

■■■ مسئله‌ها ■■■

۱. هنری موزلی^۱ با تاباندن پرتو کاتدی به فلزهای مختلف مشاهده کرد که فلزات پرتو ایکس بازتاب می‌کنند و بین فرکانس پرتو ایکس و عدد اتمی رابطه‌ی $f = a(Z - b)^2$ برقرار است که f فرکانس بر حسب s^{-1} ، Z عدد اتمی و a و b دو عدد ثابت مثبت‌اند.

طول موج پرتو ایکس فلز کبالت (27Co) برابر 179.57 pm و طول موج پرتو ایکس فلز تنگستن (74W) برابر 22.84 pm است.

(الف) مقدار ثابت‌های a و b را محاسبه کنید و با ذکر واحد بنویسید. ($1\text{ pm} = 10^{-12}\text{ m}$)
 که $c = \lambda\nu$ که $c = 2.9979 \times 10^8\text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ ، λ طول موج بر حسب متر و ν فرکانس بر حسب s^{-1} است.)

(ب) فرکانس و طول موج پرتو ایکس عنصر رودیم (45Rh) را محاسبه کنید.
 (پ) رابطه‌ی بین جذر طول موج پرتو ایکس نشر شده (بر حسب جذر متر) و عدد اتمی یک فلز را بیابید.

۲. با استفاده از معادله‌ی شرودینگر در اتم هیدروژن و یون‌های تک الکترونی می‌توان توابع موج اوربیتال‌های مختلف را به دست آورد. تابع موج اوربیتال $3s$ به صورت زیر است

$$\psi_{3s} = \frac{1}{18\sqrt{3\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} (6 - 6\sigma + \sigma^2)e^{-\frac{\sigma}{3}}; \quad \sigma = \frac{2Zr}{3a_0}; \quad a_0 = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m_e q_e^2}$$

که Z بار هسته، $\pi = 3.142$ ، r فاصله از هسته، $e = 1.602 \times 10^{-19}\text{ C}$ ، $m_e = 9.1094 \times 10^{-31}\text{ kg}$ جرم الکترون، $q_e = 1.6022 \times 10^{-19}\text{ C}$ بار الکترون و $\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12}\text{ C}^2 \cdot \text{N}^{-1} \cdot \text{m}^{-2}$ ثابت گذردهی خلا است. احتمال حضور الکترون در فاصله‌ی r از هسته با $4\pi r^2 \psi^2$ متناسب است. یون تک الکترونی 3Li^{2+} را در نظر بگیرید و به سؤالات زیر پاسخ دهید.

(الف) احتمال حضور الکترون در اوربیتال $3s$ در $r_1 = 2.1 \times 10^{-10}\text{ m}$ چند برابر احتمال حضور الکترون در $r_2 = 3.5 \times 10^{-10}\text{ m}$ است؟

1. Henry Moseley

(ب) به نقاطی که احتمال حضور الکترون در آن‌ها صفر باشد گره می‌گویند. در اوربیتال $3s$ در چه فاصله(ها)ی از هسته، گره وجود دارد؟
 (پ) گزینه‌ی درست را انتخاب کنید: در حالت کلی اوربیتالی که عدد کوانتومی اصلی n دارد گره دارد.

$$\square n^2 - 7 \quad \square n - 1 \quad \square n - 2 \quad \square n^2 - 8$$

۳. در یک دمای مشخص همه‌ی مولکول‌های یک نمونه‌ی گاز با سرعت یکسان حرکت نمی‌کنند.

سرعت متوسط مولکول‌های گاز در دمای T کلوین بر حسب متر بر ثانیه از رابطه‌ی $V_m = \sqrt{\frac{\lambda RT}{\pi M}}$ به دست می‌آید که $R = 8,314 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ثابت جهانی گازها، $\pi = 3,142$ و M جرم مولی ذرات گاز بر حسب کیلوگرم بر مول است. اتم یک عنصر که در فاز گازی در دمای 273°C با سرعت V_m حرکت می‌کند، طول موج دوپرویی برابر $20,716 \text{ pm}$ دارد. جرم مولی این عنصر چند گرم بر مول است؟ (طول موج دوپرویی یک ذره (بر حسب متر) برابر $\lambda = \frac{h}{mV}$ است که $h = 6,6261 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ ثابت پلانک، m جرم ذره بر حسب کیلوگرم و V سرعت ذره بر حسب متر بر ثانیه است و $1 \text{ pm} = 10^{-12} \text{ m}$.)

۴. اثر فوتو الکتریک یکی از مشاهداتی است که خاصیت ذره‌ای نور را نشان می‌دهد. در این آزمایش با تاباندن نور به یک صفحه‌ی فلزی، الکترون‌ها از سطح فلز خارج می‌شوند. حداقل انرژی لازم برای کندن سست‌ترین الکترون از یک فلز، تابع کار فلز (ϕ) نام دارد. یک الکترون می‌تواند با جذب یک فوتون، انرژی آن را جذب کند و انرژی خود را به اندازه‌ی انرژی فوتون افزایش دهد. اگر انرژی جذب شده بیشتر از انرژی جاذبه‌ی بین الکترون و هسته (تابع کار) باشد، الکترون از فلز جدا می‌شود و بقیه‌ی انرژی فوتون به صورت انرژی جنبشی الکترون ذخیره می‌شود.

الف) با تاباندن نوری با طول موج $297,5 \text{ nm}$ به فلز روییدیم، الکترون‌ها با سرعت $10^5 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ آزاد می‌شوند. (i) انرژی جنبشی الکترون‌های آزاد شده را بیابید. (ii) تابع کار فلز را بر حسب ژول بیابید. (iii) حداکثر طول موج نوری که می‌تواند الکترون را از این اتم خارج کند (طول موج آستانه) بیابید. $E = h\nu$ که E انرژی فوتون بر حسب ژول، $h = 6,6261 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ ثابت پلانک و ν فرکانس بر حسب s^{-1} است، $c = \lambda\nu$ که $c = 2,9979 \times 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ ، طول موج بر حسب متر و ν فرکانس بر حسب s^{-1} است. انرژی جنبشی یک ذره بر حسب ژول برابر $E_{KE} = \frac{1}{2}mV^2$ است که m جرم ذره بر حسب کیلوگرم و V سرعت ذره بر حسب متر بر ثانیه است. $1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$ و جرم مولی الکترون $9,109 \times 10^{-31} \text{ kg}$ میلی‌گرم بر مول است.)

ب) هنگامی که به یک فلز معین نوری با طول موج $123/68 \text{ nm}$ می‌تابانیم سرعت الکترون‌های خارج شده دو برابر سرعت الکترون‌هایی است که با تاباندن نور با طول موج $256/89 \text{ nm}$ از سطح فلز خارج می‌شوند. (i) تابع کار فلز را بر حسب ژول حساب کنید. (ii) سرعت و انرژی جنبشی الکترون‌های آزاد شده در دو حالت را حساب کنید. (از اطلاعات قسمت «الف» استفاده کنید.)

۵. برای اتم‌ها و یون‌ها کمیتی به نام چندگانگی اسپین (S) تعریف می‌شود که برابر مجموع m_s همه‌ی الکترون‌های اتم یا یون است.

الف) پیش‌بینی قاعده‌ی هوند درباره‌ی چندگانگی اسپین یک اتم یا یون چیست؟ گشتاور مغناطیسی (μ_B)، کمیتی است برای اتم‌ها و یون‌ها، $\mu_B = \sqrt{n(n+2)}$ که n تعداد الکترون‌های جفت نشده‌ی اتم یا یون و μ_B بر حسب واحد بور-مگنتون^۱ (BM) است و رابطه‌ی $1 \text{ BM} = 9.274 \times 10^{-24} \text{ J} \cdot \text{T}^{-1}$ برقرار است.

ب) رابطه‌ی ای بین گشتاور مغناطیسی بر حسب واحد $\text{J} \cdot \text{T}^{-1}$ (ژول بر تسلا) و چندگانگی اسپین به دست آورید.

پ) از بین یون‌های عناصر واسطه‌ی تناوب چهارم با بار $+6$ ، یون کدام عنصر بیشترین گشتاور مغناطیسی را دارد؟ عدد اتمی این عنصر را به دست آورید و گشتاور مغناطیسی یون $(+6)$ آن را بر حسب BM و $\text{J} \cdot \text{T}^{-1}$ محاسبه کنید.

ت) گشتاور مغناطیسی یون A^{2+} ، $4/543 \times 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{T}^{-1}$ و گشتاور مغناطیسی یون A^{3+} ، $3/592 \times 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{T}^{-1}$ است. اگر عدد اتمی A کمتر از ۳۶ باشد، عدد اتمی عنصر A و آرایش الکترونی حالت پایه‌ی آن و یون‌های A^{2+} و A^{3+} را بیابید.

ث) با توجه به این‌که گشتاور مغناطیسی عنصر 46 Pd صفر است، آرایش الکترونی حالت پایه‌ی این عنصر را بنویسید و مجموع l همه‌ی الکترون‌های این اتم را مشخص کنید. (برای مثال اتم $^{40}_{18} \text{Ne}$ ، الکترون در زیرلایه‌ی s ($l = 0$) و ۶ الکترون در زیرلایه‌ی p ($l = 1$) دارد، پس مجموع l همه‌ی الکترون‌های اتم Ne، $6 = 6 \times 1 + 0 \times 4$ است.)

۶. انرژی الکترون در تراز انرژی n ام بر حسب الکترون ولت (eV) در سیستم‌های تک الکترونی با Z پروتون برابر $E_n = -13.6 \frac{Z^2}{n^2}$ است. اگر الکترون از تراز انرژی بالاتر به تراز انرژی پایین‌تر برود، انرژی‌اش کاهش می‌یابد و یک فوتون آزاد می‌کند که انرژی فوتون برابر اختلاف انرژی بین دو تراز است. (انرژی فوتون بر حسب ژول از رابطه‌ی $E = h\nu$ محاسبه شود که

1. Bohr-magneton

که $c = \lambda\nu$ ، $h = 6.6261 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ ثابت پلانک و ν فرکانس بر حسب s^{-1} است، $c = 2.9979 \times 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ طول موج بر حسب متر و ν فرکانس بر حسب s^{-1} است، $1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$ و $1 \text{ eV} = 1.602 \times 10^{-19} \text{ J}$ است.

(الف) الکترون در اتم هیدروژن وقتی از لایه n_1 به لایه n_2 می‌رود، نوری با طول موج 97.267 nm آزاد می‌کند. n_1 و n_2 را بیابید.

(ب) سری طیفی مجموعه‌ای از چند طول موج است که الکترون (در سیستم‌های تک الکترونی) وقتی از لایه‌های بالایی به لایه‌های پایین‌تر n می‌آید، آن‌ها را آزاد می‌کند. مثلاً طول موج‌های 656.1 nm ، 486.1 nm ، 433.9 nm و ... به یک سری طیفی (سری بالمر) تعلق دارند، چون الکترون (در اتم هیدروژن) آن‌ها را هنگام آمدن از لایه‌های 3 ، 4 ، 5 و ... به لایه $n = 2$ آزاد کرده است. در یک سری طیفی متعلق به یون تک الکترونی M^{x+} که در آن الکترون از لایه‌های بالاتر به لایه n آمده است، کمترین و بیشترین طول موج سری طیفی 51.26 nm و 117.16 nm است. x و n را محاسبه کنید.

(پ) نیلز بور^۱ برای سرعت الکترون در مدار n ام یک سیستم تک الکترونی با Z پروتون رابطه‌ی $V_n = \frac{e^2 Z}{2h\epsilon_0 n}$ را به دست آورد که e ، h و ϵ_0 مقادیر ثابتی‌اند. سرعت الکترون در مدار دوم در یون 3Li^{2+} برابر $3.285 \times 10^6 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ است. (i) سرعت الکترون در اولین حالت برانگیخته در اتم هیدروژن چند متر بر ثانیه است؟ (ii) سرعت الکترون در حالت پایه یون تک الکترونی P^{q+} برابر $1.314 \times 10^7 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ است. q را محاسبه کنید.

(ت) الکترون در یک یون تک الکترونی با جذب نوری با طول موج 43.23 nm از لایه n_1 به لایه n_2 می‌رود و با نشر نوری با طول موج 54.04 nm از لایه n_3 به لایه n_1 می‌رود. در این یون، الکترون وقتی از لایه n_3 به لایه n_2 می‌رود، (i) نور جذب می‌کند یا نشر می‌کند؟ (ii) طول موج مربوط به این انتقال چند نانومتر است؟

(ث) در یون He^+ الکترون با نشر نوری با طول موج 656.55 nm از لایه p به لایه q می‌رود و با جذب نوری با طول موج 1875.87 nm از لایه p به لایه $2q$ می‌رود. p و q را بیابید. (ج) الکترون در یون 80Hg^{79+} وقتی از لایه n_1 به لایه n_2 می‌رود، نوری را با طول موج 62.058 pm جذب می‌کند. n_1 و n_2 را بیابید. ($1 \text{ pm} = 10^{-12} \text{ m}$)

۷. با استفاده از مکانیک کوانتوم، انرژی‌های چرخشی^۲ مجاز برای یک مولکول دو اتمی گازی فرضی

1. Neils Bohr 2. rotational energies

DF از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید

$$E_{\text{rot}} = BJ(J + 1); \quad J = 0, 1, 2, 3, \dots$$

که J سطح انرژی ارتعاشی و $B = \frac{h^2}{8\pi^2 I}$ ثابت چرخشی است که بر حسب ژول بیان می‌شود. در این رابطه $h = 6.6261 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ ثابت پلانک، $\pi = 3.142$ و $I = \mu R^2$ است که I ، لختی چرخشی بر حسب $\text{kg} \cdot \text{m}^2$ طول پیوند مولکول بر حسب متر و μ جرم کاهیده بر حسب کیلوگرم است که از رابطه‌ی $\frac{m_D \times m_F}{m_D + m_F}$ به دست می‌آید که m_D و m_F جرم اتم‌های D و F بر حسب کیلوگرم است. همچنین می‌توان مقدار B را برای یک مول مولکول و بر حسب $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$ بیان کرد.

یک مولکول گازی DF که ابتدا در سطح انرژی ارتعاشی J_i قرار دارد می‌تواند با جذب نوری با انرژی E به سطح انرژی ارتعاشی بالاتر J_f برود و سطح انرژی ارتعاشی خود را به اندازه‌ی E افزایش دهد. در این انتقال باید $J_f - J_i = 1$ باشد.

ثابت چرخشی مولکول $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ برابر $B = 23.7115 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$ است.

(الف) بلندترین طول موج نوری که یک مولکول $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (برای بالا بردن سطح انرژی ارتعاشی) جذب می‌کند چقدر است؟ (جواب را تا رقم اعشار بر حسب سانتی‌متر بنویسید. $E = h\nu$ که E انرژی فوتون بر حسب ژول، h ثابت پلانک و ν فرکانس بر حسب s^{-1} است، $c = \lambda\nu$ که $c = 2.9979 \times 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ طول موج بر حسب متر و ν فرکانس بر حسب s^{-1} است.)
(ب) اگر این مولکول نوری را با طول موج $646.91 \mu\text{m}$ جذب کند و انرژی ارتعاشی خود را افزایش دهد و سطح انرژی ارتعاشی خود را از J_i به J_f برساند، J_i و J_f را محاسبه کنید. ($1 \mu\text{m} = 10^{-6} \text{ m}$) از اطلاعات قسمت «الف» استفاده کنید.)

(پ) با توجه به این‌که جرم اتمی ^{12}C طبق تعریف برابر 12 amu و جرم اتمی ^{16}O برابر 15.9949 amu است، لختی چرخشی این مولکول را بر حسب $\text{kg} \cdot \text{m}^2$ و طول پیوند آن را بر حسب pm محاسبه کنید. ($1 \text{ pm} = 10^{-12} \text{ m}$)

(ت) تئوری نشان می‌دهد که طول پیوند مولکول DF با عوض شدن ایزوتوپ‌های اتم‌های D و F تغییر نمی‌کند. برای مثال طول پیوند مولکول $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ با طول پیوند مولکول $^{13}\text{C}^{18}\text{O}$ یکسان است. با توجه به این‌که جرم اتمی ^{13}C برابر 13.0034 amu و جرم اتمی ^{18}O برابر 17.9992 amu است، ثابت چرخشی مولکول $^{13}\text{C}^{18}\text{O}$ را بر حسب ژول بر مول محاسبه کنید.

۸. اگر از معادله‌ی شرودینگر برای به دست آوردن انرژی یک ذره که در جعبه‌ای یک بعدی به طول