

Задачи для самостоятельного решения

1. Записать уравнение Шредингера для стационарных состояний электрона, находящегося в атоме водорода.

2. Вычислить отклонение вероятностей $\frac{W_1}{W_2}$ нахождения электрона на первом и втором энергетических уровнях в интервале $\frac{l}{4}$, равноудаленном от стенок одномерной потенциальной ямы шириной l .

Ответ: $\frac{W_1}{W_2} = 5,24$.

3. Оценить значение n , для которого можно считать справедливым приближение бесконечно высокой стенки, если на самом деле высота стенок ящика U конечна. Приняв $l = 10^{-10}$ м.

Ответ: $n \ll 14$.

4. Электрон находится в одномерном потенциальном ящике шириной l . Определить среднее значение координаты $\langle x \rangle$ электрона ($0 < x < l$).

Ответ: $\langle x \rangle = \frac{l}{2}$.

Занятие № 12

Тема: **Периодическая система элементов Д.И. Менделеева**

Краткая теория

Состояние каждого электрона в атоме однозначно характеризуется четырьмя квантовыми числами:

- главным n ($n = 1, 2, 3, \dots$);
- орбитальным (азимутальным) l ($l = 0, 1, 2, 3, \dots, n - 1$);
- магнитным m_l ($m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$);
- магнитным спиновым $m_s = 1/2, -1/2$.

Распределение электронов в атоме подчиняется принципу Паули: в одном и том же атоме не может быть более одного электрона с одинаковым набором четырех квантовых чисел n, l, m_l, m_s , т.е.

$$Z(n, l, m_l, m_s) = 0 \text{ или } 1,$$

где $Z(n, l, m_l, m_s)$ – число электронов, находящихся в квантовом состоянии, описываемом набором четырех квантовых чисел n, l, m_l, m_s .

Число возможных состояний, соответствующих данному n :

$$Z(n) = \sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1) = 2n^2.$$

Совокупность электронов в многоэлектронном атоме, имеющих одно и то же главное квантовое число n называется электронной оболочкой. В каждой из оболочек электроны распределяются по подоболочкам, соответствующим данному l . Число подоболочек равно порядковому номеру n оболочки. Количество электронов в подоболочке определяется магнитным и магнитным спиновым квантовыми числами: максимальное число электронов в подоболочке с данным l равно $2(2l+1)$.

Обозначение оболочек, распределение электронов по оболочкам и подоболочкам (табл. 12.1).

Таблица 12.1

Главное квантовое число n	1		2			3			4			5				
Символ оболочки	K		L			M			N			O				
Максимальное число электронов в оболочке	2		8			18			32			50				
Орбитальное квантовое число l	0	0	1	0	1	2	0	1	2	3	0	1	2	3	4	
Символ подоболочки	1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f	5s	5p	5d	5f	5g	
Максимальное число электронов в подоболочке	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	18	

Принцип Паули позволяет объяснить Периодическую систему элементов Д.И. Менделеева, которая является основой химии, атомной и ядерной физики.

Атомный номер равен заряду ядра в единицах элементарного заряда. При обозначении расположения электронов в атоме по оболочкам ставят главное квантовое число перед обозначением подгруппы, в которой находятся электроны; число электронов в этой подгруппе пишут как

показатель степени: например, $2p^3$ означает три электрона в оболочке с $n = 2$ и подгруппе с $l = 1$.

Примеры решения задач

Задача 12.1. Указать (с учетом принципа Паули), какое максимальное количество электронов в атоме может иметь следующие одинаковые квантовые числа: 1) n, l, m_l , 2) m_l, m_s , если $n = 2$.

Решение

По принципу запрета Паули, в атоме не может быть двух и более электронов с одинаковыми квантовыми числами. Если три квантовых числа одинаковы, то электроны отличаются спином (собственным механическим моментом импульса), который может принимать для электронов только два значения:

$$L_s = m_s \hbar, \text{ где } m_s = \pm 1/2.$$

Значит:

а) электронов с тремя одинаковыми квантовыми числами n, l, m_l может быть не более двух;

б) квантовому числу $n = 2$ соответствуют два значения орбитального квантового числа $l(0;1)$. Каждому числу l соответствует набор значений магнитного квантового числа m_l ($m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$). С учетом того, что спин электронов с таким набором квантовых чисел должен быть одинаков, получим, что число таких электронов может быть не более двух. Набор квантовых чисел для этих электронов:

для 1: 2, 0, 0, +1/2;

для 2: 2, 1, 0, +1/2.

Задача 12.2. Чему равен квадрат орбитального момента импульса для электронных состояний: а) $2p$; б) $5f$?

Решение

Квадрат орбитального момента импульса определяется выражением

$$M^2 = l(l+1)\hbar^2,$$

где l – азимутальное квантовое число, принимающее целочисленные значения в интервале $0 = l = n - 1$; n – главное квантовое число.

Совокупность электронов с одним и тем же значением главного квантового числа называется электронной оболочкой. Электроны с одинаковыми значениями главного и азимутального квантовых чисел образуют подоболочку, обозначаемую буквами латинского алфавита s, p, d, f и далее по алфавиту в порядке возрастания числа l . Значение главного квантового числа n указывается перед условным обозначением азимутального квантового числа l .

Поскольку l всегда меньше n , возможны следующие состояния электрона:

$$n = 1: 1s(l = 0);$$

$$n = 2: 2s(l = 0), 2p(l = 1);$$

$$n = 3: 3s(l = 0), 3p(l = 1), 3d(l = 2);$$

$$n = 4: 4s(l = 0), 4p(l = 1), 4d(l = 2), 4f(l = 3);$$

$$n = 5: 5s(l = 0), 5p(l = 1), 5d(l = 2), 5f(l = 3), 5g(l = 4);$$

и так далее.

Следовательно, в случае:

а) электронное состояние задано в виде $2p$, т.е. $n = 2, l = 1$, тогда

$$M^2 = 1(1 + 1)\hbar^2 = 2\hbar^2;$$

б) электронное состояние задано в виде $5f$, т.е. $n = 5, l = 3$, тогда

$$M^2 = 3(3 + 1)\hbar^2 = 12\hbar^2.$$

Ответ: а) $M^2 = 2\hbar^2$; б) $M^2 = 12\hbar^2$.

Задача 12.3. Состояние атома характеризуется квантовыми числами L и S , равными: а) 2 и 2; б) 3 и 2; в) 2 и 3; г) 1 и 3/2. Написать возможные значения квантового числа J при данных значениях L и S .

Решение

а) $L = 2; S = 2;$

б) $L = 3; S = 2;$

в) $L = 2; S = 3;$

г) $L = 1; S = 3/2;$

$J - ?$

Квантовое число L характеризует суммарный орбитальный момент импульса электронов в атоме

$$M = \hbar\sqrt{L(L + 1)},$$

Оно может принимать целочисленные неотрицательные значения.

Квантовое число S определяет результирующий спиновый момент импульса электронов в атоме:

$$M_S = \hbar\sqrt{S(S + 1)}.$$

Спиновое число S может быть целым либо полуцелым неотрицательным числом в зависимости от того, четным или нечетным является число электронов в атоме. При четном числе электронов L квантовое число S принимает все полученные значения от $N/2$ (одинаковая ориентация спиновых моментов всех электронов) до $1/2$ (все спиновые моменты, кроме одного, попарно компенсируют друг друга). В зависимости от относительной ориентации орбитального M_l и спинового моментов импульса M_s , квантовое число J результирующего момента импульса атома M_J может принимать одно из следующих значений:

$$J = L + S; L + S - 1; \dots; |L - S|.$$

Следовательно, в случае:

- а) $J_{\max} = 4; J_{\min} = 0;$
- б) $J_{\max} = 5; J_{\min} = 1;$
- в) $J_{\max} = 5; J_{\min} = 1;$
- г) $J_{\max} = 5/2; J_{\min} = 1/2.$

Ответ: а) 4, 3, 2, 1, 0; б) 5, 4, 3, 2, 1; в) 5, 4, 3, 2, 1; г) 5/2, 3/2, 1/2.

Задачи для самостоятельного решения

1. Определите суммарное максимальное число s -, p -, d -, f - и g -электронов, которые могут находиться в N - и O -оболочках атома.

Ответ: 82.

2. Запишите квантовые числа, определяющие внешний, или валентный, электрон в основном состоянии атома натрия.

3. Пользуясь Периодической системой элементов, запишите символически электронную конфигурацию следующих атомов в основном состоянии: 1) неона; 2) аргона; 3) криптона.

4. Заполненной электронной оболочке соответствует главное квантовое число $n = 4$. Определите число электронов в этой оболочке, которые имеют одинаковые следующие квантовые числа: 1) $m_l = -3$; 2) $m_s = 1/2, l = 2$; 3) $m_s = -1/2, m_l = 1$.

Ответ: 1) 2; 2) 5; 3) 3.

5. Пользуясь Периодической системой элементов, запишите символически электронную конфигурацию атома меди в основном состоянии.