**Принцип Паули**

**Введение**

В 1925 г. Паули установил квантово - механический принцип (принцип запрета Паули).

В любом атоме не может быть двух электронов, находящихся в одинаковых стационарных состояниях, определяемых набором четырех квантовых чисел: n, , m, ms.

Например, на энергетическом уровне может находиться не более двух электронов, но с противоположным направлением спинов.

Принцип Паули дал возможность теоретически обосновать периодическую систему элементов Менделеева, создать квантовые статистики, современную теорию твердых тел и др.

**Принцип Паули**

Состояние каждого электрона в атоме характеризуется четырьмя квантовыми числами:

1. Главное квантовое число n (n = 1, 2 ...).

2. Орбитальное (азимутальное) квантовое число l (l = 0, 1, 2, ... n-1).

3. Магнитное квантовое число m (m = 0, +/-1, +/-2, +/-... +/-l).

4. Спиновое квантовое число ms (ms = +/-1/2 ).

Для одного фиксированного значения главного квантового числа n существует 2n2 различных квантовых состояний электрона.

Один из законов квантовой механики, называемый принципом Паули, утверждает:

В одном и том же атоме не может быть двух электронов, обладающих одинаковым набором квантовых чисел, (т.е. не может быть двух электронов в одинаковом состоянии).

Принцип Паули дает объяснение периодической повторяемости свойств атома, т.е. периодической системе элементов Менделеева.

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

В 1869 г. Менделеев открыл периодический закон изменения химических и физических свойств элементов. Он ввел понятие о порядковом номере элемента и получил полную периодичность в изменении химических свойств элементов.

При этом часть клеток периодической системы осталась незаполненной, т.к. соответствующие им элементы были неизвестны к тому времени. В 1998 г. в России синтезирован изотоп 114-го элемента.

Менделеев предсказал ряд новых элементов (скандий, германий и др.) и описал их химические свойства. Позднее эти элементы были открыты, что полностью подтвердило справедливость его теории. Даже удалось уточнить значения атомных масс и некоторые свойства элементов.

Химические свойства атомов и ряд их физических свойств объясняются поведением внешних (валентных) электронов.

Стационарные квантовые состояния электрона в атоме (молекуле) характеризуются набором 4-х квантовых чисел: главного (n), орбитального (l), магнитного (m) и магнитного спинового (ms). Каждое из них характеризует квантование: энергии (n), момента импульса (l), проекции момента импульса на направление внешнего магнитного поля (m) и проекции спина (ms).

Согласно теории порядковый номер химического элемента Z равен общему числу электронов в атоме.

Если Z - число электронов в атоме, находящихся в состоянии, которое задается набором 4-х квантовых чисел n, l, m, ms, то Z(n, l, m, ms) = 0 или 1.

Если Z - число электронов в атоме, находящихся в состояниях, определяемых набором 3-х квантовых чисел n, l, m, то Z(n, l, m)=2. Такие электроны отличаются ориентацией спинов.

Если Z - число электронов в атоме, находящихся в состояниях, определяемых 2-мя квантовыми числами n, l,то Z(n, l)=2(2l+1).

Если Z - число электронов в атоме, которые находятся в состояниях, определяемых значением главного квантового числа n, то Z(n)=2n2.

Электроны в атоме, занимающие совокупность состояний с одинаковыми значениями главного квантового числа n, образуют электронный слой: при n=1 К - слой; при n=2 L - слой; при n=3 М - слой; при n=4 N - слой; при n=5 О - слой и т.д.

В каждом электронном слое атома все электроны распределены по оболочкам. Оболочка соответствует определенному значению орбитального квантового числа (табл. 1 и рис. 1).

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| n | Электронный слой | Число электронов в оболочках |  |  |  |  | Общее число электронов |
|  |  | s(l=0) | p(l=1) | d(l=2) | f(l=3) | g(l=4) |  |
| 1 | K | 2 | - | - | - | - | 2 |
| 1 | L | 2 | 6 | - | - | - | 8 |
| 3 | M | 2 | 6 | 10 | - | - | 18 |
| 4 | N | 2 | 6 | 10 | 14 | - | 32 |
| 5 | O | 2 | 6 | 10 | 14 | 18 | 50 |

При заданном l магнитное квантовое число m принимает 2l+1 значений, а ms - два значения. Поэтому число возможных состояний в электронной оболочке с заданным l равно 2(2l+1). Так оболочка l=0 (s - оболочка) заполнена двумя электронами; оболочка l=1 (р - оболочка) - шестью электронами; оболочка l=2 (d - оболочка) - десятью электронами; оболочка l=3 (f - оболочка) - четырнадцатью электронами.

Последовательность заполнения электронных слоев и оболочек в периодической системе элементов Менделеева объясняется квантовой механикой и основывается на 4-х положениях:

1. Общее число электронов в атоме данного химического элемента равно порядковому номеру Z.

2. Состояние электрона в атоме определяется набором 4-х квантовых чисел: n, l, m, ms.

3. Распределение электронов в атоме по энергетическим состояниям должно удовлетворять минимуму энергии.

4. Заполнение электронами энергетических состояний в атоме должно происходить в соответствии с принципом Паули.

При рассмотрении атомов с большим Z, из-за возрастания заряда ядра, электронный слой стягивается к ядру и начинает заполняться слой с n=2 и т.д. При заданном n сначала заполняется состояние s-электронов (l=0), затем р-электронов (l=1), d-электронов (l=2) и т.д. Это приводит к периодичности химических и физических свойств элементов. Для элементов первого периода сначала происходит заполнение оболочки 1s; для электронов второго и третьего периодов - оболочек 2s, 2p и 3s и 3р.

Однако, начиная с четвертого периода (элемент калий, Z=19), последовательность заполнения оболочек нарушается вследствие конкуренции близких по энергии связи электронов. Прочнее могут оказаться (энергетически выгоднее) связанными электроны с большим n, но меньшим l (например, электроны 4s прочнее связаны, чем 3d).

Распределение электронов в атоме по оболочкам определяют его электронную конфигурацию. Для указания электронной конфигурации атома пишут в ряд символы заполнения электронных состояний оболочек nl, начиная с самой близкой к ядру. Индексом справа вверху отмечают числа электронов в оболочке, находящихся в этих состояниях. Например, у атома натрия 2311Na, где Z=11 - порядковый номер элемента в таблице Менделеева; число электронов в атоме; число протонов в ядре; A=23 - массовое число (число протонов и нейтронов в ядре). Электронная конфигурация имеет вид: 1s2 2s2 2p6 3s1, т.е. в слое с n=1 и l=0 - два s-электрона; в слое с n=2 и l=0 - два s-электрона; в слое с n=2 и l=1 - шесть р-электронов; в слое с n=3 и l=0 - один s-электрон.

Наряду с нормальной электронной конфигурацией атома, соответствующей наиболее прочной энергии связи всех электронов, при возбуждении одного или нескольких электронов возникают возбужденные электронные конфигурации.

Например, у гелия все уровни энергии разбиваются на две системы уровней: система уровней ортогелия, соответствующая параллельной ориентации спинов электронов и система уровней парагелия, соответствующая антипараллельной ориентации спинов. Нормальная конфигурация гелия 1s2 вследствие принципа Паули возможна только при антипараллельной ориентации спинов электронов, соответствующей парагелию.

**Заключение**

Итак, принцип запрета Паули объясняет, долго считавшуюся загадочной, периодическую структуру элементов, открытую Д.И.Менделеевым.

**Список литературы**

1. Детлаф А.А., Яворский Б.Н. Курс физики. - М., 1989.

2. Компанеец А.С. Что такое квантовая механика? - М., 1977.

3. Орир Дж. Популярная физика. - М., 1964.

4. Трофимова Т.И. Курс физики. - М., 1990.