

## محاسبات بوهر

نیروی جاذبه الکتروستاتیکی بین هسته و الکترون در اتم هیدروژن، از رابطه زیر قابل محاسبه

$$F_1 = K \frac{e^2}{r^2} \quad \text{است:}$$

که در آن  $e$  بار الکترون،  $r$  فاصله الکترون از هسته (یا شعاع مدار مجاز) و  $K$  ثابتی است که

مقدار آن در سیستم بین‌المللی برابر  $\frac{1}{4\pi\epsilon_0}$  است. چون  $\epsilon_0$  (نفوذپذیری خلاء)

برابر  $8.854 \times 10^{-12} \text{ C}^2 / \text{m} \cdot \text{J}$  در نظر گرفته می‌شود: مقدار  $K$  برابر  $8.988 \times 10^9 \text{ m} \cdot \text{J} / \text{C}^2$

است. ولی در سیستم الکتروستاتیک  $c.g.s$  مقدار  $K$  برابر واحد است. از این رو، در اینجا برای سهولت،

محاسبات در سیستم اخیر صورت گرفته و  $K$  حذف می‌شود.

مقدار نیروی حاصل از چرخش الکترون به دور هسته را نیز می‌توان از رابطه زیر حساب کرد:

$$F_2 = \frac{mv^2}{r}$$

که در آن  $m$  جرم الکترون و  $v$  سرعت حرکت آن در مدار مجاز به شعاع  $r$  است. با توجه به اینکه

مسیر حرکت الکترون به صورت دایره است، مقدار این دو نیرو باید با یکدیگر برابر باشد. از این رو، با

مساوی قرار دادن  $F_1$  و  $F_2$  می‌توان نتیجه گرفت که:

$$v^2 = \frac{e^2}{mr}$$



اگر مقدار  $v^2$  را با استفاده از رابطه  $l = mvr = n \frac{h}{2p}$  بدست آورده و در رابطه بالا قرار دهیم،

$$r_{(n)} = \frac{n^2 h^2}{4p^2 m e^2} \quad \text{خواهیم داشت:}$$

براساس این رابطه، در مورد شعاع اتم هیدروژن در حالت اصلی آن ( $n=1$ ) می توان نوشت:

$$\begin{aligned} r &= \frac{(1)^2 (6.626 \times 10^{-34} \text{ J.s})^2}{4(3.1416)^2 (9.1096 \times 10^{-31} \text{ kg}) \left( 1.6022 \times 10^{-19} \text{ C} \times \frac{9.4805 \times 10^4 \text{ kg}^{1/2} \cdot \text{m}^{3/2} \cdot \text{s}^{-1}}{1 \text{ C}} \right)^2} \\ &= 0.5291 \times 10^{-10} \frac{\text{J}^2 \cdot \text{s}^2}{\text{kg}^2 \cdot \text{m}^3 \cdot \text{s}^{-2}} = 0.5291 \times 10^{-10} \frac{(\text{kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2})^2 \cdot \text{s}^2}{(\text{kg}^2 \cdot \text{m}^3 \cdot \text{s}^{-2})} \\ &= 0.5291 \times 10^{-10} \text{ m} = 0.5291 \times 10^{-10} \text{ m} \times \frac{10^{10} \text{ A}^0}{1 \text{ m}} = 0.5291 \text{ A}^0 \quad 0.529 \text{ A}^0 \end{aligned}$$

که با مقدار بدست آمده از روشهای دیگر، مطابقت کامل دارد و در حقیقت اولین معیار برای

درستی نظریه اتمی بوهر محسوب می شود.

این طول را معمولاً با  $a_0$  نشان می دهند و آن را شعاع بوهر و یا یک بوهر می نامند که به عنوان

واحدی برای تعیین طول شعاع اتمی، شعاع یونی، طول پیوند و غیره بکار می رود. با توجه به رابطه  $r_n$ ، در

$$r_{(n)} = \frac{h^2}{4p^2 m e^2} \cdot n^2 = a_0 \cdot n^2 \quad \text{مورد شعاع مدار } n \text{ ام، می توان نوشت:}$$

یعنی اندازه شعاع مدارهای مجاز دارای محدودیت کوآنتومی می باشد.

**مثال.** فاصله سومین و چهارمین مدار مجاز را در اتم هیدروژن بر حسب  $a_0$  و بر حسب آنگستروم

حساب کنید.

**حل.** براساس رابطه  $r_n = a_0 \cdot n^2$  می توان نوشت:

$$r_{(3)} = a_0 \times 3^2 = 9a_0$$

$$r_{(4)} = a_0 \times 4^2 = 16a_0$$

$$Dr = r_{(4)} - r_{(3)} = 7a_0 \Rightarrow 7 \times 0.5291 = 3.704A^0$$

### محاسبه سرعت حرکت الکترون بر روی مدارهای مجاز

اگر مقدار  $v$  را از رابطه  $l = mvr = n \frac{h}{2p}$  استخراج کنیم، خواهیم داشت:

$$v_{(n)} = n \left( \frac{h}{2p} \right) \frac{1}{mr}$$

و اگر به جای  $r$  مقدار آن را قرار دهیم، نتیجه می‌شود:

$$v_{(n)} = \frac{nh}{2m} \times \frac{4p^2 me^2}{n^2 h^2} = \frac{2pe^2}{nh}$$

براساس رابطه بالا، در مورد سرعت الکترون در حالت پایه اتم هیدروژن ( $r = 0.5291A^0$ ) و

$(n = 1)$  داریم:

$$v_{(1)} = \frac{(1)(6.626 \times 10^{-27} \text{ erg.s})}{2 \times 3.1416 \times 9.1096 \times 10^{-28} \text{ g} \times 0.5291 \times 10^{-8} \text{ cm}}$$

$$= 2.188 \times 10^8 \frac{\text{erg.s}}{\text{g.cm}} = 2.188 \times 10^8 \frac{(\text{g.cm}^2.\text{s}^{-2})\text{s}}{\text{g.cm}} = 2.188 \times 10^8 \text{ cm/s}$$

قابل توجه است که این مقدار، حدود  $\frac{1}{137}$  سرعت نور است.

## محاسبه انرژی کل الکترون

انرژی کل الکترون بر روی هر مدار ایستاده در اطراف هسته ( $E$ ) که در واقع سطح انرژی آن مدار

را مشخص می‌کند، برابر جمع جبری مقادیر انرژی پتانسیل جاذبه هسته و الکترون ( $V$ ) و انرژی جنبشی

$$E = V + E_k \quad \text{الکترون } (E_k) \text{ بر روی آن مدار ایستاده است:}$$

با استفاده از رابطه  $v^2 = \frac{e^2}{mr}$  می‌توان مقدار انرژی جنبشی الکترون را در هر مدار ایستاده

$$E_k = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m \frac{e^2}{mr} = \frac{e^2}{2r} \quad \text{حساب کرد:}$$

می‌دانیم که انرژی پتانسیل، مقدار انرژی جاذبه‌ای است که برای آوردن الکترون از فاصله بینهایت

دور از هسته (که در حالت سکون فرض می‌شود) و نزدیک کردن آن تا فاصله  $r$  به هسته لازم است. با

بیان ریاضی، پتانسیل نیروی جاذبه الکتروستاتیکی، گرادیان نیروی جاذبه نسبت به فاصله و یا انتگرال

مکانی نیروی جاذبه است. چنانچه، پتانسیل جاذبه هسته برای الکترون در فاصله بینهایت برابر صفر

فرض شود، مقدار آن در مورد الکترونی که به فاصله  $r$  از هسته اتم قرار داشته باشد، از رابطه زیر، قابل

محاسبه است:

$$V = \int_{\infty}^r F_1 dr = \int_{\infty}^r \frac{e^2}{r^2} dr = -\frac{e^2}{r}$$

با در نظر گرفتن 3 رابطه بالا، می‌توان نوشت:

$$E = -\frac{e^2}{2r}$$

اگر به جای  $r$ ، مقدار آن را در این رابطه قرار دهیم، خواهیم داشت:

$$E_{(n)} = -\frac{2p^2 m e^4}{n^2 h^2}$$

مقدار انرژی الکترون در حالت ایستاده اتم هیدروژن  $E_{(n=1)}$  برابر است با:

$$1C = 9.4805 \times 10^4 \text{ kg}^{1/2} \cdot \text{m}^{3/2} \cdot \text{s}^{-1} \quad , \quad 1eV = 1.602 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$E_{(1)} = -\frac{2(3.1416)^2 \times 9.1096 \times 10^{-31} \text{ kg} \times \left( 1.6022 \times 10^{-19} \text{ C} \times \frac{9.4805 \times 10^4 \text{ kg}^{1/2} \text{m}^{3/2} \cdot \text{s}^{-1}}{1C} \right)^4}{(1)^2 \times \left( 6.626 \times 10^{-34} \text{ Js} \times \frac{1 \text{ kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2}}{1J} \right)^2}$$

$$= -2.180 \times 10^{-18} \text{ kgm}^2 \text{s}^{-2}$$

$$= -\left( 2.180 \times 10^{-18} \text{ kgm}^2 \text{s}^{-2} \right) \left( \frac{1J}{1 \text{ kgm}^2 \text{s}^{-2}} \right) = -2.180 \times 10^{-18} \text{ J}$$

$$= -\left( 2.180 \times 10^{-18} \text{ J} \right) \left( 1eV / 1.602 \times 10^{-19} \text{ J} \right) = -13.6eV$$

$$E_{(1)} = -13.6eV$$

$$E_{(n)} = -E_{(1)} \times \frac{1}{n^2} \quad \text{در مورد انرژی مدار مجاز } n \text{ ام، می توان نوشت:}$$

یعنی انرژی الکترون، از محدودیت کوآنتومی پیروی می کند و به نسبت عکس توان دوم عدد

کوآنتومی مدارهای ایستاده، کم و یا زیاد می شود. بدیهی است که هر چه الکترون از هسته دورتر باشد،

چون  $n$  بزرگتر می شود، انرژی کل آن از لحاظ قدرمطلق کاهش یافته ولی با توجه به علامت منها، مقدار

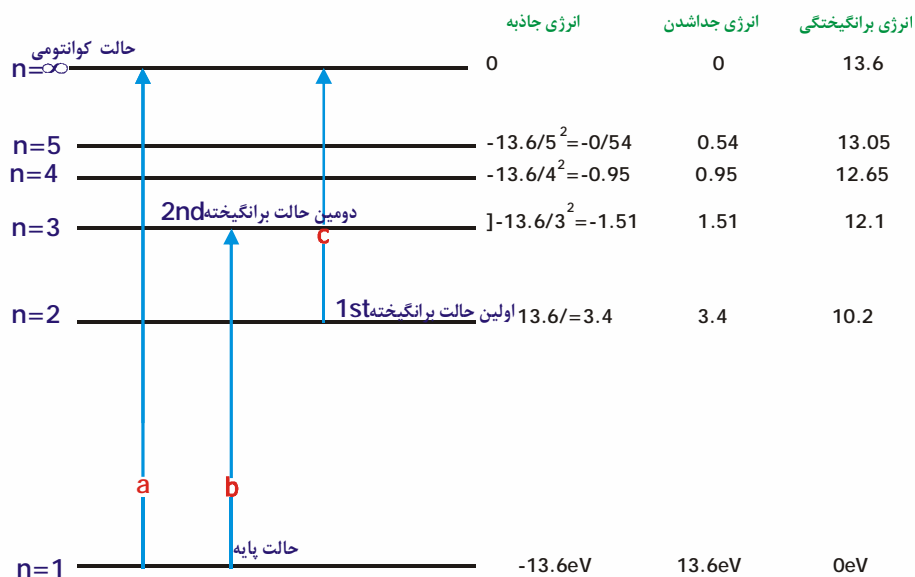
آن افزایش می یابد. قابل توجه است که با دورتر شدن الکترون از هسته در محدوده جاذبه هسته، مقدار

انرژی پتانسیل آن افزایش ولی مقدار انرژی جنبشی آن کاهش می یابد. ولی افزایش مقدار انرژی

پتانسیل آن بر کاهش انرژی جنبشی آن غلبه دارد. در نتیجه، مقدار کل انرژی الکترون افزایش می یابد.

در شکل زیر انرژی ترازهای الکترونی، انرژی برانگیختگی و انرژی جدا شدن الکترون در هر

یک از ترازهای انرژی در اتم هیدروژن نشان داده شده است.



نمودار ترازهای انرژی، انرژیهای برانگیختگی و انرژی لازم برای جدا شدن الکترون بر روی ترازهای انرژی اتم

هیدروژن. خط  $a$  نشان دهنده انرژی یونیزاسیون ( $13.6\text{eV}$ ) و خط  $b$  نشان دهنده انرژی لازم برای ایجاد دومین حالت

برانگیخته ( $12.1\text{eV}$ ) و خط  $c$  نشان دهنده انرژی جدا شدن الکترون از اولین حالت برانگیخته ( $3.4\text{eV}$ ) است.

مثال.

الف. مقدار نیروی جاذبه الکترون - هسته،

ب. انرژی پتانسیل الکترون،

ج. انرژی جنبشی الکترون،

د. انرژی کل را برای الکترونی که بر روی دومین مدار مجاز به دور هسته می چرخد،

بر حسب واحدهای سیستم الکتروستاتیکی c.g.s حساب کنید.

حل.

$$= 0.529 \times 10^{-8} \text{ cm} \times 2^2 = 2.12 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

الف.

$$r_{(2)} = a_0 \cdot n^2$$

$$F = \frac{e^2}{r^2} = \frac{(4.80 \times 10^{-10} \text{ esu})^2}{(2.12 \times 10^{-8} \text{ cm})^2} = 5.13 \times 10^{-4} \text{ dyne}$$

$$V_{(2)} = -\frac{e^2}{r_{(2)}}$$

ب.

$$V_{(2)} = -\frac{(4.80 \times 10^{-10} \text{ esu})^2}{2.12 \times 10^{-8} \text{ cm}} = -1.09 \times 10^{-11} \text{ erg}$$

ج. داریم:

$$E_k = \frac{e^2}{2r}$$

$$E_k = \frac{(4.80 \times 10^{-10} \text{ esu})^2}{2 \times 2.12 \times 10^{-8} \text{ cm}} = 5.43 \times 10^{-12} \text{ erg}$$

$$E_T = V + E_k = -1.09 \times 10^{-11} \text{ erg} + 5.43 \times 10^{-12} \text{ erg}$$

د.

$$= -10.9 \times 10^{-12} \text{ erg} + 5.43 \times 10^{-12} \text{ erg}$$

$$= -5.47 \times 10^{-12} \text{ erg}$$

مثال. فاصله اولین و دومین تراز برانگیخته را در اتم هیدروژن بر حسب آنگستروم و نیز از نظر

انرژی بر حسب الکترون ولت حساب کنید.

حل. چون مقدار  $n$  برای اولین و دومین تراز برانگیخته به ترتیب برابر 2 و 3 است، پس می توان

نوشت:

$$r(n) = a_0(n)^2$$

$$r_{(2)} = a_0(2)^2 = 0.529A^0 \times 4 = 2.12A^0$$

$$r_{(3)} = a_0(3)^2 = 0.529A^0 \times 9 = 4.76A^0$$

$$Dr = r_{(3)} - r_{(2)} = (4.76 - 2.12)A^0 = 2.64A^0$$

$$E_{(2)} = -E_{(1)} \times \frac{1}{2^2} = -13.6eV \times \frac{1}{4} = -3.40eV$$

$$E_{(3)} = -E_{(1)} \times \frac{1}{3^2} = -13.6eV \times \frac{1}{9} = -1.51eV$$

$$DE = E_{(3)} - E_{(2)} = -1.51eV - (-3.40eV) = 1.89eV$$

مثال. انرژی لازم برای اینکه الکترون در اتم هیدروژن از حالت پایه به سومین تراز برانگیخته

ارتقاء یابد و انرژی لازم برای جدا شدن الکترون در این حالت برانگیخته را بر حسب  $eV$  و کیلوکالری بر

مول حساب کنید.

حل. چون برای سومین تراز برانگیخته  $n = 4$  است، انرژی لازم برای ارتقاء الکترون از حالت پایه

به سومین تراز برانگیخته عبارت است از:

$$E_{exe} = E_{(4)} - E_{(1)} = -13.60eV \times \frac{1}{4^2} - \left( -13.60eV \times \frac{1}{1^2} \right)$$

$$= -0.85eV + 13.60eV = 12.75eV$$

چون هر الکترون ولت برابر 23/06 کیلوکالری بر مول است، می توان نوشت:



$$E_{exe} = 12.75eV \times \frac{23.06kcal / mol}{1eV} = 294kcal / mol$$

در مورد انرژی یونیزاسیون اتم هیدروژن در این شرایط، می توان نوشت:

$$E_{ion} = E_{(\infty)} - E_{(4)} = -13.60eV \times \frac{1}{\infty^2} - \left( -13.60eV \times \frac{1}{4^2} \right) = 0.85eV$$

$$= 0.850eV \times \frac{23.06kcal / mol}{1eV} = 19.6kcal / mol$$

**مثال.** انرژی یونیزاسیون اتم هیدروژن را براساس نظریه اتمی بوهر حساب کنید. (برحسب

الکترون ولت)

**حل.** چون انرژی یونیزاسیون، مقدار انرژی لازم برای ارتقاء الکترون از حالت پایه به فاصله

بینهایت دور از هسته اتم است، از این رو، در مورد اتم هیدروژن می توان نوشت:

$$E_{ion} = E_{(\infty)} - E_{(1)} = -13.6eV \times \frac{1}{\infty^2} - \left( -13.6eV \times \frac{1}{1^2} \right) = 13.6eV$$

