7 แสดงตัวอย่างการท่องแบบลึก....31
ภาพที่ 2.6.8 แสดงตัวอย่างการท่องแบบกว้าง....32
ภาพที่ 2.6.9 แสดงตัวอย่างกราฟที่จะนำไปหาเส้นทางที่สั้นที่สุด....32

ภาพที่ 2.6.10 แสดงตัวอย่างการหาเส้นทางที่สั้นที่สุด.....33
ภาพที่ 3.3.1 แสดงแผนงานของโปรแกรม.....35
ภาพที่ 4.1.1 แสดงตัวอย่างไฟล์ *.txt ของ CH_4 36
ภาพที่ 4.1.2 แสดงตัวอย่างไฟล์ *.mol ของ CH_4.....37
ภาพที่ 4.2.1 แสดงหน้าต่างและส่วนประกอบของโปรแกรมการหาโครงสร้างทางเคมี.....38
ภาพที่ 4.3.1 แสดงหน้าต่างและส่วนประกอบของโปรแกรมการหาสูตรเคมี.....39
ภาพที่ 4.4.1 แสดงหน้าต่างและส่วนประกอบของโปรแกรมการตรวจสอบไอโซเมอร์ริซึม.....40
ภาพที่ 4.5.1 แสดงหน้าต่างและส่วนประกอบของโปรแกรมการหาสับกราฟที่ใหญ่ที่สุด.....41
ภาพที่ 4.6.1 แสดงหน้าต่างและส่วนประกอบของโปรแกรมการหามอนอเมอร์.....42

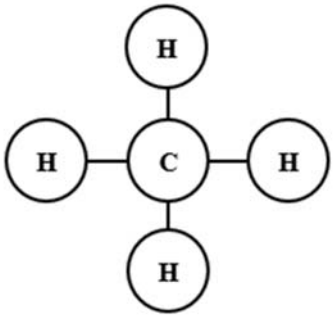
บทที่ 1
บทนำ

1.1 ความเป็นมาและเหตุผลของโครงงาน

ในการวิเคราะห์สารเคมี มักจะนำโครงสร้างโมเลกุลมาใช้ในการวิเคราะห์คุณสมบัติต่าง ๆ ของสารเคมี [9] แต่ถ้าสารเคมีมีโครงสร้างโมเลกุลขนาดใหญ่ เช่น พอลิเมอร์ที่เป็นสารประกอบที่มีโมเลกุลขนาดใหญ่ และมีมวลโมเลกุลมากประกอบด้วยหน่วยเล็ก ๆ ของสารที่อาจจะเหมือนกันหรือต่างกันมาเชื่อมต่อกันด้วยพันธะโคเวเลนต์ [3] และอัลลอยที่เป็นสารที่มีโมเลกุลขนาดใหญ่ที่เกิดจากการรวมตัวกันของสารประเภทโลหะตั้งแต่ 2 ชนิดขึ้นไป [7] จึงทำให้การวิเคราะห์สารเคมีมีความยุ่งยากและซับซ้อน



โครงสร้างโมเลกุล



กราฟแทนโครงสร้างโมเลกุล

จากภาพด้านบนจะเห็นว่าโครงสร้างโมเลกุลสามารถเขียนแทนได้ด้วยกราฟทางคณิตศาสตร์ [12] ดังนั้นเราจึงสามารถหาความสัมพันธ์ระหว่างคุณสมบัติของสารเคมีกับคุณสมบัติของกราฟที่เกิดจากการวิเคราะห์โดยการใช้กราฟอัลกอริทึม [13]

1.2 วัตถุประสงค์ของโครงงาน

1. เพื่อหาโครงสร้างทางเคมีของสูตรเคมี
2. เพื่อหาสูตรเคมีของโครงสร้างทางเคมี
3. เพื่อตรวจสอบไอโซเมอร์ริซึมของโครงสร้างทางเคมี 2 โครงสร้าง
4. เพื่อหาสับกราฟที่ใหญ่ที่สุดของโครงสร้างทางเคมี 2 โครงสร้าง
5. เพื่อหามอนอเมอร์ของโครงสร้างทางเคมีของพอลิเมอร์

1.3 ขอบเขตของโครงงาน

1. โปรแกรมที่จัดทำขึ้นนี้ จะรองรับธาตุในหมู่ IA-VIIIA เท่านั้น
2. ไฟล์ของโครงสร้างเคมีที่นำมาวิเคราะห์ จะใช้ไฟล์ .txt หรือ .mol เท่านั้น

1.4 ขั้นตอนการดำเนินงาน

โครงงาน เรื่อง การประยุกต์ใช้กราฟอัลกอริทึมสำหรับกราฟทางเคมี มีขั้นตอนการดำเนินงานดังต่อไปนี้

1. ศึกษางานวิจัยที่เกี่ยวข้อง
    1) ศึกษางานวิจัย เรื่อง Comparison and Enumeration of Chemical Graphs
    2) ศึกษาหาข้อมูลเกี่ยวกับโครงสร้างทางเคมีและคุณสมบัติต่างๆของสารเคมี
    3) ศึกษาหาข้อมูลเกี่ยวกับพอลิเมอร์ และอัลลอย
    4) ศึกษาหาข้อมูลเรื่องกราฟทางคณิตศาสตร์
    5) ศึกษาหาข้อมูลเกี่ยวกับกราฟอัลกอริทึม
2. กำหนดหัวข้อและจำกัดขอบเขตของโครงงาน
3. วางแผนการดำเนินงาน
    1) ระบุส่วนประกอบของโปรแกรม
    2) วางแผนการจัดทำโปรแกรม
    3) วางแผนระยะเวลาในการดำเนินงานในขั้นตอนต่างๆ
4. จัดทำโปรแกรม
5. สรุปผลการดำเนินงาน
    1) สรุปการใช้งานโปรแกรมที่จัดทำ
    2) สรุปความสามารถของโปรแกรมที่จัดทำ
6. จัดทำรูปเล่มโครงงาน
7. นำเสนอโครงงาน

1.5 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

ประโยชน์ที่ได้รับจากการวิจัยในครั้งนี้มีดังนี้

ก. ในด้านความรู้และประสบการณ์ต่อตัวนิสิตเอง

1. มีความรู้เกี่ยวกับโครงสร้างทางเคมี
2. มีความรู้เกี่ยวกับคุณสมบัติของสารเคมี
3. มีความรู้เกี่ยวกับการเขียนโปรแกรมภาษา python
4. มีความรู้ในการใช้โปรแกรม PyCharm

ข. ความรู้ ความเข้าใจที่นำไปสู่การแก้ไขปัญหาของสังคมหรือสภาพแวดล้อม

1. เพื่อใช้เป็นความรู้ต่อยอดงานวิจัย
2. สามารถแก้ปัญหาที่เกี่ยวข้องกับโครงสร้างทางเคมีได้
3. เป็นเครื่องมือช่วยสำหรับงานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับโครงสร้างทางเคมี

1.6 โครงสร้างของรายงาน

บทที่ 2 จะกล่าวถึงงานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับการประยุกต์ใช้กราฟอัลกอริทึมสำหรับกราฟทางเคมี ซึ่งจะประกอบไปด้วย ธาตุและสารประกอบ ตารางธาตุ สารและสมบัติของสาร พันธะเคมี ไอโซเมอร์ พอลิเมอร์ และกราฟ

บทที่ 3 จะกล่าวถึงวิธีการดำเนินงาน

บทที่ 4 จะกล่าวถึงผลการดำเนินงาน

บทที่ 5 จะกล่าวถึงข้อสรุป และข้อเสนอแนะ

บทที่ 2
งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

ในบทนี้จะกล่าวถึงงานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับโครงงาน เรื่อง การประยุกต์ใช้กราฟอัลกอริทึมสำหรับกราฟทางเคมี ซึ่งประกอบไปด้วย ธาตุและสารประกอบ ตารางธาตุ สารและสมบัติของสาร พันธะเคมี ไอโซเมอร์ พอลิเมอร์ และกราฟ

2.1 ธาตุและสารประกอบ

ธาตุ (Element) คือ สารบริสุทธิ์ที่ประกอบด้วยธาตุหรือสารชนิดเดียว ไม่สามารถแยกหรือสลายออกเป็นสารอื่นได้ อนุภาคที่เล็กที่สุดของธาตุเรียกว่า อะตอม ซึ่งประกอบด้วยอิเล็กตรอนวิ่งวนรอบนิวเคลียสที่ประกอบด้วยโปรตอน และ นิวตรอน

สารประกอบ (Compound) เป็นสารบริสุทธิ์ที่ประกอบด้วยอะตอมของธาตุตั้งแต่ 2 ชนิดขึ้นไปมารวมกัน ด้วยแรงยึดเหนี่ยวทางเคมี เกิดเป็นสารชนิดใหม่ เรียกว่าสารประกอบ ดังนั้นหน่วยย่อยของสารประกอบคือ โมเลกุล ซึ่งอาจแยกสลายได้เมื่อได้รับความร้อนหรือพลังงานไฟฟ้า สารประกอบที่พบในชีวิตประจำวัน เช่น น้ำ (H_2O) เกลือแกง ($NaCl$) น้ำตาลทราย ($C_{12}H_{22}O_{11}$) น้ำตาลกลูโคส ($C_6H_{12}O_6$) เอทานอล (C_2H_5OH) คาร์บอนไดออกไซด์ (CO_2) หินปูน ($CaCO_3$) ด่างทับทิม ($KMnO_4$) เป็นต้น

ประเภทและสมบัติของธาตุ

ธาตุและสารประกอบจัดเป็นสารเนื้อเดียว ซึ่งหมายถึงสารที่ประกอบด้วยธาตุเพียงชนิดเดียว สองชนิด หรือมากกว่าสองชนิดขึ้นไปผสมกันอย่างกลมกลืน จนมองเห็นเป็นเนื้อเดียวกันตลอด

ธาตุ คือ สารชนิดเดียวที่ไม่สามารถแยกหรือสลายออกไปเป็นสารอื่นได้ แบ่งออกเป็น 2 กลุ่ม ตามแหล่งที่มา ได้แก่ ธาตุที่เกิดขึ้นเองในธรรมชาติมีอยู่ 92 ธาตุ และธาตุที่นักวิทยาศาสตร์สังเคราะห์ขึ้นในห้องทดลองอีกหลายธาตุ แต่เมื่อแบ่งธาตุตามสถานะสามารถแบ่งออกเป็น 3 ชนิด คือ

1. โลหะ

   โลหะมีสถานะเป็นของแข็งที่อุณหภูมิปกติ ยกเว้นปรอทชนิดเดียวที่มีสถานะเป็นของเหลว

2. อโลหะ

   อโลหะเป็นธาตุที่เป็นได้ทั้ง 3 สถานะ คือ ของแข็ง ของเหลว และแก๊ส ดังแสดงในตารางธาตุ ธาตุอโลหะจะมีสมบัติตรงข้ามกับโลหะคือ เปราะ มีจุดเดือดต่ำและไม่นำ

ไฟฟ้า มีทั้งหมด 21 ธาตุ ในจำนวน 21 ธาตุนี้มีเพียง 9 ธาตุที่มีสถานะเป็นของแข็งที่อุณหภูมิปกติ ส่วนที่เหลืออีก 12 ธาตุมีสถานะเป็นแก๊ส

3. กึ่งโลหะ

ธาตุกึ่งโลหะ (semimetals) หรือ ธาตุเมทัลลอยด์ (matalliods) หมายถึง ธาตุที่มีสมบัติกึ่งโลหะและอโลหะ เช่น ธาตุซิลิคอน มีลักษณะคล้ายของแข็งมีสีเงินวาว แต่เปราะง่ายคล้ายธาตุอโลหะ มีจุดเดือดสูงถึง 3,265 องศาเซลเซียส และนำไฟฟ้าได้เล็กน้อย ธาตุกึ่งโลหะส่วนใหญ่จะเป็นสารกึ่งตัวนำ (semiconductors) และส่วนใหญ่มีโครงสร้างแบบโครงผลึกร่างตาข่าย จะอยู่ค่อนไปทางขวาของตารางธาตุ จะเป็นเส้นทึบเป็นขั้นบันไดปรากฏอยู่

ประเภทและสมบัติของสารประกอบ

สารประกอบเป็นสารเคมีที่เกิดจากธาตุเคมีตั้งแต่สองตัวขึ้นไปมารวมตัวกันโดยพันธะเคมีด้วยอัตราส่วนของส่วนประกอบที่แน่นอน ตัวอย่างเช่น ไดไฮโรเจนโมน็อกไซด์ หรือ น้ำ มีสูตรเคมีคือ H_2O ซึ่งเป็นสารที่ประกอบด้วย ไฮโดรเจน 2 อะตอม และ ออกซิเจน 1 อะตอม

ในสารประกอบ อัตราส่วนของส่วนประกอบจะต้องคงที่และตัวชี้วัดความเป็นสารประกอบที่สำคัญคือ คุณสมบัติทางกายภาพ ซึ่งจะแตกต่างจาก ของผสม (mixture) หรือ อัลลอย (alloy) เช่น ทองเหลือง (brass) ซูเปอร์คอนดักเตอร์ YBCO สารกึ่งตัวนำ อะลูมิเนียม แกลเลียม อาร์เซไนด์ (aluminium gallium arsenide) หรือ ช็อกโกแลต (chocolate) เพราะเราสามารถกำหนดอัตราส่วนของของผสมได้

ตัวกำหนดคุณลักษณะเฉพาะของสารประกอบที่สำคัญคือ สูตรเคมี (chemical formula) ซึ่งจะแสดงอัตราส่วนของอะตอมในสารประกอบนั้นๆ และจำนวนอะตอมในโมเลกุลเดียว เช่น สูตรเคมีของ อีทีน (ethene) จะเป็น C_2H_4 ไม่ใช่ CH_2 สูตรไม่ได้ระบุว่าสารประกอบประกอบด้วยโมเลกุล เช่น โซเดียมคลอไรด์ (เกลือแกง, NaCl) เป็นสารประกอบไอออนิก (ionic compound)

<u>ประเภทของสารประกอบจำแนกตามสมบัติ</u>

1. กรด

กรด (อังกฤษ: acid, มาจากภาษาละติน acidus/acēre หมายถึง "เปรี้ยว") เป็นสสารซึ่งทำปฏิกิริยากับเบส โดยทั่วไป กรดสามารถระบุได้ด้วยรสเปรี้ยว สมบัติทำปฏิกิริยากับโลหะอย่างแคลเซียม และเบสอย่างโซเดียมคาร์บอเนต กรดที่ละลายน้ำมี pH น้อยกว่า 7 โดยที่กรดจะแรงขึ้นตามค่า pH ที่ลดลง และเปลี่ยนกระดาษลิตมัสสีน้ำเงินเป็นแดง

ตัวอย่างทั่วไปของกรด รวมไปถึง กรดน้ำส้ม (น้ำส้มสายชู) กรดซัลฟิวริก (ในแบตเตอรีรถยนต์) และกรดทาร์ทาริก (ในการทำขนม) ดังสามตัวอย่างข้างต้น กรดสามารถเป็นได้ทั้งสารละลาย ของเหลวหรือของแข็ง สำหรับแก๊ส อย่างเช่น

ไฮโดรเจนคลอไรด์ ก็เป็นกรดได้เช่นกัน กรดแรงและกรดอ่อนเข้มข้นบางตัวมีฤทธิ์กัดกร่อน แต่มีข้อยกเว้น เช่น คาร์บอรีนและกรดบอริก

นิยามกรดโดยทั่วไปมีสามนิยาม ได้แก่ นิยามอาร์เรเนียส นิยามเบรินสเตด-ลาวรี และนิยามลิวอิส นิยามอาร์เรเนียสกล่าวว่า กรด คือ สสารที่เพิ่มความเข้มข้นของไฮโดรเนียมไอออน (H_3O^+) ในสารละลาย นิยามเบรินสเตด-ลาวรีเป็นการขยายขึ้น คือ กรดเป็นสสารซึ่งสามารถทำหน้าที่ให้โปรตอน กรดส่วนมากที่พบในชีวิตประจำวันเป็นสารละลายในน้ำ หรือสามารถละลายได้ในน้ำ และสองนิยามนี้เกี่ยวเนื่องที่สุด สาเหตุที่ pH ของกรดน้อยกว่า 7 นั้น เป็นเพราะความเข้มข้นของไฮโดรเนียมไอออนมากกว่า 10^{-7} โมลต่อลิตร เนื่องจาก pH นิยามเป็นลอการิทึมลบของความเข้มข้นของไฮโดรเนียมไอออน ดังนั้น กรดจึงมี pH น้อยกว่า 7 ตามนิยามเบรินสเตด-ลาวรี สารประกอบใดซึ่งสามารถให้โปรตอนง่ายสามารถพิจารณาได้ว่าเป็นกรด ตัวอย่างมีแอลกอฮอล์และเอมีน ซึ่งมีหมู่ O-H หรือ N-H

ในทางเคมี นิยามกรดลิวอิสเป็นนิยามที่พบมากที่สุด กรดลิวอิสเป็นตัวรับอิเล็กตรอนคู่โดดเดี่ยว ตัวอย่างกรดลิวอิส รวมไปถึงไอออนลบโลหะทั้งหมด และโมเลกุลอิเล็กตรอนน้อย เช่น โบรอนฟลูออไรด์ และอะลูมิเนียมไตรคลอไรด์ ไฮโดรเนียมไอออนเป็นกรดตามทั้งสามนิยามข้างต้น ที่น่าสนใจคือ แม้แอลกอฮอล์และเอมีนสามารถเป็นกรดเบรินเสตด-ลาวรีได้ตามที่อธิบายข้างต้น ทั้งสองยังทำหน้าที่เป็นเบสลิวอิสได้ เนื่องจากอะตอมออกซิเจนและไนโตรเจนมีอิเล็กตรอนคู่โดดเดี่ยว

2. เบส

เบสตามคำจำกัดความของอาร์รีเนียส (Svante Arrhenius) คือ สารประกอบเคมีที่ดูดไฮโดรเนียมไอออน เมื่อละลายในน้ำ (ผู้รับโปรตอน) เบสที่ละลายในน้ำเรียกว่าอัลคาไลในที่ที่สิ่งแวดล้อมเป็นน้ำ ไฮดรอกไซด์ไอออนจะถูกให้เบสและกรดถูกมองว่าอยู่ตรงข้ามกันเพราะว่าผลของกรดคือการเพิ่มความเข้มข้นของไฮโดรเนียมไอออน (H_3O^+) ในน้ำ ในขณะที่เบสลดความเข้มข้น เบส อาร์รีเนียสเมื่อละลายน้ำสารละลายของมันจะมี pH มากกว่า 7 เสมอ กรดเมื่อผสมกับเบสจะสะเทิน

3. สารประกอบไอออนิก

สารประกอบไอออนิก (อังกฤษ: Ionic compound) เป็นสารประกอบเคมีที่เกิดจากโลหะ (ที่มีประจุบวก) กับอโลหะ (ที่มีประจุลบ) มารวมกันเป็นสารประกอบ (หรือเรียกว่าเป็นเกลือ) โดยยึดเหนี่ยวกันด้วยพันธะไอออนิก ซึ่งสารประกอบไอออนิกจะเป็นสารประกอบที่ไม่มีสูตรเคมี แต่สามารถเขียนสูตรอย่างง่ายได้ เพราะไอออนจะเกาะกันหลายตัว ส่วนใหญ่จะเป็น เกลือกับเบส

4. ออกไซด์

- ออกไซด์ หมายถึง สารประกอบที่เกิดจากธาตุออกซิเจน รวมกับธาตุอื่นๆ

- ออกไซด์ของโลหะส่วนใหญ่เป็น สารประกอบไอออนิก และเป็นเบส เช่น แคลเซียมไฮดรอกไซด์ (CaO) ฯลฯ ออกไซด์ของโลหะทรานซิชั่น อาจเรียกว่า สนิม

- ออกไซด์ของกึ่งโลหะรวมถึง ออกไซด์ของโลหะบางชนิด เป็นได้ทั้งกรดและเบส เช่น อะลูมิเนียมออกไซด์ (Al_2O_3) ฯลฯ

- ออกไซด์ของอโลหะเป็นสารประกอบโคเวเลนต์ และเกือบทั้งหมดเป็นกรด เช่น คาร์บอนไดออกไซด์ (CO_2)

5. สารประกอบอินทรีย์

สารประกอบอินทรีย์หมายถึง สารประกอบเคมีที่อยู่ในสถานะใดก็ได้ ไม่ว่าจะเป็นของแข็ง ของเหลว หรือแก๊ส ที่ประกอบด้วยโมเลกุลคาร์บอน ยกเว้นสารประกอบบางชนิดที่ไม่จัดว่าเป็นสารประกอบอินทรีย์แม้ว่าจะมีคาร์บอนเป็นองค์ประกอบก็ตาม ตัวอย่างเช่น สารประกอบคาร์ไบน์ คาร์บอเนต ออกไซด์ของคาร์บอนและไซยาไนด์ เช่นเดียวกับอัญรูปของคาร์บอน อย่างเช่น เพชรและแกรไฟต์ ซึ่งถูกจัดเป็นสารประกอบอนินทรีย์

<u>ประเภทสารประกอบจำแนกตามพันธะภายในสารประกอบ</u>

1. พันธะโคเวเลนต์

พันธะโคเวเลนต์ (Covalent Bond) เป็นพันธะที่มีการใช้อิเล็กตรอนวงนอกสุดร่วมกันเพื่อให้ครบตามกฎออกเตต (Octet's Rule) คือมีอิเล็กตรอนวงนอกสุดครบ 8 ตัว ซึ่งยังมีพันธะโคเวเลนต์อีกชนิดหนึ่งคือ พันธะโคออร์ดิเนตโคเวเลนต์ (Coordinate Covalent Bond) ซึ่งเกิดจากการที่อะตอมหนึ่งให้อิเล็กตรอนทั้ง 2 ตัวแก่อิเล็กตรอนอีกตัวหนึ่งใช้ร่วมกัน สารประกอบเหล่านี้เรียกว่า สารประกอบโคเวเลนต์ (Covalent Compound)

2. พันธะไอออนิก

พันธะไอออนิก (Ionid Bond) เป็นพันธะที่เกิดจากการเสียและรับอิเล็กตรอนของอะตอมและเกิดแรงทางไฟฟ้าซึ่งกันและกันระหว่างไอออนบวกและไอออนลบ เกิดเป็นโครงผลึกขนาดยักษ์ ไม่มีโมเลกุล ซึ่งไอออนบวกและไอออนลบนี้จะเป็นอะตอมหรือกลุ่มอะตอมก็ได้ สารประกอบเหล่านี้เรียกว่า สารประกอบไอออนิก (Ionic Compound)

3. พันธะโครงผลึกร่างตาข่าย

พันธะโครงผลึกร่างตาข่ายเป็นพันธะที่แข็งแรงที่สุด และเป็นพันธะที่ไม่มีโมเลกุล พบในสารประเภท ทราย คาร์โบรันดัม เพชร แกรไฟต์ เป็นต้น

ประเภทสารประกอบจำแนกตามแหล่งกำเนิด

1. สารประกอบธรรมชาติ

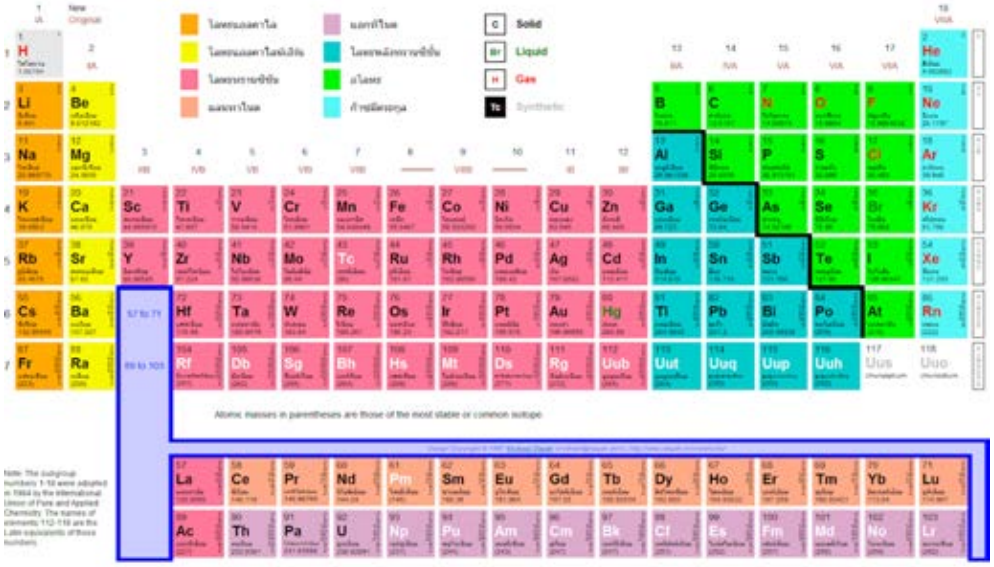
สารประกอบธรรมชาติ หมายความถึง สารประกอบที่ผลิตขึ้นจากพืชหรือสัตว์ สารประกอบจำนวนมากยังคงถูกสกัดจากแหล่งธรรมชาติ เนื่องจากสารประกอบเหล่านี้จะแพงกว่ามากหากผลิตขึ้นโดยมนุษย์ ตัวอย่างเช่น น้ำตาลส่วนใหญ่ อัลคาลอยด์และเทอร์ปินอยด์บางชนิด สารอาหารบางชนิด เช่น วิตามินบี12 และโดยทั่วไปแล้วผลิตภัณฑ์จากธรรมชาติเหล่านี้ที่มีโมเลกุลซับซ้อนขนาดใหญ่มักจะพบในความเข้มข้นพอสมควรในสิ่งมีชีวิต

สารประกอบอื่นที่มีความสำคัญอย่างยิ่งในชีวโมเลกุล คือ แอนติเจน คาร์โบไฮเดรต เอ็นไซม์ ฮอร์โมน ลิพิตและกรดไขมัน สารสื่อประสาท กรดนิวคลีอิก โปรตีน เพปไทด์และกรดอะมิโน เลกติน วิตามินและไขมันและน้ำมัน

2. สารประกอบสังเคราะห์

สารประกอบที่ถูกจัดเตรียมขึ้นโดยปฏิกิริยากับสารประกอบอื่นจะถูกเรียกว่า "สารประกอบสังเคราะห์" สารประกอบเหล่านี้อาจเป็นสารประกอบที่พบอยู่แล้วในพืชหรือสัตว์ (สารประกอบกึ่งสังเคราะห์) หรือสารที่ไม่พบตามธรรมชาติก็ได้ พอลิเมอร์ส่วนใหญ่ ซึ่งรวมไปถึงพลาสติกและยาง เป็นสารประกอบอินทรีย์สังเคราะห์หรือกึ่งสังเคราะห์

2.2 ตารางธาตุ



ภาพที่ 2.2.1 ตารางธาตุที่ใช้ในปัจจุบัน

(ที่มา: https://www.scimath.org/lesson-chemistry/item/7171-periodic-table)

สมบัติอะตอมตามตารางธาตุ

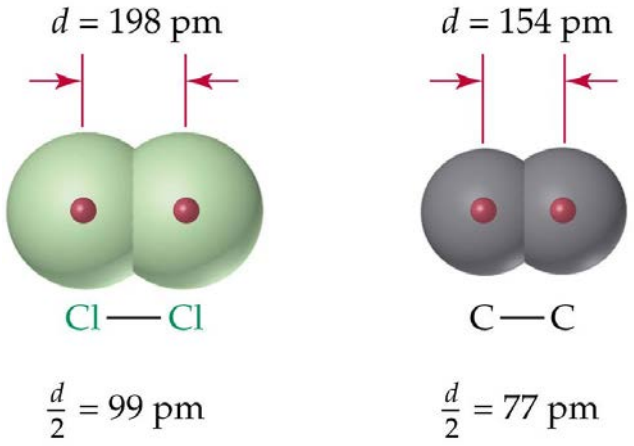
ตารางธาตุ เป็นอีกหนึ่งเครื่องมือของนักเคมีที่ช่วยจัดระเบียบของธาตุต่าง ๆ ที่ค้นพบ ทำให้เราจำสมบัติของธาตุได้ง่ายเนื่องจากสมบัติเหล่านั้นของธาตุในตารางธาตุมีแนวโน้มอย่างชัดเจน ดังนั้น ถ้าเราทราบสมบัติของธาตุหนึ่ง เราก็สามารถทำนายสมบัติของธาตุอื่นได้ด้วย เช่น เราทราบว่าขนาดอะตอมของ Li เท่ากับ 152 พิโคเมตร แล้วขนาดอะตอมของ Be เป็นเท่าใด เราสามารถตอบอย่างคร่าว ๆ ว่า "ควรจะมีขนาดอะตอมน้อยกว่า 152 พิโคเมตร" เป็นต้น

สมบัติของอะตอมตามตารางธาตุ ได้แก่

1. ขนาดอะตอม (atomic size)
2. พลังงานไอออไนเซชัน (ionization energy; IE)
3. สัมพรรคภาพอิเล็กตรอน (electron affinity; EA)
4. อิเล็กโทรเนกาติวิตี (electronegativity; EN)

ขนาดอะตอม (atomic size)

ขนาดของอะตอม วัดจากระยะห่างระหว่างนิวเคลียสของอะตอมที่อยู่ติดกัน สำหรับธาตุที่อยู่ในลักษณะโมเลกุลอะตอมคู่ รัศมีอะตอมจะถือว่าเป็นครึ่งหนึ่งของระยะระหว่างนิวเคลียสของ 2 อะตอมในโมเลกุล



ภาพที่ 2.2.2 การวัดขนาดอะตอม

(ที่มา: https://www.scimath.org/lesson-chemistry/item/7171-periodic-table)

จากรูป จะเห็นว่าระยะห่างระหว่างอะตอมของคลอรีนเท่ากับ 99 พิโคเมตร และระยะห่างระหว่างอะตอมของคาร์บอนเท่ากับ 77 พิโคเมตร นั่นคือ ขนาดอะตอมของคลอรีนเท่ากับ 99 พิโคเมตร และขนากอะตอมของคาร์บอนเท่ากับ 77 พิโคเมตร

ปัจจัยที่มีผลต่อขนาดอะตอม

1. เลขควอนตัมหลัก (n) ของเวเลนซ์อิเล็กตรอน
2. ประจุนิวเคลียสสุทธิ (effective nuclear charge; Zeff)

ธาตุในหมู่เดียวกัน ขนาดของอะตอมใหญ่ขึ้นจากบนลงล่าง เพราะธาตุที่อยู่ด้านล่างมีเลขควอนตัมหลักของเวเลนซ์อิเล็กตรอนมาก หรืออาจกล่าวว่า ขนาดของอะตอมมีขนาดใหญ่ขึ้นตามเลขควอนตัมหลักที่เพิ่มขึ้น ตัวอย่างเช่น ธาตุในหมู่ IA ขนาดอะตอม Li < Na < K < Rb < Cs < Fr

ธาตุในคาบเดียวกัน ขนาดของอะตอมเล็กลงจากซ้ายไปขวา เพราะประจุนิวเคลียสสุทธิเพิ่มขึ้น จึงดึงดูดเวเลนซ์อิเล็กตรอนมากขึ้น ขนาดอะตอมจึงเล็กลง ในขณะที่เลขควอนตัมหลักของเวเลนซ์อิเล็กตรอนคงที่ ตัวอย่างเช่น ธาตุในคาบที่ 2 ขนาดอะตอม Li > Be > B > C > N > O > F

พลังงานไอออไนเซชัน (ionization energy)

พลังงานไอออไนเซชัน คือ พลังงานที่ใช้ในการดึงอิเล็กตรอน 1 อนุภาค ออกจากอะตอมในสถานะแก๊ส กลายเป็นไอออนบวก

ธาตุในหมู่เดียวกัน พลังงานไอออไนเซชันลดลงจากบนลงล่าง เพราะระยะห่างระหว่างนิวเคลียสกับเวเลนซ์อิเล็กตรอนเพิ่มขึ้น ทำให้แรงดึงดูดระหว่างนิวเคลียสกับเวเลนซ์อิเล็กตรอนลดลง ทำให้อิเล็กตรอนหลุดจากอะตอมได้ง่าย เช่น ธาตุในหมู่ IA พลังงานไอออไนเซชัน Li > Na > K > Rb > Cs > Fr

ธาตุในคาบเดียวกัน พลังงานไอออไนเซชันเพิ่มขึ้นจากซ้ายไปขวา เพราะค่าประจุนิวเคลียสสุทธิมากขึ้น อะตอมขนาดเล็ก จึงมีแรงดึงดูดระหว่างนิวเคลียสกับเวเลนซ์อิเล็กตรอนมากขึ้น ทำให้อิเล็กตรอนหลุดยาก จึงต้องใช้พลังงานสูงในการดึงอิเล็กตรอนออกจากอะตอม เช่น ธาตุในคาบที่ 2 พลังงานไอออไนเซชัน Li < Be < B < C < N < O < F

สัมพรรคภาพอิเล็กตรอน (electron affinity)

สัมพรรคภาพอิเล็กตรอน คือ พลังงานที่อะตอมในสถานะแก๊สคายออกมาเมื่อได้รับอิเล็กตรอน

ค่าสัมพรรคภาพอิเล็กตรอนเป็นลบเพราะระบบ(อะตอม)คายพลังงานออกมาเมื่อรับอิเล็กตรอนเข้าไป ตามหลักเทอร์โมไดนามิกส์ (thermodynamics) ถ้าเราพิจารณาค่าสัมพรรคภาพอิเล็กตรอนโดยไม่คำนึงถึงค่าที่เป็นลบ จะเห็นว่า

ธาตุในหมู่เดียวกัน สัมพรรคภาพอิเล็กตรอนลดลงจากบนลงล่าง เช่น ธาตุในหมู่ IA สัมพรรคภาพอิเล็กตรอน Li > Na > K > Rb > Cs แสดงว่า Li รับอิเล็กตรอนเข้ามาในอะตอมได้ดีกว่า Cs

ธาตุในคาบเดียวกัน สัมพรรคภาพอิเล็กตรอนเพิ่มขึ้นจากซ้ายไปขวา เช่น ธาตุในคาบที่ 2 สัมพรรคภาพอิเล็กตรอน Li < Be < B < C < N < O < F แสดงว่า F รับอิเล็กตรอนเข้ามาในอะตอมได้ดีกว่า Li

อิเล็กโทรเนกาติวิตี (electronegativity)

อิเล็กโทรเนกาติวิตี หมายถึงความสามารถในการดึงดูดอิเล็กตรอนในพันธะเข้ามาหาตัวเอง ถ้าเราพิจารณาค่าอิเล็กโทรเนกาติวิตี จะเห็นว่า

ธาตุในหมู่เดียวกัน ค่าอิเล็กโทรเนกาติวิตีลดลงจากบนลงล่าง เช่น ธาตุในหมู่ IA อิเล็กโทรเนกาติวิตี Li > Na > K > Rb > Cs > Fr

ธาตุในคาบเดียวกัน ค่าอิเล็กโทรเนกาติวิตีเพิ่มขึ้นจากซ้ายไปขวา เช่น ธาตุในคาบที่ 2 อิเล็กโทรเนกาติวิตี Li < Be < B < C < N < O < F

การจัดธาตุลงในตารางธาตุ

ตารางธาตุประกอบด้วยธาตุ 8 หมู่

1. ธาตุหมู่ I มีสมบัติเป็นโลหะซึ่งมีคุณสมบัติว่องไวในการผสมธาตุมาก ธาตุหมู่ I เรียกว่า alkalai metalและมีอิเล็กตรอนวงนอกสุดอยู่ 1 ตัว
2. ธาตุหมู่ II เป็นธาตุโลหะ มีอิเล็กตรอนวงนอกสุด 2 ตัว ธาตุที่ว่องไวที่สุดในหมู่นี้ คือ เรเดียม (Ra)
3. ธาตุหมู่ III จะเริ่มประกอบด้วยโลหะและอโลหะ มีอิเล็กตรอนวงนอกสุด 3 ตัว
4. ธาตุหมู่ IV มีอิเล็กตรอนวงนอกสุด 4 ตัว
5. ธาตุหมู่ V ในตอนต้น ๆ จะเป็นอโลหะ ธาตุถัดมา เช่น สารหนู (As) และอันติโมนี (Sb) จะแสดงคุณสมบัติระหว่างโลหะและอโลหะก้ำกึ่งกัน ลักษณะเช่นนี้เรียกว่ามีสมบัติเป็น metalloid
6. ธาตุหมู่ VI ตอนต้นหมู่จะมีธาตุที่มีสมบัติเป็นอโลหะ แล้วค่อย ๆ เป็นโลหะ
7. ธาตุหมู่ VII มีชื่อเรียกว่า Halogen group ธาตุหมู่นี้เป็นอโลหะ ที่ว่องไวในการผสมธาตุมาก
8. ธาตุหมู่ VIII จัดเป็นธาตุ Inert gas จึงไม่ค่อยทำปฏิกิริยากับธาตุอื่น เพราะมีอิเล็กตรอนวงนอกสุดเท่ากับ 8

ประโยชน์ของตารางธาตุ

1. การจัดธาตุเป็นหมู่และคาบ ทำให้ทราบสมบัติของธาตุในหมู่เดียวกันได้
2. สามารถที่จะทราบสมบัติต่าง ๆ จากธาตุในหมู่เดียวกัน
3. นำไปทำนายสมบัติของธาตุต่าง ๆ ที่ยังไม่ทราบในปัจจุบันไว้ล่วงหน้าได้
4. ทำให้การศึกษาเรื่องสมบัติของธาตุ เป็นไปอย่างรวดเร็ว

2.3 พันธะเคมี

พันธะเคมี (Chemical Bonding) หมายถึง แรงยึดเหนี่ยวระหว่างอะตอมภายในโมเลกุลหรือระหว่างโมเลกุลด้วยกันเอง เพื่อทำให้เวเลนต์อิเล็กตรอนมีค่าเท่ากับแปด ทำให้อะตอมนั้น มีความเสถียรและสามารถดำรงอยู่อย่างอิสระ

พันธะเคมีแบ่งออกเป็นประเภทใหญ่ๆ ได้ 2 ประเภทคือ

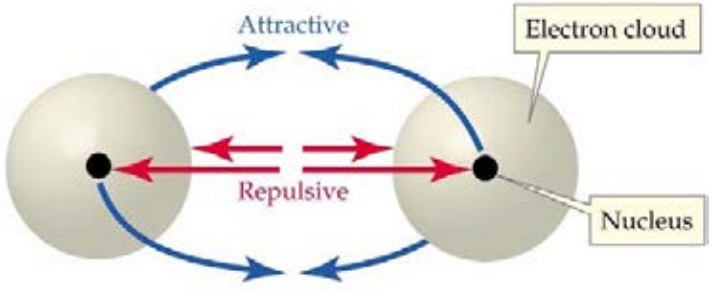
1. พันธะภายในโมเลกุล (Intramolecular bond) ได้แก่
    - พันธะโคเวเลนต์ (Covalent bond)
    - พันธะไอออนิก (lionic bond)
    - พันธะโลหะ (Metallic bond)
2. พันธะระหว่างโมเลกุล (Intermolecular bond)
    - พันธะไฮโดรเจน(Hydrogen bond)
    - แรงแวนเดอร์วาลส์ (van der Waals force)
    - แรงลอนดอน (London force)

พันธะโคเวเลนต์

พันธะโคเวเลนต์ (Covalent bond) หมายถึง พันธะเคมีที่เกิดจากอะตอมของธาตุใช้อิเล็กตรอนร่วมกัน

การเกิดพันธะโคเวเลนต์ (Covalent bond formation) พันธะโควาเลนต์มักเกิดขึ้นระหว่างอะตอมที่มีค่าอิเล็กโตรเนกาทิวิตีใกล้เคียงกัน โดยแต่ละอะตอมต่างมีความสามารถที่จะดึงอิเล็กตรอนไว้กับตัวใกล้เคียงกัน อิเล็กตรอนคู่ร่วมพันธะจึงไม่ได้อยู่ ณ อะตอมใดอะตอมหนึ่ง แต่เป็นการใช้อิเล็กตรอนร่วมกันเพื่อให้มีความเสถียรตามกฎออกเตต (Octet rule)

โดยปกติการเกิดพันธะโคเวเลนต์ จะเกี่ยวข้องกับแรง 2 ประเภท ได้แก่ แรงผลักและแรงดูดระหว่างอะตอมทั้งสองที่มีความสมดุลกัน กล่าวคือ เกิดแรงผลักระหว่างอิเล็กตรอน - อิเล็กตรอนของแต่ละอะตอม และแรงผลักระหว่างนิวเคลียส - นิวเคลียสของแต่ละอะตอม รวมทั้งแรงดึงดูดระหว่างนิวเคลียสกับอิเล็กตรอนของอะตอมทั้งสอง ดังภาพ



ภาพที่ 2.3.1 แสดงการเกิดพันธะโคเวเลนต์

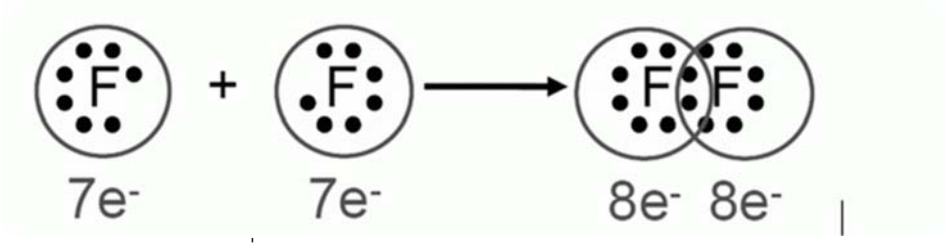
(ที่มา: https://www.scimath.org/lesson-chemistry/item/7074-chemical-bonding)

เมื่ออะตอมอยู่อย่างอิสระจะมีค่าพลังงานสูง ซึ่งไม่เสถียร ดังนั้น การรวมกันเป็นโมเลกุล จะทำให้มีค่าพลังงานที่ต่ำกว่า และมีความเสถียรสูง จากภาพวิดีโอจะสังเกตเห็นว่า เมื่ออะตอมไฮโดรเจน 2 อะตอมเข้าใกล้กันเป็นระยะทาง 0.74 อังสตรอม (หรือ 74 พิโคเมตร) ซึ่งเป็นระยะทางที่เหมาะสมในการเกิดพันธะโคเวเลนต์ระหว่างไฮโดรเจน ค่าพลังงานจะต่ำที่สุด และเมื่ออะตอมเข้าใกล้กันมากขึ้นค่าพลังงานกลับสูงขึ้น เนื่องจากเกิดการผลักกันระหว่างนิวเคลียส - นิวเคลียสของแต่ละอะตอมนั่นเอง

ประเภทของพันธะโคเวเลนต์ เราสามารถแบ่งประเภทของพันธะโคเวเลนต์ตามการใช้อิเล็กตรอนร่วมกันของอะตอม ได้เป็น 3 ประเภท ได้แก่

1. พันธะเดี่ยว เป็นพันธะที่เกิดจากอะตอมคู่สร้างพันธะใช้อิเล็กตรอนร่วมกัน 1 คู่
2. พันธะคู่ เป็นพันธะที่เกิดจากอะตอมคู่สร้างพันธะใช้อิเล็กตรอนร่วมกัน 2 คู่
3. พันธะสาม เป็นพันธะที่เกิดจากอะตอมคู่สร้างพันธะใช้อิเล็กตรอนร่วมกัน 3 คู่

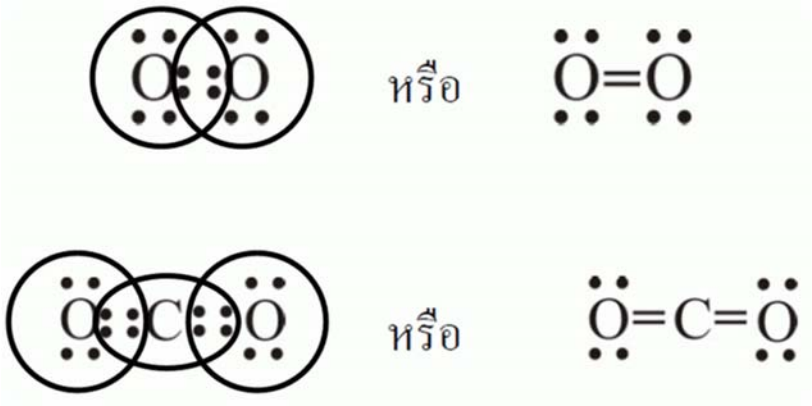
ในปี 1916 Prof. Gilbert N. Lewis ได้เสนอแนวความคิดว่า พันธะโคเวเลนต์ เป็นเรื่องของการใช้อิเล็กตรอนร่วมกันระหว่างอะตอม 2 อะตอม โดยเป็นไปตามกฎออกเตต โดยทั่วไปมักเขียนพันธะในโมเลกุลตามแบบของลิวอิส โดยใช้จุดแทนอิเล็กตรอน และเรียกว่าสัญลักษณ์แบบจุด (Lewis dot structure) ดังรูป



ภาพที่ 2.3.2 แสดงการเกิดพันธะโคเวเลนต์ โดย Lewis

(ที่มา: https://www.scimath.org/lesson-chemistry/item/7074-chemical-bonding)

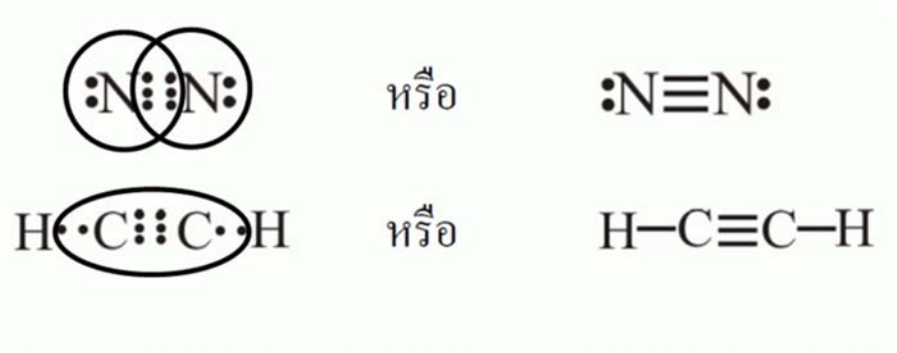
อิเล็กตรอนที่ไม่ได้ใช้ในการสร้างพันธะ จะเรียกว่า อิเล็กตรอนคู่โดดเดี่ยว (Lone pair electron) ในกรณีโมเลกุลฟลูออรีน อิเล็กตรอนที่ใช้ในการสร้างพันธะมี 1 คู่ จึงเป็นการเกิดพันธะที่เรียกว่า พันธะเดี่ยว และ ในโมเลกุลของออกซิเจน (O_2) ซึ่งประกอบด้วยอะตอมออกซิเจน 2 ตัว และใช้อิเล็กตรอน 2 คู่ในการสร้างพันธะ จึงเรียกว่า พันธะคู่ ดังรูป



ภาพที่ 2.3.3 แสดงพันธะคู่

(ที่มา: https://www.scimath.org/lesson-chemistry/item/7074-chemical-bonding)

ในโมเลกุลของไนโตรเจน (N_2) ซึ่งประกอบด้วยอะตอมไนโตรเจน 2 ตัว และใช้อิเล็กตรอน 3 คู่ในการสร้างพันธะ จึงเรียกว่า พันธะสามดังรูป



ภาพที่ 2.3.4 แสดงพันธะสาม

(ที่มา: https://www.scimath.org/lesson-chemistry/item/7074-chemical-bonding)

ตารางที่ 2.3.1 ตัวอย่างจำนวนอิเล็กตรอนในการเกิดพันธะโคเวเลนต์

ธาตุ	หมู่	จำนวนเวเลนซ์อิเล็กตรอน	จำนวนอิเล็กตรอนที่ share
F	VIIA	7	1
O	VIA	6	2
N	VA	5	3
C	IVA	4	4

พันธะไอออนิก

พันธะไอออนิก คือ พันธะที่เกิดขึ้นจากอะตอมโลหะ และอโลหะ โดยอะตอมโลหะจะทำหน้าที่ในการให้อิเล็กตรอนแก่อะตอมอโลหะ ทำให้เกิด ไอออนบวก (cation) และไอออนลบ (anion) ดังนั้น พันธะไอออนิกจึงเกิดแรงดึงดูดทางไฟฟ้าสถิตระหว่างไอออนบวกและไอออนลบ

<u>การเขียนสูตร และการเรียกชื่อสารประกอบไอออนิก</u>

1. การเขียนสูตรเอมพิริคัลของสารประกอบไอออนิก เราจะต้องรู้ประจุของไอออนแต่ละชนิดในสารประกอบ เช่น NaCl (โซเดียมคลอไรด์) ประกอบด้วย Na^+ และ Cl^- ซึ่งมีอัตราส่วน 1 : 1 หรือ $MgCl_2$ (แมกนีเซียมคลอไรด์) ประกอบด้วย Mg^{2+} และ Cl^- ซึ่งมีอัตราส่วน 1 : 2
2. การเรียกชื่อสารประกอบไอออนิก ต้องอ่านชื่อไอออนบวกก่อน แล้วจึงตามด้วยไอออนลบ ดังนี้

    2.1 ถ้าไอออนบวกมีเลขประจุได้เพียงค่าเดียว เช่น Na^+ (โซเดียมไอออน) K^+ (โพแทสเซียมไอออน) Ba^{2+} (แบเรียมไอออน) และ Mg^{2+} ให้อ่านชื่อไอออนโดยไม่ต้องใส่เลขโรมัน (แมกนีเซียมไอออน) เป็นต้น

    2.2 ถ้าไอออนบวกมีเลขประจุได้มากกว่า 1 ค่า เช่น ธาตุพวกโลหะทรานซิชัน ให้อ่านชื่อไอออนแล้วตามด้วยเลขประจุของไอออน เช่น Fe^{2+} (ไอร์ออน (II) ไอออน) Fe^{3+} (ไอร์ออน (III) ไอออน) เป็นต้น

    2.3 ไอออนลบที่มีออกซิเจนเป็นองค์ประกอบ จะใช้คำลงท้ายเป็น

<u>ลักษณะสำคัญของสารประกอบไอออนิก</u>

1. พันธะไอออนิกเกิดจากไอออนของธาตุโลหะ และธาตอโลหะ เช่น Li^+ และ Cl^- (LiCl)
2. พันธะไอออนิก เกิดจากกลุ่มอะตอมที่เป็นไอออนบวก และกลุ่มอะตอมของไอออนลบ เช่น NH_4^+ และ Cl^- (NH_4Cl) และ K^+ และ NO_3^- (KNO_3)
3. โดยทั่วไปสารประกอบไอออนิกจะมีแต่สูตรเอมพิริคัล ไม่มีสูตรโมเลกุล
4. มีจุดเดือด จุดหลอมเหลวสูง
5. ในสภาพของแข็งจะไม่นำไฟฟ้า แต่เมื่อหลอมเหลวหรือเกิดการละลายจะนำไฟฟ้าได้
6. การละลายน้ำ สารประกอบไอออนิกโดยทั่วไปจะละลายน้ำได้ดี และไม่ละลายในตัวทำละลายอินทรีย์ ดังนั้น น้ำทะเลจึงมีรสเค็ม เพราะมีเกลือละลายอยู่เป็นจำนวนมากนั่นเอง

พันธะโลหะ

พันธะโลหะ (Metallic bonding) เกิดจากพันธะระหว่างอะตอมโลหะซึ่งมีการเคลื่อนย้ายอิเล็กตรอนอิสระระหว่างแลตทิซของอะตอม โดยอิเล็กตรอนที่เคลื่อนย้ายเหล่านี้เปรียบได้กับทะเลอิเล็กตรอน(Sea of Electrons) ล้อมรอบขนาดใหญ่ของไอออนบวกในพันธะโลหะอิเล็กตรอนไม่ได้

เป็นของอะตอมใดอะตอมหนึ่งเพียงอะตอมเดียว แต่อิเล็กตรอนทุกตัวสามารถเคลื่อนที่ไปยังอะตอมใกล้เคียงได้

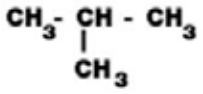
เนื่องจากอะตอมโลหะ มีค่าพลังงานไอออไนเซชันต่ำ ดังนั้น อิเล็กตรอนจึงหลุดออกจากอะตอมได้ง่าย และในทำนองเดียวกันอะตอมโลหะเมื่อมาอยู่รวมกัน จึงมีแต่อะตอมที่ให้อิเล็กตรอน แต่ไม่มีตัวรับอิเล็กตรอน ดังนั้น อิเล็กตรอนจึงเคลื่อนที่ไปมาได้อย่างอิสระ จัดว่าเป็นพันธะที่มีแรงยึดเหนี่ยวที่แข็งแรงมาก

<u>คุณสมบัติของพันธะโลหะ</u>

1. เป็นตัวนำไฟฟ้า และตัวนำความร้อนที่ดี เนื่องจากอิเล็กตรอนเคลื่อนที่ได้ง่าย
2. จุดหลอมเหลวสูงมาก เนื่องจากอิเล็กตรอนยึดกันไว้อย่างเหนียวแน่น
3. สามารถตีเป็นแผ่นบางได้โดยไม่ขาดออกจากกัน เนื่องจากอิเล็กตรอนยึดกันไว้อย่างเหนียวแน่นเช่นกัน
4. สามารถสะท้อนแสง เนื่องจากความมันวาวของโลหะได้
5. โดยทั่วไปจะอยู่ในสถานะของแข็ง ยกเว้น Hg (ปรอท) ที่อยู่ในสถานะของเหลว ที่อุณหภูมิห้อง

2.4 ไอโซเมอร์

ไอโซเมอร์ (Isomer) คือ สารที่มีสูตรโมเลกุลเหมือนกัน แต่มีสูตรโครงสร้างต่างกัน เช่น



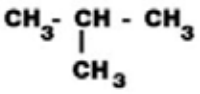
C_4H_{10} $CH_3CH_2CH_2CH_3$

สารที่เป็นไอโซเมอร์กัน ถ้ามีหมู่ฟังก์ชันเหมือน ก็พบว่ามีสมบัติทางกายภาพต่างกัน แต่สมบัติทางเคมีเหมือนกัน

สารที่เป็นไอโซเมอร์กัน ถ้ามีหมู่ฟังก์ชันต่างกันอีกจะพบว่ามีสมบัติทางกายภาพ และสมบัติทางเคมีต่างกัน

ไอโซเมอร์ของสารอินทรีย์ใด ที่คาร์บอนต่อกันเป็นโซ่สายยาว จะมีจุดเดือด จุดหลอมเหลว และความหนาแน่นสูงกว่าไอโซเมอร์ของสารอินทรีย์ที่มีคาร์บอนต่อกันแตกกิ่งก้านสาขา เพราะไอโซเมอร์ที่คาร์บอนต่อกันเป็นโซ่สายยาวจะมีขนาดใหญ่ และมีพื้นที่ผิวมากกว่า ทำให้เกิดแรงดึงดูดระหว่างโมเลกุล คือแรงแวนเดอร์วาลส์สูงกว่าไอโซเมอร์ที่คาร์บอนต่อกันมีกิ่งก้านสาขา เช่น

C_4H10 $CH_3CH_2CH_2CH_3$ bp = -0.5 C mp = -138.3 C d = 0.6012 g/cm3



bp = -12 C mp = -159 C d = 0.603 g/cm3

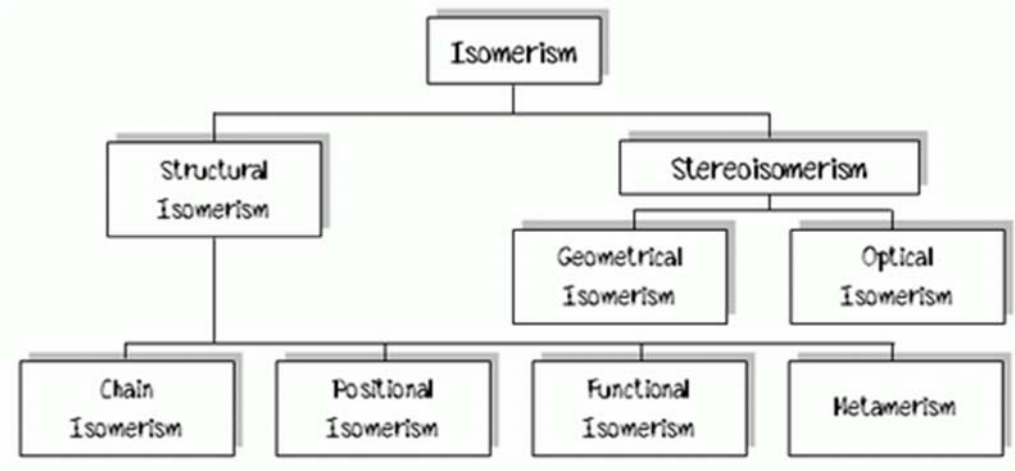
ไอโซเมอร์ริซึม (Isomerism)

ไอโซเมอร์ริซึม (Isomerism) คือ ปรากฏการณ์ที่สารมีสูตรโมเลกุลเหมือนกัน แต่มีโครงสร้างต่างกัน สมบัติอาจคล้ายหรือต่างกันก็ได้

ลักษณะสำคัญของไอโซเมอริซึม

1. สารอินทรีย์ที่มีจำนวนอะตอมของคาร์บอนมากเกิดไอโซเมอร์ได้ ดังนั้นสารอินทรีย์ จึงเป็นสารที่มีมากที่สุดในโลก
2. สารอินทรีย์ที่เป็นไอโซเมอร์กัน ไอโซเมอร์ต่างชนิดกัน จะมีสมบัติบางประการแตกต่างกัน เช่น จุดเดือด จุดหลอมเหลว ความหนาแน่น
3. ไอโซเมอร์ของสารอินทรีย์ใดที่มีคาร์บอนต่อกันเป็นโซ่ยาว จะมีจุดเดือดและจุดหลอมเหลวสูงกว่าไอโซเมอร์ของสารอินทรีย์ที่มีคาร์บอนต่อกันเป็นกิ่งก้านสาขา เพราะไอโซเมอร์ที่มีคาร์บอนต่อกันเป็นโซ่สายยาวจะมีขนาดใหญ่ และมีพื้นที่ผิวมากกว่า ทำให้เกิดแรงดึงดูดระหว่างโมเลกุล คือ แรงแวนเดอร์วาลส์สูงกว่า ไอโซเมอร์ที่คาร์บอนต่อกันมีกิ่งก้านสาขา

ชนิดของไอโซเมอร์



ภาพที่ 2.4.1 แสดงการจำแนกชนิดของไอโซเมอร์

(ที่มา: https://www.scimath.org/lesson-chemistry/item/7103-isomer)

1. ไอโซเมอร์โครงสร้าง(Structural Isomer) คือ ไอโซเมอร์ที่เกิดจากโครงสร้างแตกต่างกัน ซึ่งเป็นผลมาจากการจัดเรียงตัวของอะตอมคาร์บอนต่างกันทำให้ได้โครงสร้างแบบโซ่ตรงและโซ่กิ่ง หรือแบบปลายเปิดและปลายปิด
2. สเตอริโอไอโซเมอร์ (Stereoisomer) คือ ไอโซเมอร์ที่เกิดจากสารมีโครงสร้างและพันธะเหมือนกัน แต่อะตอมหรือกลุ่มอะตอมจัดเรียงตัวในตำแหน่งต่างกัน มี 2 ประเภทคือ

2.1 ไอโซเมอร์เรขาคณิต (Geometrical Isomer) เกิดจากสารที่มีสูตรโมเลกุลเหมือนกันมีพันธะคู่ระหว่าง คาร์บอนตำแหน่งเดียวกัน ซึ่งพันธะ C=C ไม่สามารถหมุนได้อย่างอิสระ ทำให้อะตอมหรือกลุ่มอะตอมที่เหมือนกันซึ่งเกาะที่คาร์บอนทั้งสองอะตอมจัด เรียงตัวแตกต่างกันเช่นจัดเรียงตัวในทิศเดียวกัน (cis-isomer) หรือจัดเรียงตัวในทิศตรงข้ามกัน (trans-isomer)

2.2 ออปติคอลไอโซเมอร์ (Optical Isomer) เป็นไอโซเมอร์ที่เกิดจากการจัดเรียงตัวของอะตอมหรือกลุ่มอะตอมที่มีลักษณะเหมือนภาพในกระจกเงา ซึ่งเมื่อนำโมเลกุลมาซ้อนทับกันจะไม่สามารถทับกันได้สนิท และเมื่อผ่านแสงโพลาไรซ์ไปยังสารละลายของสารไอโซเมอร์ แสงจะเบนไปจากแนวเดิมในทิศทางตรงข้ามกัน

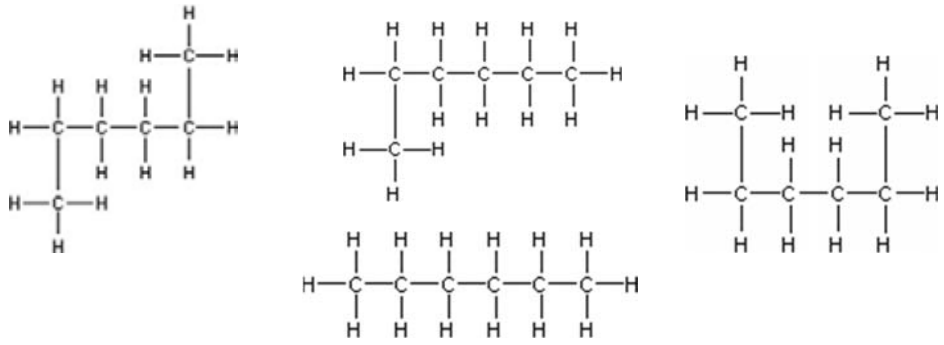
หลักการเขียนไอโซเมอร์

1. พิจารณาจากสูตรโมเลกุลก่อนว่าเป็นสารประเภทใด
2. เมื่อทราบว่าเป็นสารประเภทใดแล้วจึงนำมาเขียนไอโซเมอร์
3. ถ้าเป็นสารพวกโซ่เปิด (Open chain หรือ Acyclic) มักจะเริ่มเขียนไอโซเมอร์จากตัวที่มี C ต่อกันเป็นสายตรงยาวที่สุดก่อน หลังจากนั้นจึงลดความยาวของ C สายตรงลงครั้งละอะตอม
4. ในกรณีที่เป็นไฮโดรคาร์บอนแบบวง (Cyclic chain) มักจะเริ่มจากวงที่เล็กก่อน คือเริ่มจาก C 3 อะตอม แล้วจึงเพิ่มเป็น 4 อะตอม ตามลำดับ

การพิจารณาว่าสารคู่หนึ่งเป็นไอโซเมอร์กันหรือไม่

1. ถ้าประกอบด้วยธาตุต่างชนิดกัน จะไม่เป็นไอโซเมอร์กัน
2. ถ้าประกอบด้วยธาตุชนิดเดียวกัน และจำนวนอะตอมเท่ากัน จะต้องพิจารณาขั้นต่อไป

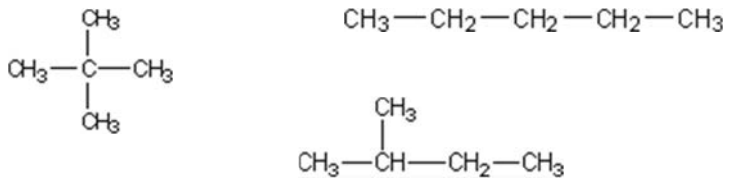
2.1 ถ้าสูตรโครงสร้างเหมือนกัน จะเป็นสารชนิดเดียวกัน ไม่เป็นไอโซเมอร์กัน เช่น



ภาพที่ 2.4.2 แสดงโมเลกุลที่สูตรโครงสร้างเหมือนกันที่ไม่เป็นไอโซเมอร์กัน

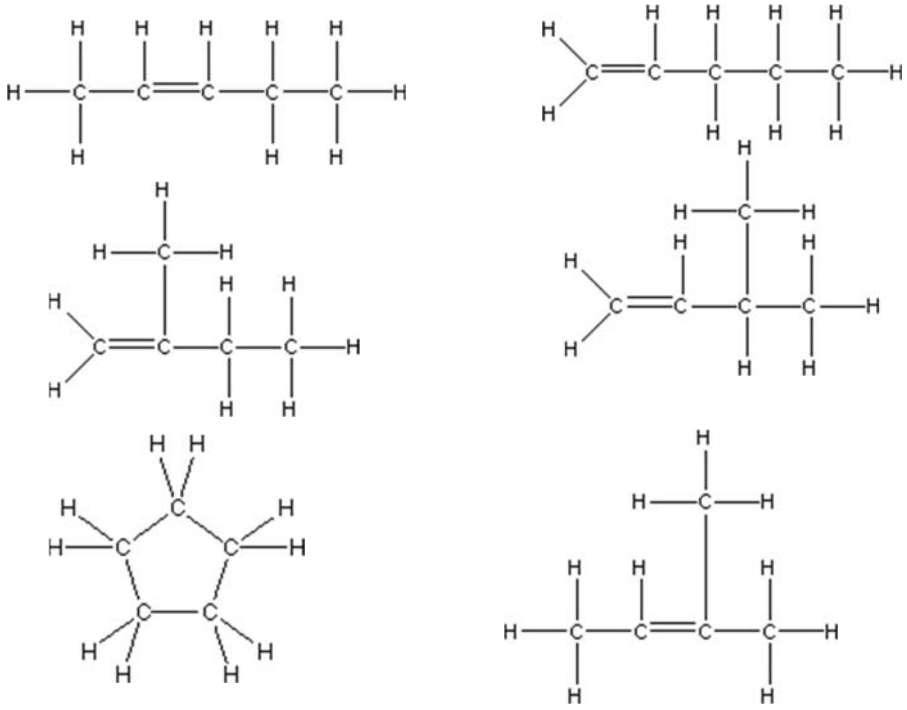
(ที่มา: https://www.scimath.org/lesson-chemistry/item/7103-isomer)

2.2 ถ้าสูตรโครงสร้างต่างกัน จะเป็นเป็นไอโซเมอร์กัน เช่น สารที่มีสูตรโมเลกุลเป็น C_5H_{12} มี 3 ไอโซเมอร์ ดังนี้



ภาพที่ 2.4.3 แสดงโมเลกุลที่เป็นไอโซเมอร์ของ C_5H_{12}
(ที่มา: https://www.scimath.org/lesson-chemistry/item/7103-isomer)

สำหรับสารที่มีสูตรโมเลกุลเป็น C_5H_{10} มีไอโซเมอร์ที่เป็นโซ่เปิด 6 ไอโซเมอร์ โดยเป็นโซ่ตรง 2 ไอโซเมอร์ และโซ่กิ่ง 3 ไอโซเมอร์ และแบบวงอีก 1 ไอโซเมอร์ ดังนี้



ภาพที่ 2.4.4 แสดงโมเลกุลที่เป็นไอโซเมอร์ของ C_5H_{10}
(ที่มา: https://www.scimath.org/lesson-chemistry/item/7103-isomer)

การเปลี่ยนโครงสร้างของสารประกอบอินทรีย์ที่มีสูตรโมเลกุลเหมือนกัน หรือการเกิดไอโซเมอร์จากโซ่ตรงเป็นโซ่กิ่ง จากโซ่เปิดเป็นแบบวง และการเปลี่ยนตำแหน่งของพันธะคู่หรือพันธะสามระหว่างอะตอมของคาร์บอน ทำให้เกิดโครงสร้างใหม่ซึ่งต่างก็เป็นไอโซเมอร์กัน ดังนั้นการเกิดไอโซเมอร์จึงเป็นอีกสาเหตุหนึ่งที่ทำให้มีสารประกอบอินทรีย์เป็นจำนวนมาก

สเตอริโอเคมี (Stereochemistry)

สเตอริโอเคมี คือ การศึกษาสูตรโครงสร้างของโมเลกุลในสามมิติ โดยดูการจัดเรียงตัวของอะตอมต่างๆ ในโมเลกุล โดยยึดอะตอมหรือหมู่อะตอมเป็นหลัก พยายามบอกความแตกต่างและหาความสัมพันธ์ของโมเลกุลที่มีสูตรเหมือนกัน แต่การจัดเรียงอะตอมต่างๆ ในสามมิติแตกต่างกัน แต่ร่างกายคนเราหรือสิ่งมีชีวิตมักผลิตได้เฉพาะสเตอริโอเคมีแบบเดี่ยว สารที่จะใช้ในกระบวนการเมตาบอลิซึมก็ต้องมีการจัดรูปแบบสามมิติที่เฉพาะ สเตอริโอเคมีจึงมีความสำคัญต่อ อาหาร ยา และปัจจุบันกำลังมีบทบาทสำคัญมากขึ้นในทางทฤษฎีของรสชาติและกลิ่น

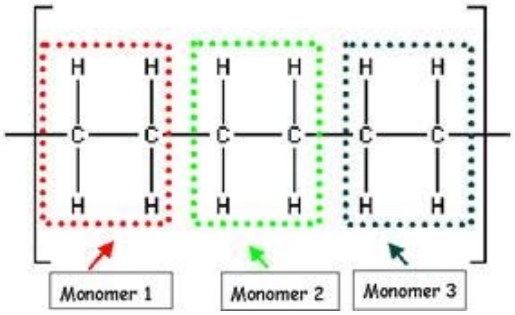
ในการศึกษาทางเคมีนั้นสเตอริโอเคมี มีการจัดเรียงอะตอมในที่ว่างที่สำคัญ 3 พวก ได้แก่

1. จีออเมตริกไอโซเมอร์ หรือ ซีล-ทรานไอโซเมอร์ ซึ่งเป็นความแตกต่างระหว่างไอโซเมอร์ที่เกิดจากการที่โมเลกุลไม่สามารถบิด ตัวรอบพันธะเนื่องจาก rigidity ภายในโมเลกุล
2. คอนฟอร์เมชัน ของโมเลกุลซึ่งเป็นการเปลี่ยนแปลงรูปร่างของโมเลกุลเนื่องจากการหมุนของ พันธะเดี่ยว
3. ไครัลลิตี ของโมเลกุล ซึ่งเป็นการจัดเรียงอะตอมต่างๆ รอบคาร์บอนไปทางขวาและซ้ายมือทำให้เกิดไอโซเมอริซึม ไอโซเมอริซึม คือ สารคนละตัวที่มีสูตรโมเลกุลเหมือนกันที่ผ่านมาแล้วเป็นไอโซเมอร์ของสารที่สูตรโครงสร้างต่างกันตรงที่การจัดเรียง ตำแหน่งของอะตอมต่างกัน ซึ่งเรียกว่าสตรักเจอรัลไอโซเมอร์

2.5 พอลิเมอร์

พอลิเมอร์ (Polymer) คือ สารประกอบที่มีโมเลกุลขนาดใหญ่ และมีมวลโมเลกุลมาก ประกอบด้วยหน่วยเล็ก ๆ ของสารที่อาจจะเหมือนกันหรือต่างกันมาเชื่อมต่อกันด้วยพันธะโคเวเลนต์

มอนอเมอร์ (Monomer) คือ หน่วยเล็ก ๆ ของสารในพอลิเมอร์ ดังภาพ



ภาพที่ 2.5.1 แสดงตัวอย่างมอนอเมอร์

(ที่มา: http://www.scimath.org/lesson-chemistry/item/7089-polymer)

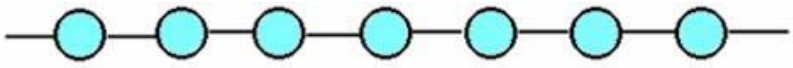
ประเภทของพอลิเมอร์

แบ่งตามการเกิดเป็นเกณฑ์ เป็น 2 ชนิด คือ

1. พอลิเมอร์ธรรมชาติ เป็นพอลิเมอร์ที่เกิดขึ้นเองตามธรรมชาติ เช่น โปรตีน แป้ง เซลลูโลส ไกโคเจน กรดนิวคลีอิก และยางธรรมชาติ (พอลีไอโซปรีน)
2. พอลิเมอร์สังเคราะห์ เป็นพอลิเมอร์ที่เกิดจากการสังเคราะห์เพื่อใช้ประโยชน์ต่าง ๆ เช่น พลาสติก ไนลอน ดาครอน และลูไซต์ เป็นต้น

แบ่งตามชนิดของมอนอเมอร์ที่เป็นองค์ประกอบ เป็น 2 ชนิด คือ

1. โฮโมพอลิเมอร์ (Homopolymer) เป็นพอลิเมอร์ที่ประกอบด้วยมอนอเมอร์ชนิดเดียวกัน เช่น แป้ง(ประกอบด้วยมอนอเมอร์ที่เป็นกลูโคสทั้งหมด) พอลิเอทิลีน PVC (ประกอบด้วยมอนอเมอร์ที่เป็นเอทิลีนทั้งหมด)



ภาพที่ 2.5.2 โฮโมพอลิเมอร์

(ที่มา: http://www.scimath.org/lesson-chemistry/item/7089-polymer)

2. เฮเทอโรพอลิเมอร์ (Heteropolymer) เป็นพอลิเมอร์ที่ประกอบด้วยมอนอเมอร์ต่างชนิดกัน เช่น โปรตีน (ประกอบด้วยมอนอเมอร์ที่เป็นกรดอะมิโนต่างชนิดกัน) พอลิเอสเทอร์ พอลิเอไมด์ เป็นต้น

ภาพที่ 2.5.3 เฮเทอโรพอลิเมอร์

(ที่มา: http://www.scimath.org/lesson-chemistry/item/7089-polymer)

แบ่งตามโครงสร้างของพอลิเมอร์ แบ่งออกเป็น 3 แบบ คือ

1. พอลิเมอร์แบบเส้น (Chain length polymer) เป็นพอลิเมอร์ที่เกิดจากมอนอเมอร์สร้างพันธะต่อกันเป็นสายยาว โซ่พอลิเมอร์เรียงชิดกันมากกว่าโครงสร้างแบบอื่น ๆ จึงมีความหนาแน่น และจุดหลอมเหลวสูง มีลักษณะแข็ง ขุ่นเหนียวกว่าโครงสร้างอื่นๆ ตัวอย่าง PVC พอลิสไตรีน พอลิเอทิลีน ดังภาพ

ภาพที่ 2.5.4 พอลิเมอร์แบบเส้น

(ที่มา: http://www.scimath.org/lesson-chemistry/item/7089-polymer)

2. พอลิเมอร์แบบกิ่ง (Branched polymer) เป็นพอลิเมอร์ที่เกิดจากมอนอเมอร์ยึดกันแตกกิ่งก้านสาขา มีทั้งโซ่สั้นและโซ่ยาว กิ่งที่แตกจาก พอลิเมอร์ของโซ่หลัก ทำให้ไม่สามารถจัดเรียงโซ่พอลิเมอร์ให้ชิดกันได้มาก จึงมีความหนาแน่นและจุดหลอมเหลวต่ำยืดหยุ่นได้ ความเหนียวต่ำ โครงสร้างเปลี่ยนรูปได้ง่ายเมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้น ตัวอย่าง พอลิเอทิลีนชนิดความหนาแน่นต่ำ ดังภาพ

ภาพที่ 2.5.5 พอลิเมอร์แบบกิ่ง

(ที่มา: http://www.scimath.org/lesson-chemistry/item/7089-polymer)

3. พอลิเมอร์แบบร่างแห (Croos -linking polymer) เป็น พอลิเมอร์ที่เกิดจากมอนอเมอร์ต่อเชื่อมกันเป็นร่างแห พอลิเมอร์ชนิดนี้มีความแข็งแกร่ง และเปราะหักง่าย ตัวอย่างเบกาไลต์ เมลามีนใช้ทำถ้วยชาม ดังภาพ

ภาพที่ 2.5.6 พอลิเมอร์แบบร่างแห

(ที่มา: http://www.scimath.org/lesson-chemistry/item/7089-polymer)

หมายเหตุ พอลิเมอร์บางชนิดเป็นพอลิเมอร์ที่เกิดจากสารอนินทรีย์ เช่น ฟอสฟาซีน ซิลิโคน

พลาสติก

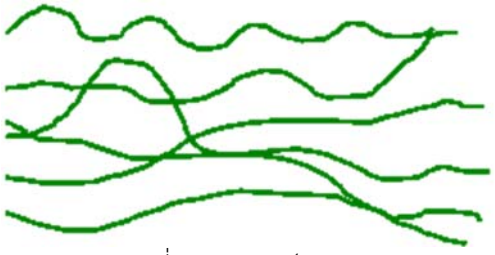
พลาสติก (Plastic) คือ สารที่สามารถทำให้เป็นรูปต่าง ๆ ได้ด้วยความร้อน พลาสติกเป็นพอลิเมอร์ ขนาดใหญ่ มวลโมเลกุลมาก

<u>สมบัติทั่วไปของพลาสติก</u>

- มีความเสถียรมากในธรรมชาติ สลายตัวยาก มีมวลน้อย และเบา
- เป็นฉนวนความร้อนและไฟฟ้าที่ดี
- ส่วนมากอ่อนตัวและหลอมเหลวเมื่อได้รับความร้อน จึงเปลี่ยนเป็นรูปต่างๆ ได้ตามประสงค์

<u>ประเภทของพลาสติก</u>

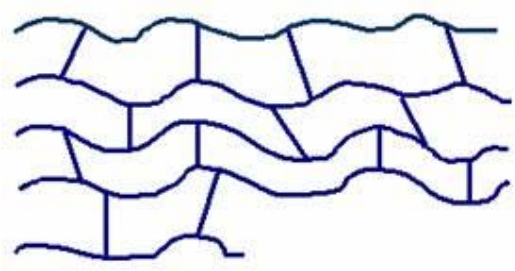
1. เทอร์มอพลาสติก เมื่อได้รับความร้อนจะอ่อนตัว และเมื่อเย็นลงจะแข็งตัว สามารถเปลี่ยนรูปได้ พลาสติกประเภทนี้โครงสร้างโมเลกุลเป็นโซ่ตรงยาว มีการเชื่อมต่อระหว่างโซ่พอลิเมอร์น้อยมาก จึงสามารถหลอมเหลว หรือเมื่อผ่านการอัดแรงมากจะไม่ทำลายโครงสร้างเดิม เช่น พอลิเอทิลีน พอลิโพรพิลีน พอลิสไตรีน



ภาพที่ 2.5.7 เทอร์มอพลาสติก

(ที่มา: http://www.scimath.org/lesson-chemistry/item/7089-polymer)

2. พลาสติกเทอร์มอเซต จะคงรูปหลังการผ่านความร้อนหรือแรงดันเพียงครั้งเดียว เมื่อเย็นลงจะแข็งมาก ทนความร้อนและความดัน ไม่อ่อนตัวและเปลี่ยนรูปร่างไม่ได้ แต่ถ้าอุณหภูมิสูงก็จะแตกและไหม้เป็นขี้เถ้าสีดำ พลาสติกประเภทนี้โมเลกุลจะเชื่อมโยงกันเป็นร่างแหจับกันแน่น แรงยึดเหนี่ยวระหว่างโมเลกุลแข็งแรงมาก จึงไม่สามารถนำมาหลอมเหลวได้ เช่น เมลามีน พอลิยูรีเทน



ภาพที่ 2.5.8 พลาสติกเทอร์มอเซต

(ที่มา: http://www.scimath.org/lesson-chemistry/item/7089-polymer)

ตารางที่ 2.5.1 แสดงสมบัติบางประการของพลาสติกบาง

ชนิดของพลาสติก	ประเภทของพลาสติก	สมบัติบางประการ		ตัวอย่างการนำไปใช้ประโยชน์
		สภาพการไหม้ไฟ	ข้อสังเกตอื่น	
พอลิเอทิลีน	เทอร์มอพลาสติก	เปลวไฟสีน้ำเงินขอบเหลือง กลิ่นเหมือนพาราฟิน เปลวไฟไม่ดับเอง	เล็บขีดเป็นรอย ไม่ละลายในสารละลายทั่วไป ลอยน้ำ	ถุง ภาชนะ ฟิล์มถ่ายภาพ ของเล่นเด็ก ดอกไม้พลาสติก
พอลิโพรพิลีน	เทอร์มอพลาสติก	เปลวไฟสีน้ำเงินขอบเหลือง ควันขาว กลิ่นเหมือนพาราฟิน	ขีดด้วยเล็บไม่เป็นรอย ไม่แตก	โต๊ะ เก้าอี้ เชือก พรม บรรจุภัณฑ์อาหาร ชิ้นส่วนรถยนต์
พอลิสไตรีน	เทอร์มอพลาสติก	เปลวไฟสีเหลืองเขม่ามาก กลิ่นเหมือนก๊าซจุดตะเกียง	เปราะ ละลายได้ในคาร์บอนเตตระคลอไรด์ และโทลูอีน ลอยน้ำ	โฟม อุปกรณ์ไฟฟ้า เลนส์ ของเล่นเด็ก อุปกรณ์กีฬา เครื่องมือสื่อสาร
พอลิวินิลคลอไรด์	เทอร์มอพลาสติก	ติดไฟยาก เปลวสีเหลืองขอบเขียว ควันขาว กลิ่นกรดเกลือ	อ่อนตัวได้คล้ายยาง ลอยน้ำ	กระดาษติดผนัง ภาชนะบรรจุสารเคมี รองเท้า กระเบื้องปูพื้น ฉนวนหุ้มสายไฟ ท่อพีวีซี
ไนลอน	เทอร์มอพลาสติก	เปลวไฟสีน้ำเงินขอบเหลือง กลิ่นคล้ายเขาสัตว์ติดไฟ	เหนียว ยืดหยุ่น ไม่แตก จมน้ำ	เครื่องนุ่งห่ม ถุงน่องสตรี พรม อวน แห

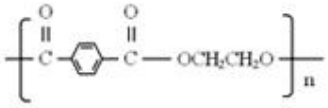
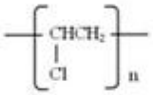
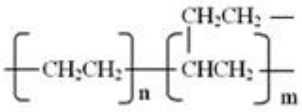
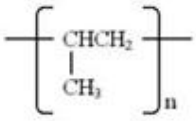
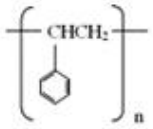
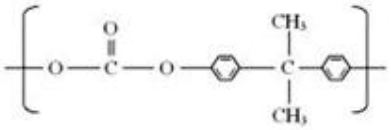
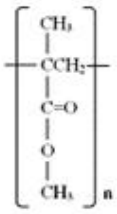
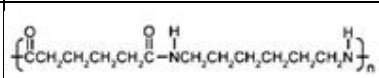
ชนิดของพลาสติก	ประเภทของพลาสติก	สมบัติบางประการ		ตัวอย่างการนำไปใช้ประโยชน์
		สภาพการไหม้ไฟ	ข้อสังเกตอื่น	
พอลิยูเรียฟอร์มาลดีไฮด์	พลาสติกเทอร์มอเซต	ติดไฟยาก เปลวสีเหลืองอ่อน ขอบฟ้าแกมเขียว กลิ่นแอมโมเนีย	แตกร้าว จมน้ำ	เต้าเสียบไฟฟ้า วัสดุเชิงวิศวกรรม
อีพอกซี	พลาสติกเทอร์มอเซต	ติดไฟง่าย เปลวสีเหลือง ควันดำ กลิ่นคล้ายข้าวคั่ว	ไม่ละลายในสารไฮโดรคาร์บอนและน้ำ	กาว สี สารเคลือบผิวหน้าวัตถุ
พอลิเอสเทอร์	เทอร์มอพลาสติก	ติดไฟยาก เปลวสีเหลือง ควันกลิ่นฉุน	อ่อนตัว ยืดหยุ่น	เส้นใยผ้า
	พลาสติกเทอร์มอเซต	ติดไฟยาก เปลวสีเหลือง ควันดำ กลิ่นฉุน	เปราะ หรือแข็งเหนียว	ตัวถังรถยนต์ ตัวถังเรือ ใช้บุภายในเครื่องบิน

พลาสติกรีไซเคิล (Plastic recycle)

ปัจจุบันเราใช้พลาสติกฟุ่มเฟือยมาก แต่ละปีประเทศไทยมีขยะพลาสติกจำนวนมาก ซึ่งเป็นปัญหาด้านสิ่งแวดล้อมของโลก จึงมีความพยายามคิดค้นทำพลาสติกที่ย่อยสลายทางชีวภาพ (Biodedradable) มาใช้แทน แต่พลาสติกบางชนิดก็ยังไม่สามารถย่อยสลายทางชีวภาพได้ ในทางปฏิบัติยังคงกำจัดขยะพลาสติกด้วยวิธีฝังกลบใต้ดิน และเผา ซึ่งก่อให้เกิดปัญหาด้านสิ่งแวดล้อมตามมา วิธีที่ดีที่สุดในการดูแลสิ่งแวดล้อมเกี่ยวกับขยะพลาสติก คือ ลดปริมาณการใช้ให้เหลือเท่าที่จำเป็น และมีการนำพลาสติกบางชนิดกลับไปผ่านบางขั้นตอนในการผลิต แล้วนำกลับมาใช้งานใหม่ได้ตามเดิม

สมาคมอุตสาหกรรมพลาสติก ประเทศสหรัฐอเมริกา (The Society of Plastics Industry ; SPI) ได้กำหนดสัญลักษณ์เพื่อบ่งชี้ประเภทของพลาสติกรีไซเคิล ซึ่งจะกำกับไว้ในผลิตภัณฑ์สินค้าที่ทำด้วยพลาสติก ดังภาพในตาราง

ตารางที่ 2.5.2 แสดงสัญลักษณ์เพื่อบ่งชี้ประเภทของพลาสติกรีไซเคิล

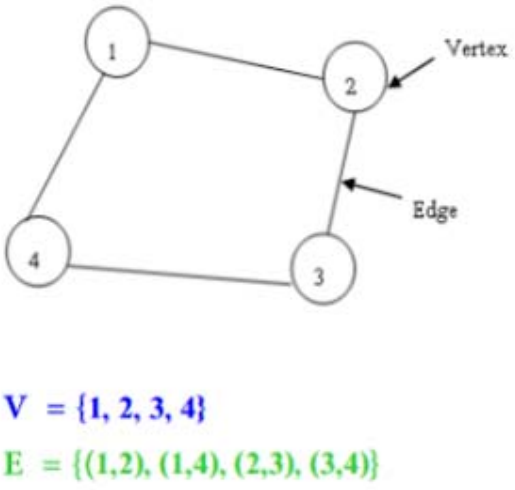
ประเภทของพลาสติก	ชื่อย่อ	สัญลักษณ์	มอนอเมอร์	การนำไปใช้งาน
Polyethylene Terephthalate	PETE	1 PETE		
High Density Polyethylene	HDPE	2 HDPE		
Polyvinyl Chloride (PVC)	V	3 V		
Low Lensity Polyethylene	LDPE	4 LDPE		
Polypropylene	PP	5 PP		
Polystyrene	PS	6 PS		
Polycarbonate	PC	7 OTHER		
Polymethyl-Methacrylate	PMMA	7 OTHER		
Nylon-66	N-66	7 OTHER		

2.6 กราฟ

กราฟเป็นโครงสร้างข้อมูลที่มีการนำไปใช้ในงานที่เกี่ยวข้องกับการแก้ปัญหาที่ค่อนข้างซับซ้อน เช่น วางข่ายงานคอมพิวเตอร์วิเคราะห์เส้นทางวิกฤติ และปัญหาเส้นทางที่สั้นที่สุด เป็นต้น

นิยามกราฟ

- กราฟเป็นโครงสร้างที่นำมาใช้เพื่อแสดงความสัมพันธ์ระหว่างวัตถุ โดยแทนวัตถุด้วยเวอร์เท็กซ์ (Vertex) หรือโหนด (Node) และเชื่อมโยงความสัมพันธ์ด้วยเอดจ์ (Edge)
- เขียนในรูปของลักษณ์ได้เป็น G = (V, E)
- V(G) คือ เซตของเวอร์เท็กซ์ ซึ่งมีจำนวนจำกัด
- E(G) คือ เซตของเอดจ์ ซึ่งเขียนด้วยคู่ของเวอร์เท็กซ์



ภาพที่ 2.6.1 องค์ประกอบโครงสร้างข้อมูลแบบกราฟ
(ที่มา: https://patorrada.blogspot.com/2017/04/graph.html)

ศัพท์ที่เกี่ยวข้อง

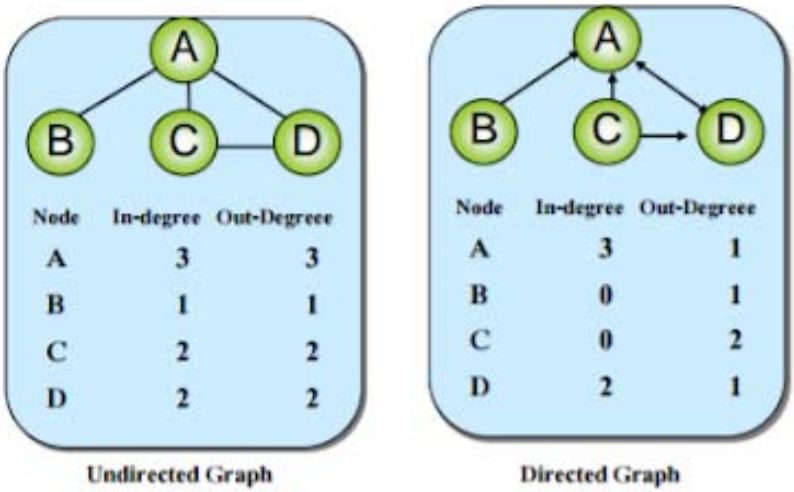
1. เวอร์เท็กซ์ (Vertex) หมายถึง โหนด
2. เอดจ์ (Edge) หมายถึง เส้นเชื่อมของโหนด
3. ดีกรี (Degree) หมายถึง จำนวนเส้นเข้าและเส้นออกของโหนดแต่ละโหนด
4. แอดจาเซนท์โหนด (Adjacent Node) หมายถึง โหนดที่มีการเชื่อมโยงกัน

ชนิดของกราฟ

1. กราฟแบบไม่มีทิศทาง (Undirected Graph) คือ กราฟที่เส้นเชื่อมไม่มีลูกศรกำกับทิศทางที่มีความสัมพันธ์ของ 2 โหนดแบบไปและกลับ
2. กราฟแบบมีทิศทาง (Directed Graph หรือ Digraph) คือ กราฟที่เส้นเชื่อมมีลูกศรกำกับทิศทาง เช่น อาจมีสายการบินจาก กรุงเทพ-เสียมเลียบ กัมพูชา แต่ไม่มีสายการบินจากเสียมเลียบ-กรุงเทพ หรือเอดจ์แสดงค่าโดยสารที่มีราคาไป-กลับไม่เท่ากัน หรือค่าโทรศัพท์ไทยไปสิงคโปร์แพงกว่าสิงคโปร์โทรหาไทย

อินดีกรีและเอาท์ดีกรี

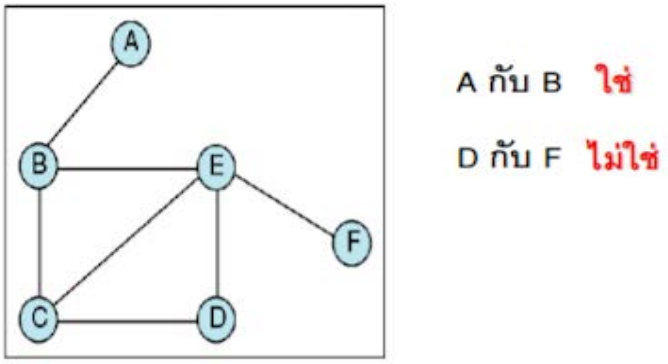
- แต่ละโหนดจะมีจำนวนเส้นเชื่อมระหว่างโหนดไม่เท่ากัน
- อินดีกรี (In-Degree) แสดงจำนวนเส้นเชื่อมที่เข้ามายังโหนดนั้น ๆ
- เอาท์ดีกรี (Out-Degree) แสดงจำนวนเส้นที่ออกจากโหนดนั้นไป
- ในกราฟแบบไม่มีทิศทางจำนวนของอินดีกรีจะเท่ากับจำนวนของเอาท์ดีกรี



ภาพที่ 2.6.2 แสดงตัวอย่างการหาอินดีกรีและเอาท์ดีกรีของกราฟทั้ง 2 ชนิด
(ที่มา: https://patorrada.blogspot.com/2017/04/graph.html)

ตัวอย่างโครงสร้างข้อมูลแบบกราฟ

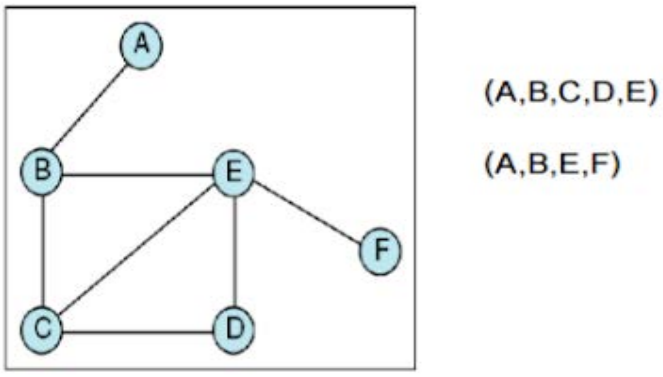
1. แอดจาเซนท์โหนด (Adjacent Node) คือ โหนดที่มีการเชื่อมโยงกัน



ภาพที่ 2.6.3 แสดงตัวอย่างแอดจาเซนท์โหนด

(ที่มา: https://patorrada.blogspot.com/2017/04/graph.html)

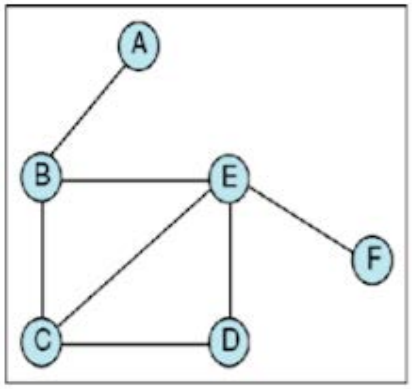
2. เส้นทาง (Path) คือ การเรียกลำดับของเวอร์เท็กซ์ที่เชื่อมต่อกันจากจุดหนึ่งไปยังอีกจุดหนึ่ง



ภาพที่ 2.6.4 แสดงตัวอย่างเส้นทาง

(ที่มา: https://patorrada.blogspot.com/2017/04/graph.html)

3. ไซเคิล (Cycle) คือ เส้นทางที่ประกอบด้วยเวอร์เท็กซ์อย่างน้อย 3 จุด และต้องมีจุดเริ่มต้นและสิ้นสุด



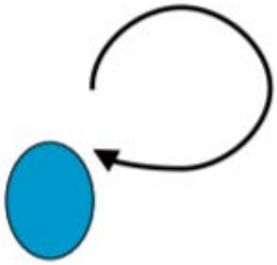
(B,C,E,B)

(B,C,D,E,B)

ภาพที่ 2.6.5 แสดงตัวอย่างไซเคิล

(ที่มา: https://patorrada.blogspot.com/2017/04/graph.html)

4. ลูป (Loop) : มีเพียงเอดจ์เดียว และมีจุดเริ่มต้นและสิ้นสุดจุดเดียวกัน



ภาพที่ 2.6.6 แสดงตัวอย่างลูป

(ที่มา: https://patorrada.blogspot.com/2017/04/graph.html)

การแทนที่กราฟในหน่วยความจำจะสามารถทำได้ใน 2 แบบคือ

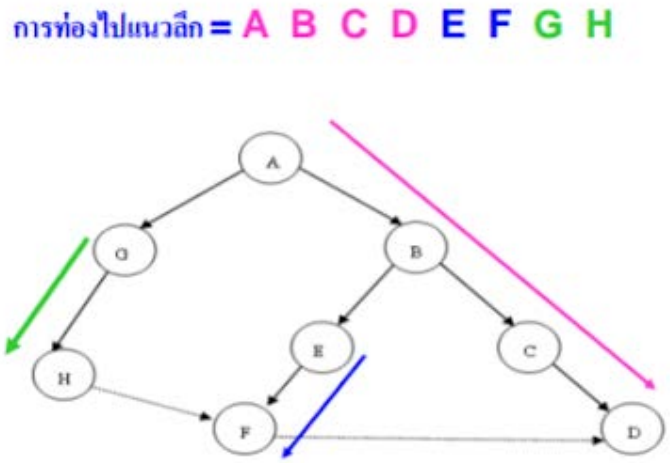
1. Adjacency Matrix ใช้อาร์เรย์เก็บข้อมูล
2. Adjacency List ใช้ลิงค์ลิสต์เก็บข้อมูล

วิธีการท่องไปในกราฟ (Graph Traversal)

การท่องไปในกราฟ คือ แต่ละโหนดจะถูกเยือนเพียงครั้งเดียว ดังนั้นจึงต้องมีค่าที่บอกว่าโหนดใด ได้ถูกเยือนไปแล้ว และเทคนิคในการท่องไปในกราฟ มี 2 แบบ คือ

1. การท่องแบบลึก (Depth-First Traversal)

เป็นการทำงานคล้ายกับการท่องทรี โดยกำหนดเริ่มต้นที่โหนดแรกและเยือนโหนดถัดไปตามแนววิธีนั้นจนกระทั่งนำไปสู่ปลายวิธีนั้น จากนั้นย้อนกลับ (Backtrack) ตามแนววิธีเดิมนั้น จนกระทั่งสามารถดำเนินต่อเนื่องเข้าสู่แนววิธีอื่น ๆ เพื่อเยือนโหนดอื่น ๆ ต่อไปจนครบทุกโหนด

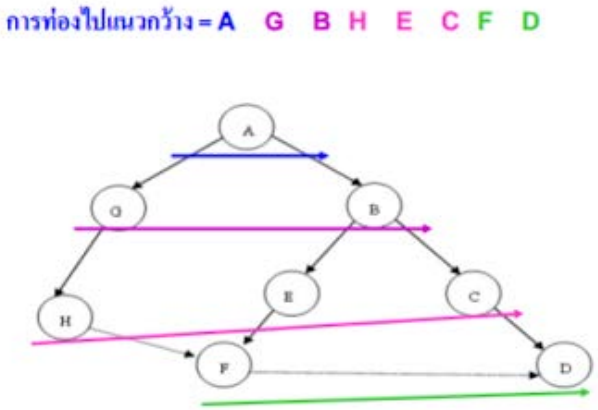


ภาพที่ 2.6.7 แสดงตัวอย่างการท่องแบบลึก

(ที่มา: https://patorrada.blogspot.com/2017/04/graph.html)

2. การท่องแบบกว้าง (Breadth-First Traversal)

เป็นวิธีที่ทำโดยเลือกโหนดที่เป็นจุดเริ่มต้น ต่อมาให้เยือนโหนดอื่นที่อยู่ใกล้กันกับโหนดเริ่มต้นทีละระดับจนกระทั่งเยือนหมดทุกโหนดในกราฟ การท่องกราฟแบบนี้จะต้องใช้หน่วยความจำจำเป็นจำนวนมากในการเก็บข้อมูลในแต่ละระดับ ทำให้ไม่เหมาะกับกราฟที่มีจำนวนเส้นเชื่อมในแต่ละเวอร์เท็กซ์เป็นจำนวนมาก



ภาพที่ 2.6.8 แสดงตัวอย่างการท่องแบบกว้าง

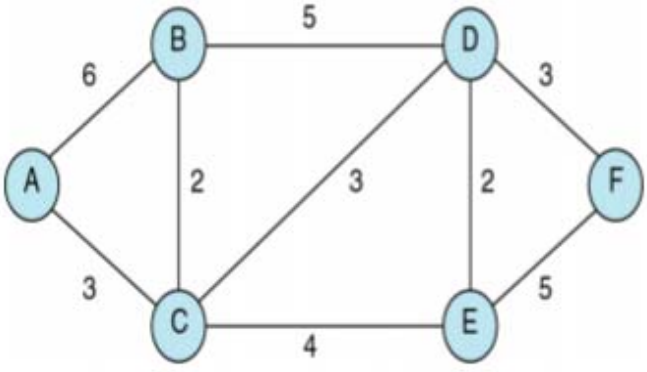
(ที่มา: https://patorrada.blogspot.com/2017/04/graph.html)

Shortest Path

Shortest Path หมายถึง เส้นทางที่สั้นที่สุดระหว่าง 2 เวอร์เท็กซ์

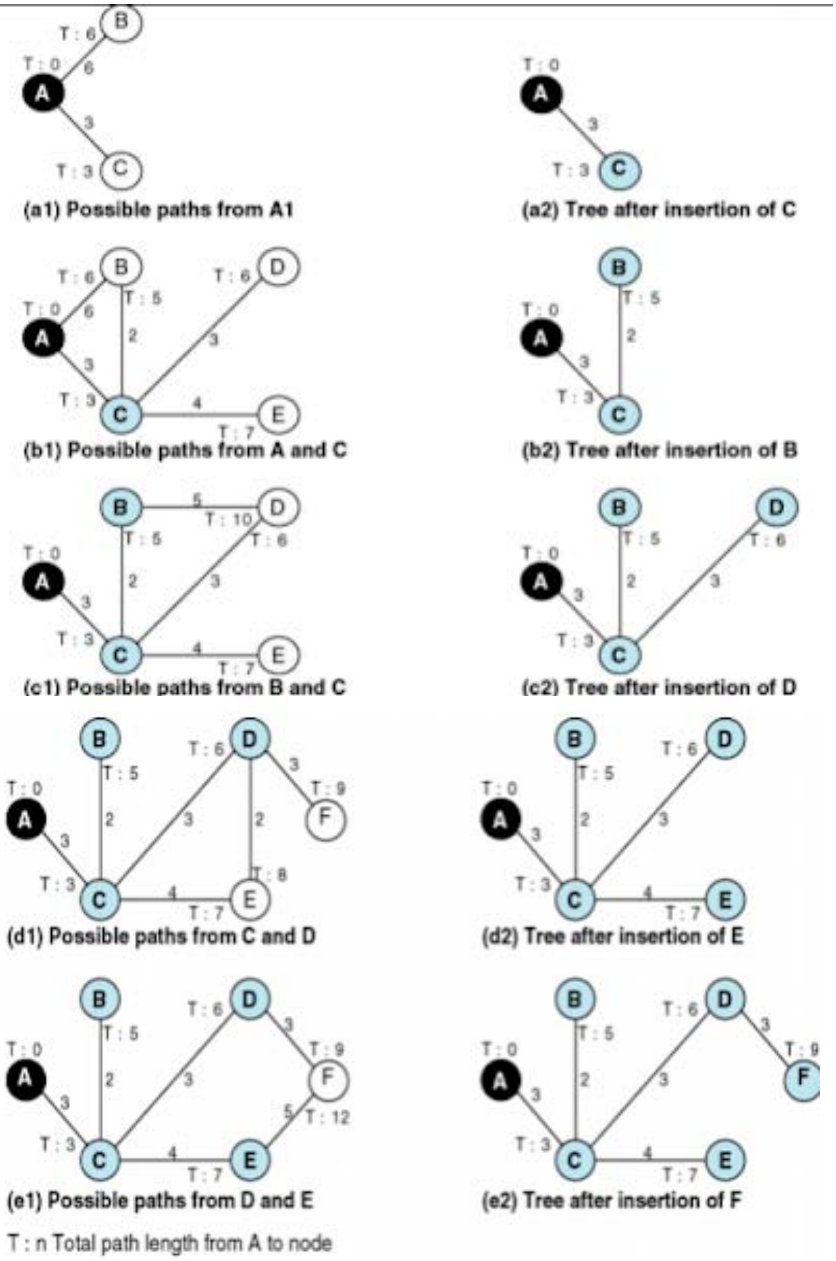
<u>วิธีการทำ</u>

1. ใส่เวอร์เท็กซ์เริ่มต้นในทรี
2. เลือกเอดจ์จากเวอร์เท็กซ์ในทรีไปยังเวอร์เท็กซ์ที่ไม่อยู่ในทรีและมีผลรวมของน้ำหนักต่ำที่สุด
3. ทำซ้ำข้อ 2 จนกว่าจะครบทุกเวอร์เท็กซ์



ภาพที่ 2.6.9 แสดงตัวอย่างกราฟที่จะนำไปหาเส้นทางที่สั้นที่สุด

(ที่มา: https://patorrada.blogspot.com/2017/04/graph.html)



ภาพที่ 2.6.10 แสดงตัวอย่างการหาเส้นทางที่สั้นที่สุด

(ที่มา: https://patorrada.blogspot.com/2017/04/graph.html)

บทที่ 3
วิธีการดำเนินงาน

ในบทนี้จะกล่าวถึงวิธีการดำเนินงานของโครงงาน เรื่อง การประยุกต์ใช้กราฟอัลกอริทึมกับกราฟทางเคมี ในขั้นตอนต่างๆ

3.1 บทนำ

จากการศึกษางานวิจัย เรื่อง Comparison and Enumeration of Chemical Graphs และการศึกษาหาข้อมูลเกี่ยวกับคุณสมบัติของธาตุ โครงสร้างเคมี กราฟ และกราฟอัลกอริทึม พบว่าโครงสร้างทางเคมีมีลักษณะเหมือนกราฟทางคณิตศาสตร์ จึงสนใจที่จะจัดทำโปรแกรมที่นำความรู้ทางกราฟอัลกอริทึมมาประยุกต์ใช้กับกราฟทางเคมี

3.2 แผนการดำเนินงาน

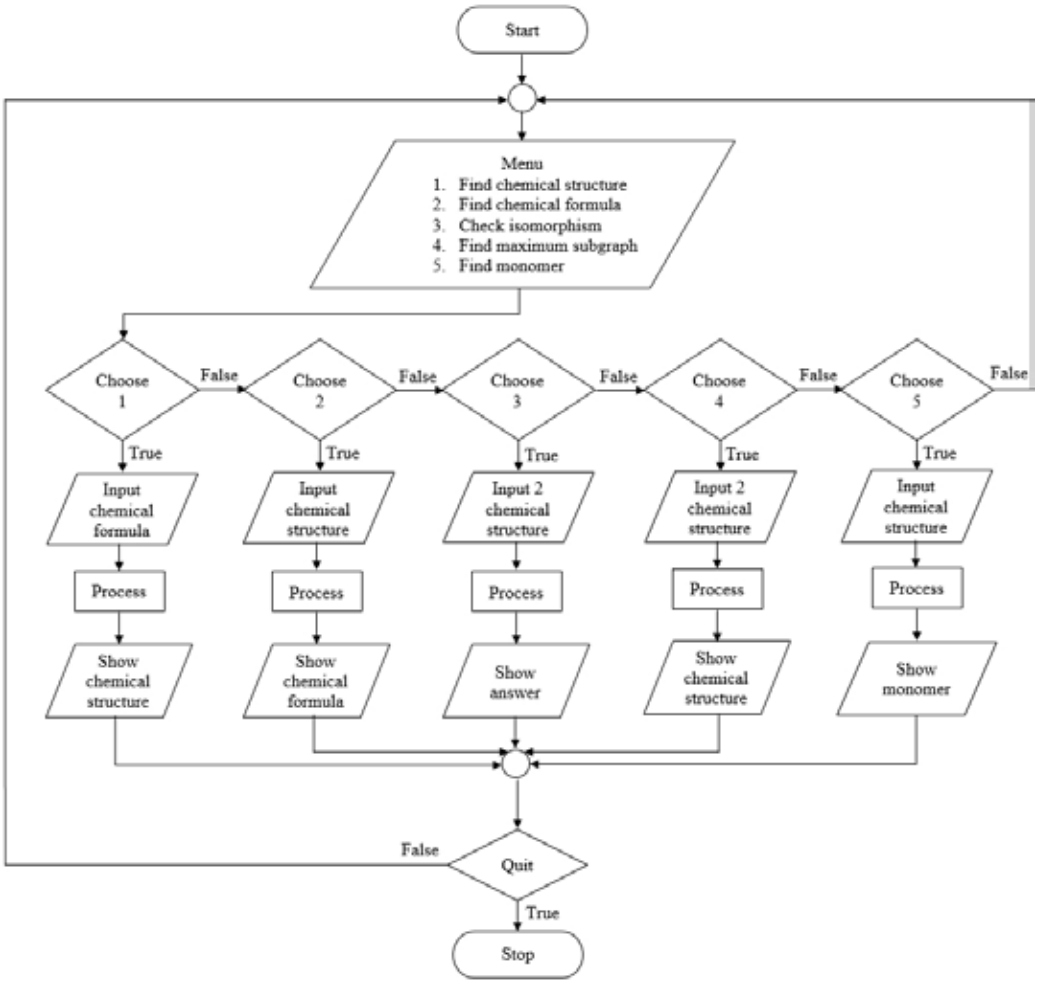
การดำเนินการวิจัยได้มีการกำหนดแผนการวิจัยเบื้องต้นดังนี้

1. ศึกษางานวิจัยที่เกี่ยวข้อง
2. กำหนดหัวข้อและจำกัดขอบเขตของโครงงาน
3. วางแผนการดำเนินงาน
4. จัดทำโปรแกรม
5. สรุปผลการดำเนินงาน
6. จัดทำรูปเล่มโครงงาน
7. นำเสนอโครงงาน

ตารางที่ 3.2.1 แสดงระยะเวลาในการดำเนินงาน

ขั้นตอนการดำเนินงาน	เดือน / ปี พ.ศ.2561					เดือน / ปี พ.ศ.2562			
	ส.ค.	ก.ย.	ต.ค.	พ.ย.	ธ.ค.	ม.ค.	ก.พ.	มี.ค.	เม.ย.
1. ศึกษางานวิจัยที่เกี่ยวข้อง									
2. กำหนดหัวข้อและจำกัดขอบเขต									
3. วางแผนการดำเนินงาน									
4. จัดทำโปรแกรม									
5. สรุปผลการดำเนินงาน									
6. จัดทำรูปเล่มโครงงาน									
7. นำเสนอโครงงาน									

3.3 แผนงานของโปรแกรม



ภาพที่ 3.3.1 แสดงแผนงานของโปรแกรม

บทที่ 4
ผลการดำเนินงาน

ในบทนี้จะกล่าวถึง ผลของการดำเนินงานของโครงงาน เรื่อง การประยุกต์ใช้กราฟอัลกอริทึมกับกราฟทางเคมี ซึ่งประกอบด้วย การหาโครงสร้างทางเคมีจากสูตรเคมี การหาสูตรเคมีจากโครงสร้างเคมี การตรวจสอบไอโซมอร์ฟิซึมของโครงสร้างทางเคมี 2 โครงสร้าง หาสับกราฟที่ใหญ่ที่สุดของโครงสร้างทางเคมี 2 โครงสร้าง และการหามอนอเมอร์ของโครงสร้างทางเคมีของพอลิเมอร์

4.1 ลักษณะไฟล์ที่ใช้ได้

ไฟล์ *.txt

บรรทัดแรก จะมีจำนวนเต็มบวก n, m

โดย n จะแทนจำนวนอะตอมภายในโมเลกุล

m จะแทนจำนวนพันธะภายในโมเลกุล

n บรรทัดถัดมา จะแสดงตัวย่อของธาตุตามลำดับ

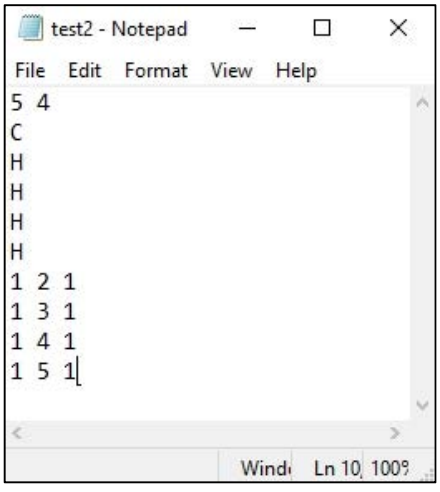
m บรรทัดถัดมา จะแสดงจำนวนเต็มบวก i, j, k

โดย i จะแทนจุดยอดต้นทาง

j จะแทนจุดยอดปลายทาง

k จะแทนชนิดของพันธะระหว่าง i, j

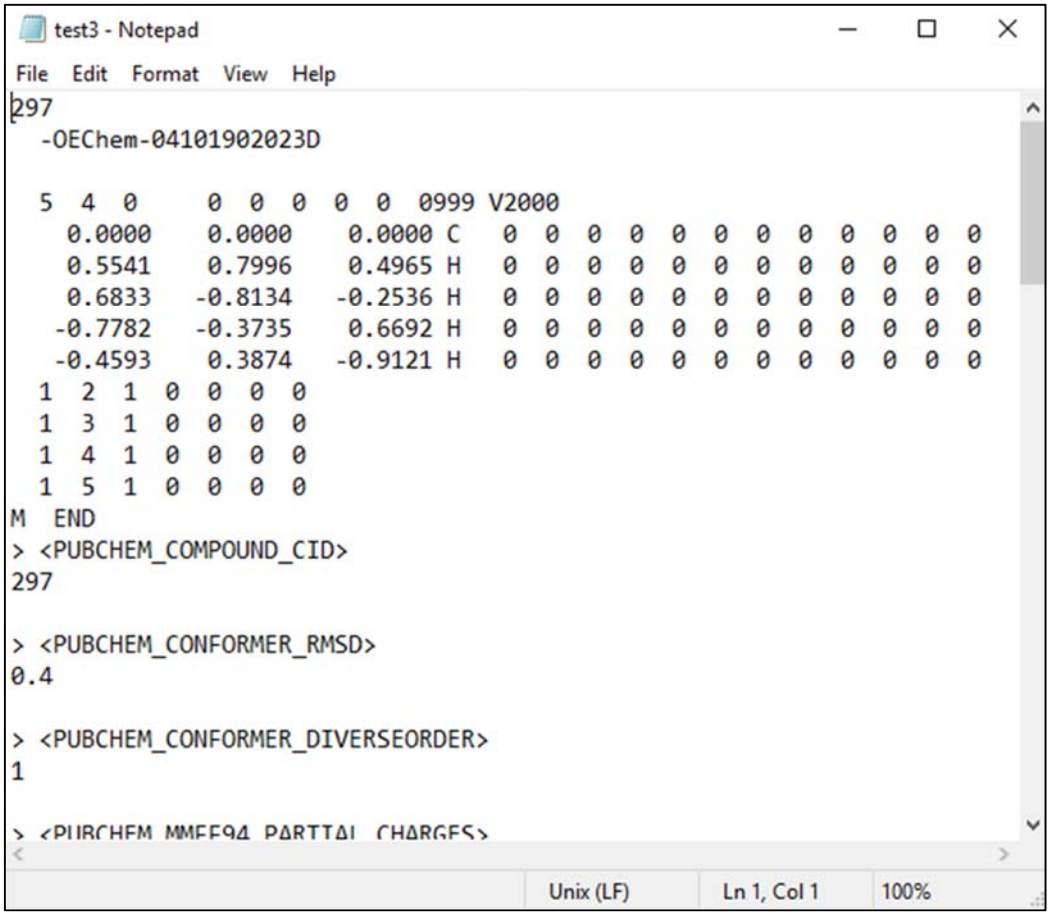
(1=พันธะเดี่ยว, 2=พันธะคู่, 3=พันธะสาม)



ภาพที่ 4.1.1 แสดงตัวอย่างไฟล์ *.txt ของ CH_4

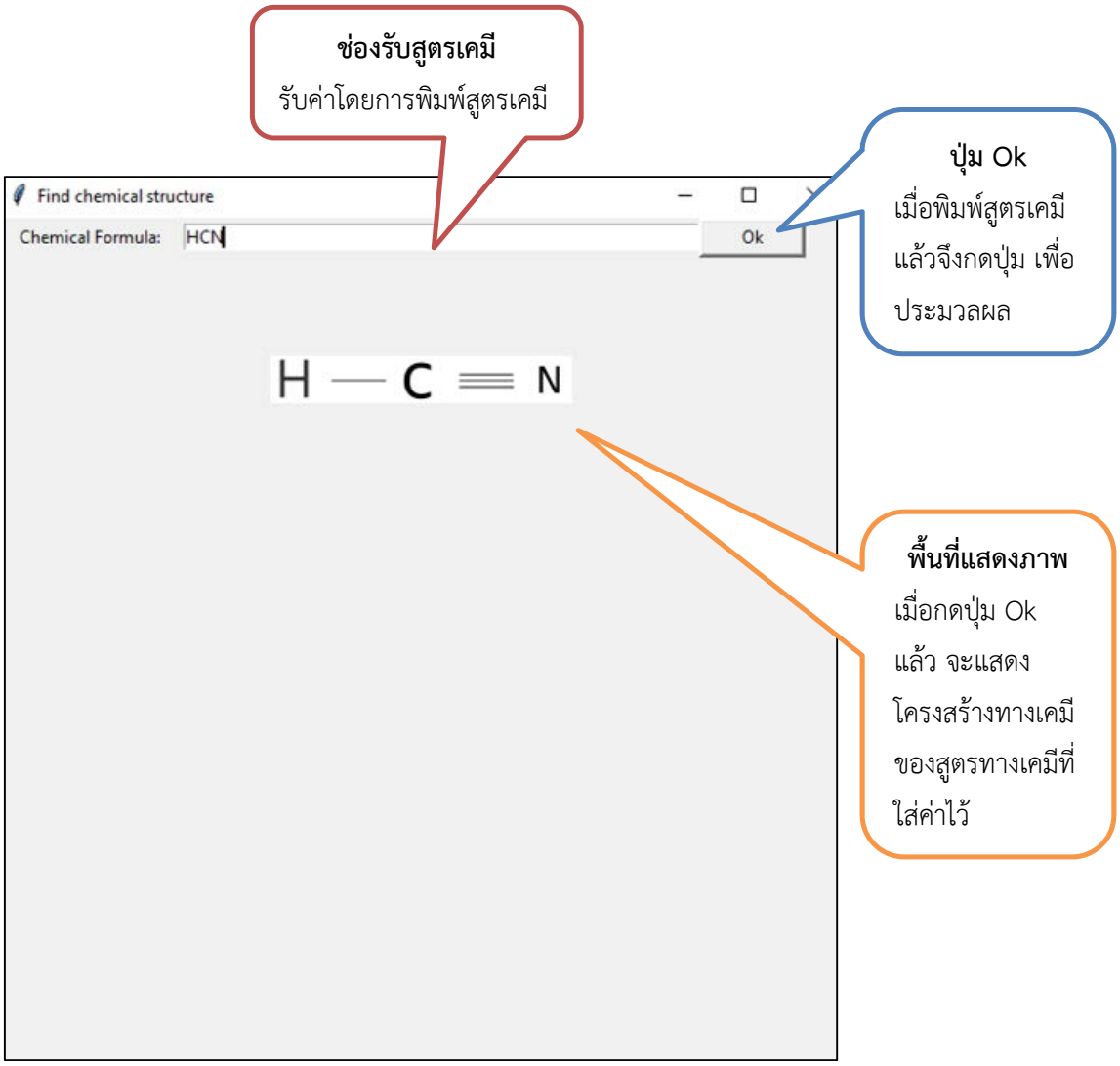
ไฟล์ *.mol

ไฟล์ *.mol เป็นไฟล์ที่ได้จากโปรแกรมที่ใช้วาดโครงสร้างทางเคมี เช่น chemdraw ซึ่งภายในไฟล์ จะประกอบไปด้วย จำนวนอะตอม จำนวนพันธะ ซอฟต์แวร์ที่ใช้สร้าง ตำแหน่งเป็นคู่อันดับของอะตอม สัญลักษณ์อะตอม พันธะ และชนิดของพันธะ



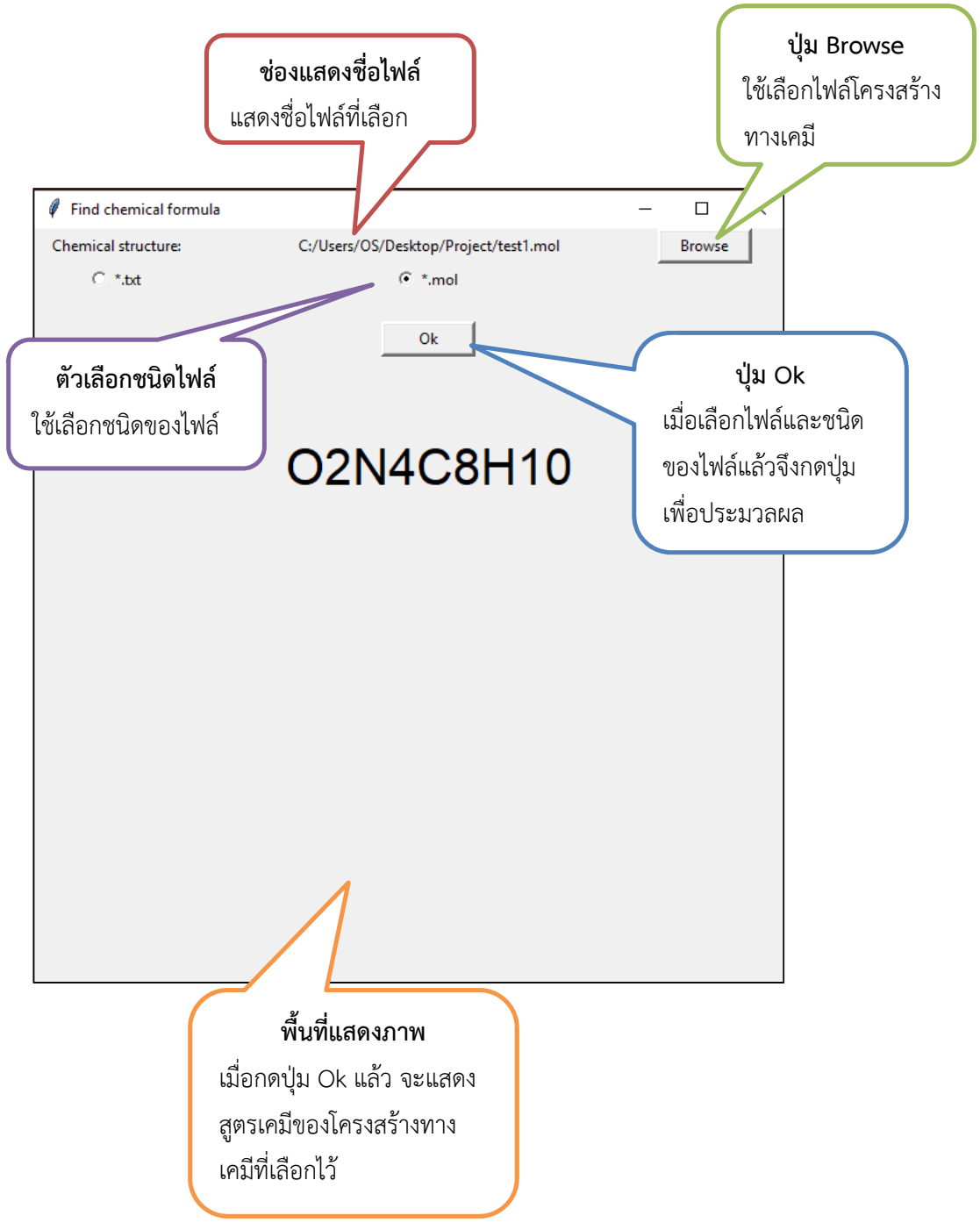
ภาพที่ 4.1.2 แสดงตัวอย่างไฟล์ *.mol ของ CH_4

4.2 การหาโครงสร้างทางเคมีจากสูตรเคมี



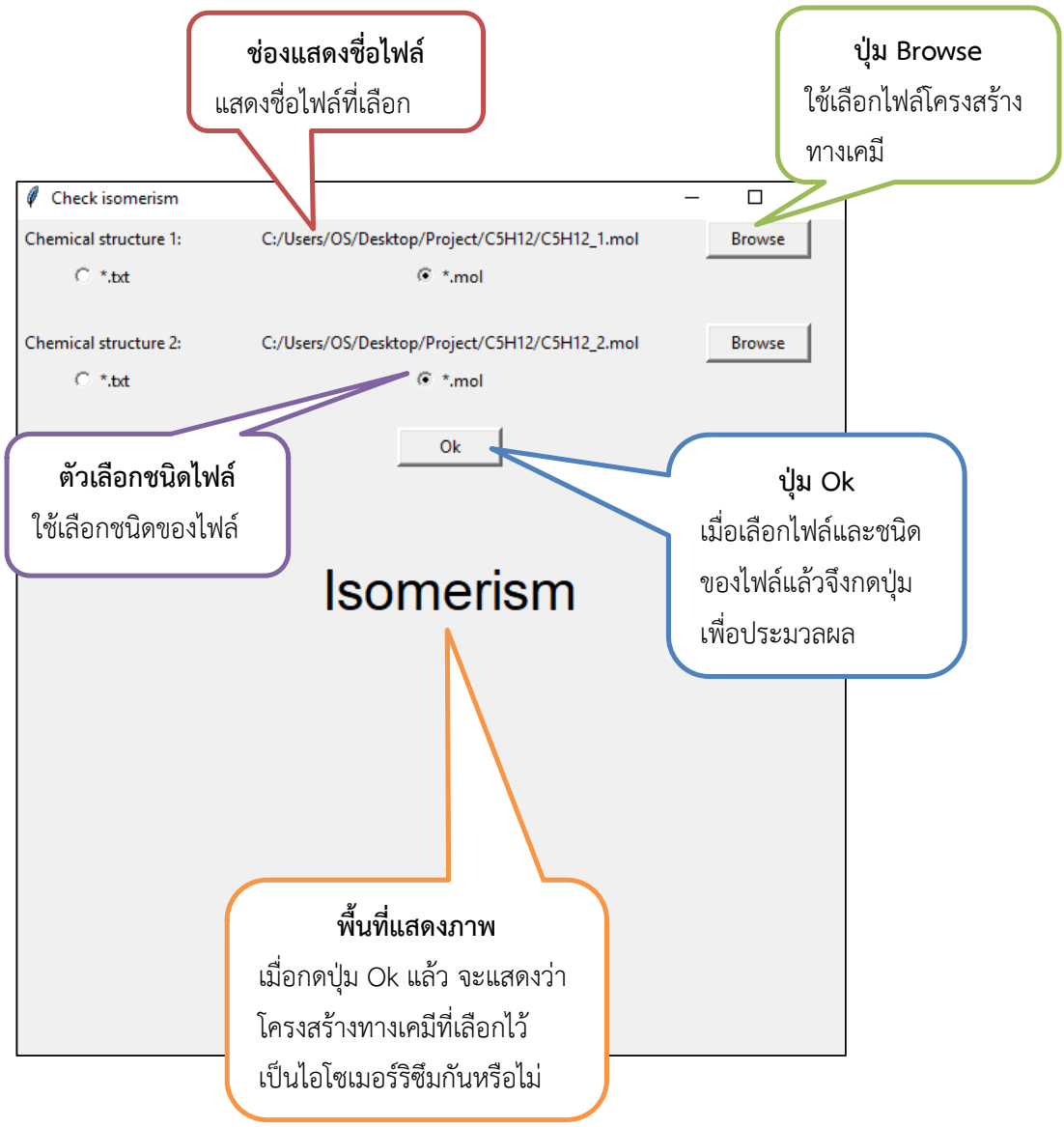
ภาพที่ 4.2.1 แสดงหน้าต่างและส่วนประกอบของโปรแกรมการหาโครงสร้างทางเคมี

4.3 การหาสูตรเคมีจากโครงสร้างทางเคมี



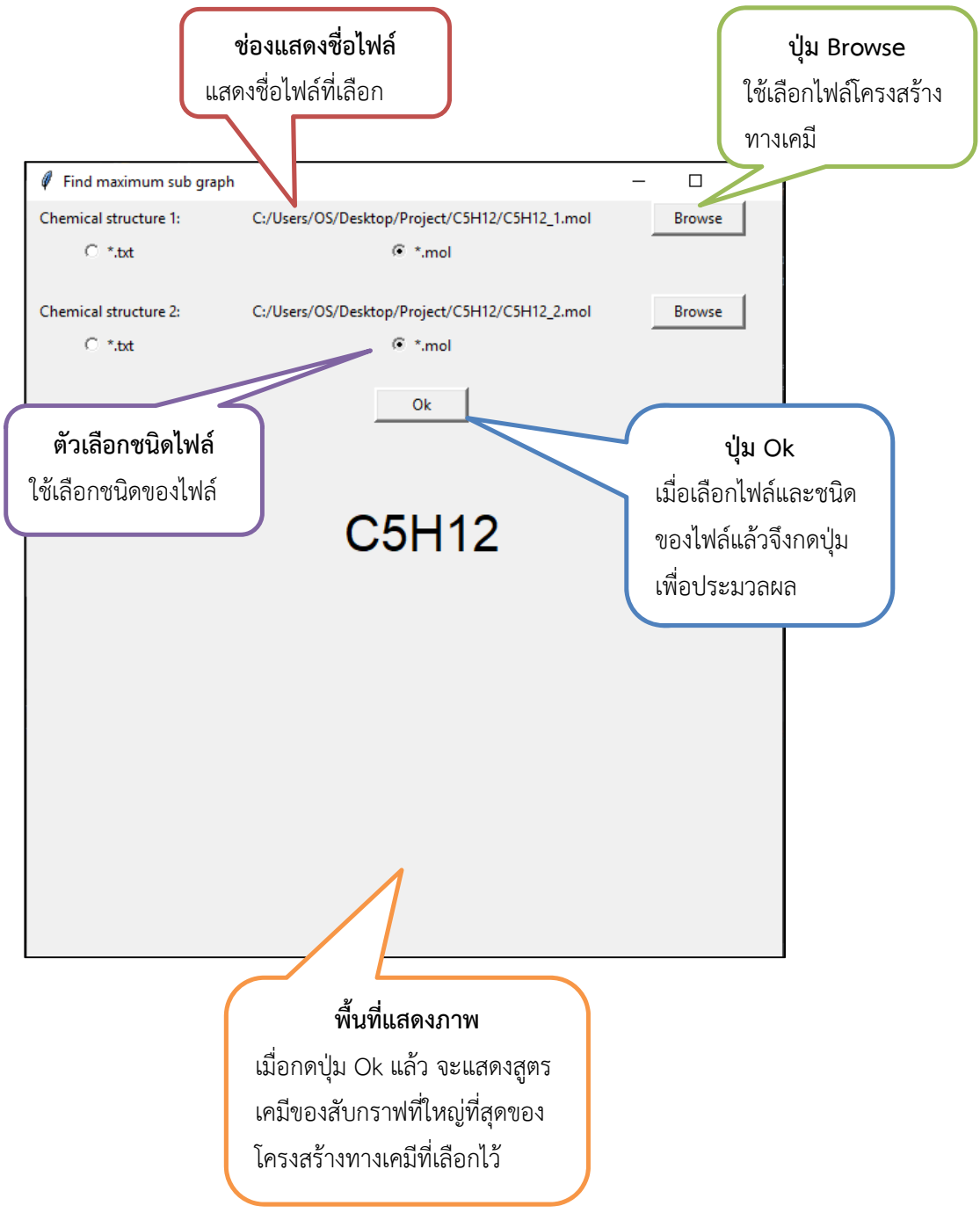
ภาพที่ 4.3.1 แสดงหน้าต่างและส่วนประกอบของโปรแกรมการหาสูตรเคมี

4.4 การตรวจสอบไอโซเมอร์ริซึมของโครงสร้างทางเคมี 2 โครงสร้าง



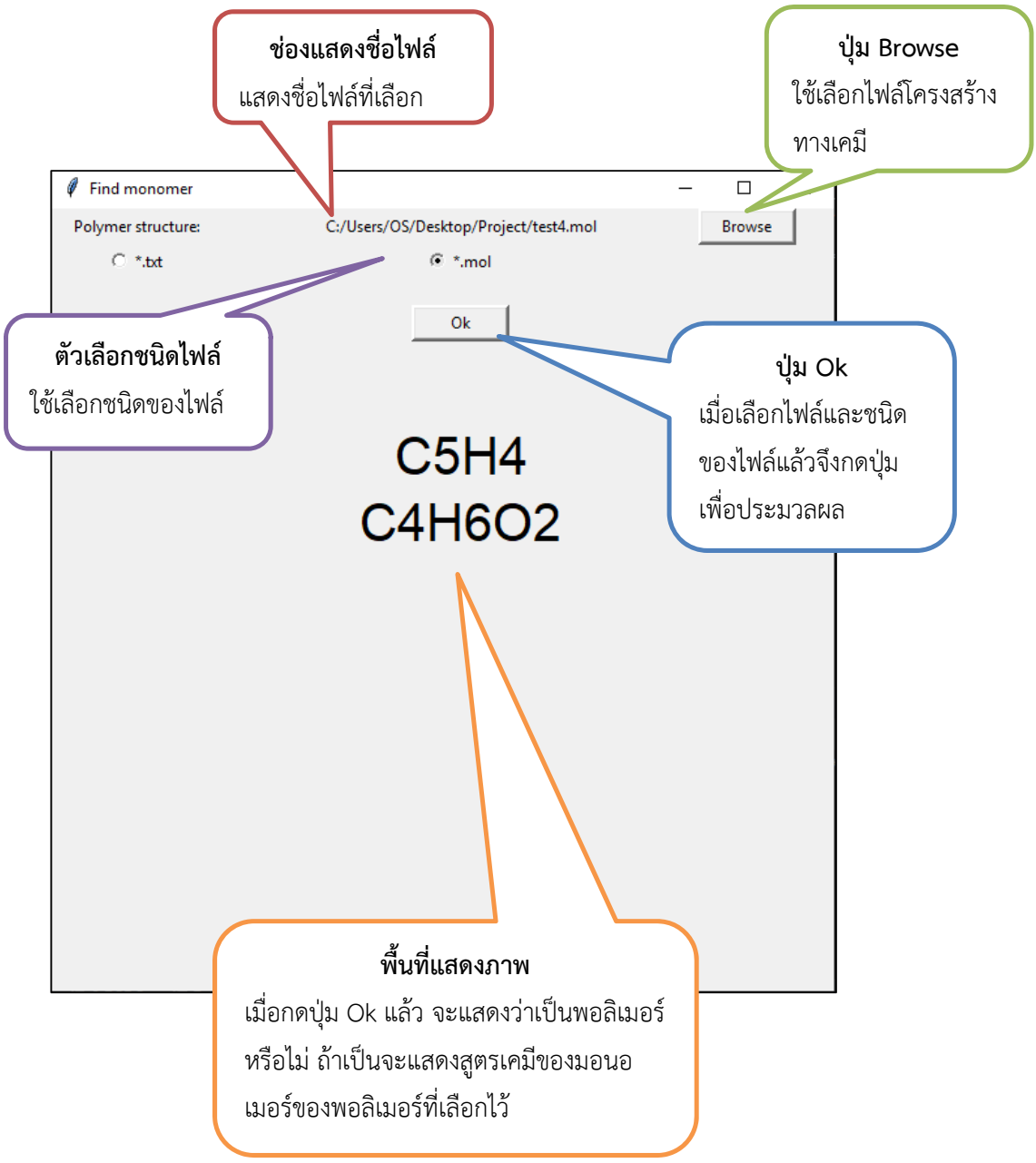
ภาพที่ 4.4.1 แสดงหน้าต่างและส่วนประกอบของโปรแกรมการตรวจสอบไอโซเมอร์ริซึม

4.5 หาสับกราฟที่ใหญ่ที่สุดของโครงสร้างทางเคมี 2 โครงสร้าง



ภาพที่ 4.5.1 แสดงหน้าต่างและส่วนประกอบของโปรแกรมการหาสับกราฟที่ใหญ่ที่สุด

4.6 การหามอนอเมอร์ของโครงสร้างทางเคมีของพอลิเมอร์



ภาพที่ 4.6.1 แสดงหน้าต่างและส่วนประกอบของโปรแกรมการหามอนอเมอร์

บทที่ 5
ข้อสรุปและข้อเสนอแนะ

ในบทนี้จะกล่าวถึง ผลสรุปจากข้อมูลผลการวิจัยในบทที่ 4 ของโครงงาน เรื่อง การประยุกต์ใช้กราฟอัลกอริทึมกับกราฟทางเคมี

5.1 ข้อสรุป

5.1.1 โปรแกรมที่จัดทำสามารถรับสูตรเคมีของธาตุในหมู่ IA-VIIIA แล้วเปลี่ยนเป็นโครงสร้างทางเคมีได้

5.1.2 โปรแกรมที่จัดทำสามารถรับโครงสร้างทางเคมีของธาตุในหมู่ IA-VIIIA ที่เป็นไฟล์ .txt หรือ .mol แล้วแสดงออกมาเป็นสูตรเคมี

5.1.3 โปรแกรมที่จัดทำสามารถรับโครงสร้างทางเคมีของธาตุในหมู่ IA-VIIIA ที่เป็นไฟล์ .txt หรือ .mol จำนวน 2 ไฟล์ แล้วแสดงออกผลลัพธ์ออกมาได้ว่าโครงสร้างทางเคมีทั้ง 2 โครงสร้างเป็นไอโซเมอร์ริซึมกันหรือไม่

5.1.4 โปรแกรมที่จัดทำสามารถรับโครงสร้างทางเคมีของธาตุในหมู่ IA-VIIIA ที่เป็นไฟล์ .txt หรือ .mol จำนวน 2 ไฟล์ แล้วแสดงสับกราฟที่ใหญ่ที่สุดของโครงสร้างทางเคมีทั้ง 2 โครงสร้าง

5.1.5 โปรแกรมที่จัดทำสามารถรับโครงสร้างทางเคมีของพอลิเมอร์ของธาตุในหมู่ IA-VIIIA ที่เป็นไฟล์ .txt หรือ .mol แล้วแสดงสูตรเคมีของมอนอเมอร์

5.2 ข้อเสนอแนะ

5.2.1 การจัดทำโปรแกรมในโครงงานนี้ จัดทำเฉพาะธาตุในหมู่ IA-VIIIA เท่านั้น ในการจัดทำโครงงานครั้งต่อไป ควรพัฒนาโปรแกรมให้สามารถใช้กับธาตุแทรนซิชันได้ด้วย

5.2.2 ควรจัดทำโปรแกรมให้สามารถใช้งานได้ง่ายขึ้น

5.2.3 ควรพัฒนาโปรแกรมให้มีความสามารถที่หลากหลายมากยิ่งขึ้น และมีประสิทธิภาพมากยิ่งขึ้น

รายการอ้างอิง

[1] ณปภัช พิมพ์ดี. ตารางธาตุ. [ออนไลน์]. 2560. แหล่งที่มา: https://www.scimath.org/lesson-chemistry/item/7171-periodic-table. [12 มกราคม 2562]

[2] ณปภัช พิมพ์ดี. ธาตุและสารประกอบ [ออนไลน์]. 2560. แหล่งที่มา: https://www.scimath.org/lesson-chemistry/item/7175-2017-06-05-13-51-33. [12 มกราคม 2562]

[3] ณปภัช พิมพ์ดี. พอลิเมอร์ [ออนไลน์]. 2560. แหล่งที่มา: http://www.scimath.org/lesson-chemistry/item/7089-polymer [6 พฤศจิกายน 2561]

[4] ณปภัช พิมพ์ดี. หมู่ฟังก์ชัน [ออนไลน์]. 2560. แหล่งที่มา: https://www.scimath.org/lesson-chemistry/item/7154-functional-groups [12 มกราคม 2562]

[5] ณปภัช พิมพ์ดี. ไอโซเมอร์ [ออนไลน์]. 2560. แหล่งที่มา: https://www.scimath.org/lesson-chemistry/item/7103-isomer [12 มกราคม 2562]

[6] เบญจมาศ ปัญญางาม. โครงสร้างข้อมูล [ออนไลน์]. 2560. แหล่งที่มา: www.cs.science.cmu.ac.th/course/204251/lib/exe/fetch.php?media=graph.pdf [12 มกราคม 2562]

[7] ผศ.ดร.พิมพ์เพ็ญ พรเฉลิมพงศ์, ศาสตราจารย์เกียรติคุณ ดร.นิธิยา รัตนาปนนท์. อัลลอยโลหะผสม [ออนไลน์]. 2561. แหล่งที่มา: http://www.foodnetworksolution.com/wiki/word/0713/alloy-อัลลอยโลหะผสม [6 พฤศจิกายน 2561]

[8] สรุปโครงสร้างข้อมูลเบื้องต้น [ออนไลน์]. 2560. แหล่งที่มา: https://patorrada.blogspot.com/2017/04/graph.html [12 มกราคม 2562]

[9] อนุสิษฐ์ เกื้อกูล. สมบัติของสารประกอบและธาตุ [ออนไลน์]. 2560. แหล่งที่มา: http://www.scimath.org/lesson-chemistry/item/7196-2017-06-09-12-37-06 [3 พฤศจิกายน 2561]

[10] อนุสิษฐ์ เกื้อกูล. สารและสมบัติของสาร [ออนไลน์]. 2560. แหล่งที่มา: https://www.scimath.org/lesson-chemistry/item/7072-2017-05-26-15-27-24 [12 มกราคม 2562]

[11] อรณิช เผือกคง. พันธะเคมี[ออนไลน์]. 2560. แหล่งที่มา: https://www.scimath.org/lesson-chemistry/item/7074-chemical-bonding [12 มกราคม 2562]

[12] Oscar Levin. Discrete Mathematics: An Open Introduction [Online]. 2013. Available from: http://discretetext.oscarlevin.com/dmoi/ch_graphtheory.html. [2018, October 21]

[13] Tatsuya Akutsu, Hiroshi Nagamochi, Comparison and Enumeration of Chemical Graphs, *Computational and Structural Biotechnology Journal*, Vol. 5, Issue 6, 2013.

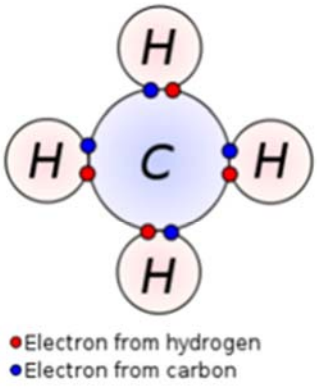
ภาคผนวก

ภาคผนวก ก
แบบเสนอหัวข้อโครงงาน รายวิชา 2301399 Project Proposal
ปีการศึกษา 2561

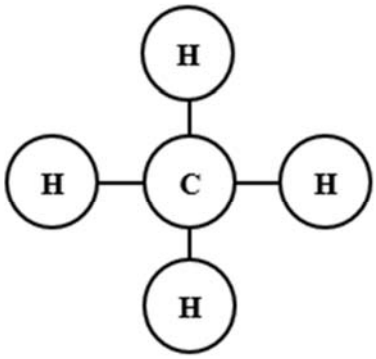
ชื่อโครงงาน (ภาษาไทย)	การประยุกต์ใช้กราฟอัลกอริทึมสำหรับกราฟทางเคมี
ชื่อโครงงาน (ภาษาอังกฤษ)	Applications of graph algorithms for chemical graph
อาจารย์ที่ปรึกษา	อ.ดร.ทรรปณ์ ปณิธานะรักษ์
ผู้ดำเนินการ	นางสาวพิมลนาฏ สุนเทียน เลขประจำตัวนิสิต 5833536723
	สาขาวิชา คณิตศาสตร์ ภาควิชาคณิตศาสตร์และวิทยาการคอมพิวเตอร์
	คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

หลักการและเหตุผล

ในการวิเคราะห์สารเคมี มักจะนำโครงสร้างโมเลกุลมาใช้ในการวิเคราะห์คุณสมบัติต่าง ๆ ของสารเคมี [1] แต่ถ้าสารเคมีมีโครงสร้างโมเลกุลขนาดใหญ่ เช่น พอลิเมอร์ที่เป็นสารประกอบที่มีโมเลกุลขนาดใหญ่ และมีมวลโมเลกุลมากประกอบด้วยหน่วยเล็ก ๆ ของสารที่อาจจะเหมือนกันหรือต่างกันมาเชื่อมต่อกันด้วยพันธะโควาเลนต์ [2] และอัลลอยที่เป็นสารที่มีโมเลกุลขนาดใหญ่ที่เกิดจากการรวมตัวกันของสารประเภทโลหะตั้งแต่ 2 ชนิดขึ้นไป [3] จึงทำให้การวิเคราะห์สารเคมีมีความยุ่งยากและซับซ้อน



โครงสร้างโมเลกุล



กราฟแทนโครงสร้างโมเลกุล

จากภาพด้านบนจะเห็นว่าโครงสร้างโมเลกุลสามารถเขียนแทนได้ด้วยกราฟทางคณิตศาสตร์ [4] ดังนั้นเราจึงสามารถหาความสัมพันธ์ระหว่างคุณสมบัติของสารเคมีกับคุณสมบัติของกราฟที่เกิดจากการวิเคราะห์โดยการใช้กราฟอัลกอริทึม [5]

วัตถุประสงค์

เพื่อหาความสัมพันธ์ระหว่างคุณสมบัติของสารเคมีที่มีโครงสร้างโมเลกุลขนาดใหญ่ เช่น พอลิเมอร์ และอัลลอย กับคุณสมบัติของกราฟที่เกิดจากการวิเคราะห์ โดยใช้กราฟอัลกอริทึม

ขอบเขตของโครงงาน

กราฟทางเคมีที่นำมาศึกษาจะใช้โครงสร้างลิวอิสแบบเส้นที่เป็น 2 มิติ และในโครงงานนี้กราฟเคมีที่เราจะนำมาศึกษาจะเป็นกราฟเคมีของพอลิเมอร์ และอัลลอย

วิธีการดำเนินงาน

1. ศึกษางานวิจัยที่เกี่ยวข้อง
    1) ศึกษางานวิจัย เรื่อง Comparison and Enumeration of Chemical Graphs
    2) ศึกษาหาข้อมูลเกี่ยวกับโครงสร้างทางเคมีและคุณสมบัติต่างๆของสารเคมี
    3) ศึกษาหาข้อมูลเกี่ยวกับพอลิเมอร์ และอัลลอย
    4) ศึกษาหาข้อมูลเรื่องกราฟทางคณิตศาสตร์
    5) ศึกษาหาข้อมูลเกี่ยวกับกราฟอัลกอริทึม
2. กำหนดหัวข้อและจำกัดขอบเขตของโครงงาน
3. วางแผนการดำเนินงาน
    1) ระบุส่วนประกอบของโปรแกรม
    2) วางแผนการจัดทำโปรแกรม
    3) วางแผนระยะเวลาในการดำเนินงานในขั้นตอนต่างๆ
4. จัดทำโปรแกรม
5. สรุปผลการดำเนินงาน
    1) สรุปการใช้งานโปรแกรมที่จัดทำ
    2) สรุปความสามารถของโปรแกรมที่จัดทำ
6. จัดทำรูปเล่มโครงงาน
7. นำเสนอโครงงาน

ตารางการดำเนินงาน

ขั้นตอนการทำงาน	เดือน / ปี พ.ศ.2561					เดือน / ปี พ.ศ.2562			
	ส.ค.	ก.ย.	ต.ค.	พ.ย.	ธ.ค.	ม.ค.	ก.พ.	มี.ค.	เม.ย.
1. ศึกษางานวิจัยที่เกี่ยวข้อง									
2. กำหนดหัวข้อและจำกัดขอบเขตของโครงงาน									
3. วางแผนการดำเนินงาน									
4. จัดทำโปรแกรม									
5. สรุปผลการดำเนินงาน									
6. จัดทำรูปเล่มโครงงาน									
7. นำเสนอโครงงาน									

ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับต่อผู้ดำเนินงาน

1. มีความรู้เกี่ยวกับโครงสร้างทางเคมี
2. มีความรู้เกี่ยวกับคุณสมบัติของสารเคมี
3. มีความรู้เกี่ยวกับการเขียนโปรแกรมภาษา python
4. มีความรู้ในการใช้โปรแกรม PyCharm

ประโยชน์ที่ได้จากโครงงานที่พัฒนาขึ้น

1. เพื่อใช้เป็นความรู้ต่อยอดงานวิจัย
2. สามารถแก้ปัญหาที่เกี่ยวข้องกับโครงสร้างทางเคมีได้
3. เป็นเครื่องมือช่วยสำหรับงานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับโครงสร้างทางเคมี

อุปกรณ์และเครื่องมือที่ใช้

ซอฟต์แวร์

1. โปรแกรม Microsoft Word
2. โปรแกรม Acrobat Reader DC
3. โปรแกรม JetBrains PyCharm Community Edition 2018.2.4 x64

ฮาร์ดแวร์

1. เครื่องคอมพิวเตอร์แบบพกพา
2. เครื่องพิมพ์

งบประมาณ

รายการ	ราคาต่อหน่วย (บาท)	จำนวน	จำนวนเงิน (บาท)
1. กระดาษ A4	112	5	560
2. หมึกเครื่องพิมพ์	390	6	2340
3. ค่าถ่ายเอกสารและจัดทำรูปเล่ม	200	3	600
รวม			3500

เอกสารอ้างอิง

[1] อนุสิษฐ์ เกื้อกูล. สมบัติของสารประกอบและธาตุ [ออนไลน์]. 2560. แหล่งที่มา: http://www.scimath.org/lesson-chemistry/item/7196-2017-06-09-12-37-06 [3 พฤศจิกายน 2561].

[2] ณปภัช พิมพ์ดี. พอลิเมอร์ [ออนไลน์]. 2560. แหล่งที่มา: http://www.scimath.org/ lesson-chemistry/item/7089 - polymer [6 พฤศจิกายน 2561].

[3] ผศ.ดร.พิมพ์เพ็ญ พรเฉลิมพงศ์, ศาสตราจารย์เกียรติคุณ ดร.นิธิยา รัตนาปนนท์. อัลลอยโลหะผสม [ออนไลน์]. 2561. แหล่งที่มา: http://www.foodnetworksolution.com/wiki/word/0713/alloy-อัลลอยโลหะผสม [6 พฤศจิกายน 2561].

[4] Oscar Levin. Discrete Mathematics: An Open Introduction [Online]. 2013. Available from: http://discretetext.oscarlevin.com/dmoi/ch_graphtheory.html. [2018, October 21]

[5] Tatsuya Akutsu, Hiroshi Nagamochi, Comparison and Enumeration of Chemical Graphs, *Computational and Structural Biotechnology Journal*, Vol. 5, Issue 6, 2013.

ประวัติผู้เขียน

นางสาวพิมลนาฏ สุนเทียน
วัน เดือน ปี เกิด: 30 เมษายน 2540
อีเมล: pimolnat.s@outlook.com
วุฒิการศึกษา: กำลังศึกษาหลักสูตรวิทยาศาสตรบัณฑิต
สาขาวิชาคณิตศาสตร์ ภาควิชาคณิตศาสตร์และวิทยาการคอมพิวเตอร์
คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย