

УДК 371.01

МЕТОДИКА ИЗУЧЕНИЯ ПРИНЦИПА ЗАПРЕТА ПАУЛИ КУРСА КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ В ПРОГРАММЕ ВЫСШЕЙ ШКОЛЫ

¹Бахтибаев А.Н., ²Абекова Ж.А., ²Оралбаев А.Б.

¹Международный Казахско-Турецкий университет имени Х.А. Яссави, Туркестан,
e-mail: abekova68@mail.ru;

²Южно-Казахстанский университет им. М. Ауезова, Шымкент

Теоретические вопросы квантовой механики в предельном случае при стремлении постоянной Планка к нулю должны переходить в формулы классической механики. Одним из основных крупных достижений квантовой механики можно считать полное теоретическое объяснение расположения электронов в атомных оболочках, которая опирается на принцип запрета Паули. В данной статье показана достижение квантовой теории для объяснения свойств элементов периодической системы элементов Д.И. Менделеева.

Ключевые слова: принцип запрета Паули, электронные оболочки, симметричные и антисимметричные волновые функции, фермионы, бозоны, энергетическое состояние, уравнение шредингера, квантовые числа

METHODOLOGY OF STUDY OF PRINCIPLE OF PROHIBITION OF PAULIE OF COURSE OF QUANTUM MECHANICS IS IN PROGRAM OF HIGHER SCHOOL

¹Bahtibaev A.N., ²Abekova Z.A., ²Oralbayev A.B.

¹Mezhdunarodny Kazakh-Turkish University named H.A. Yassavi, Turkestan, e-mail: abekova68@mail.ru;

²South Kazakhstan State University by named M. Auezov, Shymkent

Theoretical questions of quantum mechanics in a limit case at aspiration of a constant of Planck to zero have to pass into formulas of classical mechanics. One of the main large achievements of quantum mechanics can consider a full theoretical explanation an arrangement of electrons in nuclear covers which relies on the principle of a ban of Paulie. In this article it is shown achievement of the quantum theory for an explanation of properties of elements of periodic system of elements of D.I. Mendeleyev.

Keywords: principle of a ban of Paulie, electron shells, symmetric and antisymmetric wave functions, fermions, bosons, power state, Schrödinger's equation, quantum numbers

Принцип запрета или как его называют в квантовой механике принцип Паули, который определяет конфигурацию внешних электронных оболочек атомов является неотъемлемой составной частью квантовой физики. Благодаря этому принципу запрета Паули можно теоретически предсказать все свойства химических элементов, хотя на практике эта задача требует более сложных математических расчетов. Этот принцип запрета Паули используют не только физики, химики но и специалисты смежных и других наук. Здесь нужно отметить, что одно из существенных достижений квантовой теории заключается в использовании принципа запрета Паули для простого, но полного объяснения свойств элементов на основе периодической таблицы.

Во-первых для полного усвоения свойств химических элементов или электронных оболочек атомов приведем сам принцип запрета Паули, который формулируется следующим образом: в одном квантовом состоянии не может быть более одного электрона, который описывается следующими четырьмя квантовыми числами: n , l , m_l , m_s . Или другими словами можно описать следующим образом: в одном атоме не мо-

жет быть двух электронов с одним и тем же набором четырех квантовых чисел: n , l , m_l , m_s . Этот гениальный принцип Паули сформулировал на основании анализа опытных данных еще до появления квантовой механики. Принцип Паули определяет статистическое поведение частиц с полуцелым спином (электроны, протоны, нейтроны и т.д.), которые описываются антисимметричной волновой функцией (фермионы) [1, 2].

Во-вторых нужно отметить, что не все частицы подчиняются принципу запрета Паули. Другие частицы, свойства которых не согласуются с принципом запрета Паули, подчиняются статистике Бозе-Эйнштейна, их называют бозонами (фотоны, альфа частицы, атомы которые состоят из одинакового числа протонов и нейтронов). Здесь например можно наглядно объяснить почему альфа – частица не подчиняется принципу Паули, альфа-частица как известно – это ядра Гелия, она состоит из двух протонов и двух нейтронов, так как протон и нейтрон – это фермионы, со спином $S = \pm \frac{\hbar}{2}$, тогда суммарный спин ядра Гелия получается либо нуль, либо единица

($\hbar$), значит альфа-частица относится к бозонам, у которых спин либо нуль, либо единица. В данном вопросе мы должны подробно объяснить, что такое спин, для чего он вводится. Спин – это чисто кванто-механическое свойство микрочастицы, оно не имеет классического аналога. Теоретически было предсказано и экспериментально было подтверждено, что у каждого электрона имеется собственный момент импульса, или спин,

равный, $L = S = \pm \frac{\hbar}{2}$. Следует отметить, что

он составляет половину обычного значения орбитального момента. Это похоже на то, как если бы электрон представлял собой сферу, вращающуюся вокруг собственной

оси с постоянным моментом $L = S = \pm \frac{\hbar}{2}$.

Этот собственный момент, или спин, невозможно ни уменьшить, ни увеличить. Он одинаков у всех элементарных частиц данного типа [3, 4].

Вскоре после того, как был открыт спин электрона, Паули и Дирак разработали релятивистскую теорию частиц для фермионов, с антисимметричной волновой функцией, и с радостью обнаружили, что условие релятивистской инвариантности приводит к волновым функциям электрона, которые автоматически удовлетворяют принципу запрета Паули. Это означало, что принцип запрета Паули не был взят с потолка! Это был блестящий успех Вольфганга Паули! [3, 4].

У частицы со спином $S = \pm \frac{\hbar}{2}$ проекция ее на ось z могут принимать лишь одно из двух значений. Эта величина проекции спина необходима для полной характеристики состояния электрона или фермионов.

Для полного описания состояния атома необходимо знать четыре квантовых числа: первые три получаются из уравнения Шредингера, а последнее – спиновое квантовое число – из релятивистской теории электрона, разработанной Дираком [1, 2].

Известно, что по классической теории электроны находятся в наиболее устойчивом состоянии, если они занимают самый нижний, т.е. основной энергетический уровень. Отсюда следует, что и электрон водорода, и многочисленные электроны самых тяжелых химических элементов должны располагаться на первой орбите, радиус которой уменьшается с увеличением атомной массы элемента. Но фактически все ато-

мы по своим размерам примерно одинаковые. Уровни энергии с соответствующими квантовыми числами располагаются таким образом, что образуют оболочки и подоболочки, в этих уровнях ориентация спинов электронов бывает различной, это означает что соблюдается принцип запрета Паули.

В принципе в периодической таблице элементы расположены по правилам, которые первоначально основывались на их химических свойствах и атомных весах. Однако, в действительности решающий фактор имеет не атомный вес, а атомный номер Z , т.е. число электронов, которые обращаются вокруг ядра. Одним из наиболее важных применений принципа Паули является объяснение оболочечной структуры атомов, т.е. свойства, выражающегося в периодичности химических свойств атомов. Следуя Нильсу Бору мы будем развивать теорию периодической системы, шаг за шагом переходя от простых элементов к следующим, более сложным элементам. Поэтому в начале каждого шага мы имеем элемент с известной конфигурацией, затем предполагаем, что заряд ядра этого атома увеличился на единицу и одновременно на периферии электронной оболочки появился еще один электрон. Собственно таким образом происходит и заполнение электронных оболочек.

Например самый простейший элемент – водород ($Z = 1$). Его электрон в основном состоянии находится на нижней орбите, поэтому его главное квантовое число $n = 1$, мы говорим, что электрон находится на К-оболочке. Теперь при переходе к гелию появляется второй электрон, для обоих этих электронов $n = 1$, и поэтому $l = 0$, а также и $m = 0$. Отсюда по принципу запрета Паули следует, что они должны иметь разные знаки спинов. Так как существуют только два возможных значения $S = \pm \frac{\hbar}{2}$, то в К-оболочке имеются места только для двух электронов. [4].

Если теперь прибавить третий электрон, то ему не найдется места в К-оболочке, и он должен поселиться на L-оболочке. В-первых, как и в К-оболочке, на L-оболочке имеются два электрона с $l = 0$, они отличаются друг от друга только компонентами спина. Далее есть еще 6 мест для электронов с $l = 1$, так как m , конечно, может иметь три значения: $-1, 0, 1$, и для каждого из них возможны две ориентации спинов.

Таким образом, всего в L-оболочке 8 мест, и они подразделяются на две подоболочки с двумя и шестью электронами. Таким путем происходит и заполнение других подоболочек. Здесь нужно отметить, что в каждой оболочке может находиться только определенное количество электронов. Поэтому максимальное число электронов, которые имеют данное данное главное квантовое число n , равно $S = \sum 2n^2$, поэтому число электронов получается 2, 8, 18, 32, 50 [3].

Подводя итоги можно сказать, что заполнение оболочек электронами строится по такой схеме: каждый вновь присоединяющийся электрон связывается в состоянии с наименьшими допустимыми принципом Паули квантовыми числами n, l .

Когда заполнение оболочки закончено, образуется устойчивая электронная конфигурация, соответствующая электронной конфигурации благородных газов. После этого начинает заполняться следующая оболочка, причем первым элементом при этом является щелочной металл. Здесь нужно отметить, что при заполнении оболочек электронами кроме принципа запрета Паули еще существует так называемый правило

Хунда. Теперь выясним что это за правило, и какую роль она играет в расположении электронов. Правило Хунда формулируется таким образом:

Среди термов, возникших из одной определенной конфигурации, низшую энергию имеет тот, который соответствует наибольшему значению S . Среди термов, с одинаковыми S низшую энергию имеет тот, который соответствует наибольшему L [1, 3].

Подводя итоги к вышесказанному можно добавить, что руководствуясь принципом запрета Паули и правилом Хунда можно теоретически полностью описать заполнение электронных оболочек атомов периодической структуры химических элементов Д.И. Менделеева. Это еще раз подтверждает огромные теоретические возможности и успехи квантовой механики, которая является основой современной физики.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Левич В.Г., Вдовин Ю.А., Мямлин В.А. Курс теоретической физики. – М.: Физматлит, 2012. – С. 473–482.
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. – М.: Физматлит, 2004. – С. 156–163.
3. Матвеев А.Н. Атомная физика. –М.: Высшая школа, 2001. – С. 275–284.
4. Акоста В., Кован К., Грэм В. –М.: Просвещение, 2003. – С. 254–260.