Lecture 3 :

Examples :

Example/

Find the number of electrons in atoms which have the following level filled in the ground state

a) K and L shells, the 3s sub shell and one half of the 3p sub shell.

b) The K, L, M shells and the 4s, 4p and 4d sub shells

جد عدد الإلكترونات في الذرات التي لديها المستوى التالي المملوء في المستوى الارضي

أ) القشور K و L، و٣القشرة الثانوية 3s ونصف القشرة الثانوية 3P.

ب) الأغلفة K ، L، M والأغلفة الثانوية 4S، 4P و4D

Quantum mechanics and the quantum numbers

الميكانيك الكمي والأعداد الكمية

The orbital quantum number l determines the variation of the wave function of the electron as the angle θ changed. Also from quantum mechanics, the magnitude of the angular momentum L of the electron in the atom is given by

العدد الكمي المداري l يحدد تغيير دالة موجة الإلكترون مع تغيير الزاوية θ. أيضا من ميكانيك الكم، ان قيمة الزخم الزاوي L للإلكترون في الذرة يعطى بالعلاقة:

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

The z-component of the angular momentum L of the electron in the atom is given by

$$L_z = m_l\hbar$$

The angle θ which the vector L is rotating around

$$\cos\theta = \frac{L_z}{L} = \frac{m_l\hbar}{\sqrt{l(l+1)}\hbar} = \frac{m_l}{\sqrt{l(l+1)}}$$

$$S = s\hbar = 1/2\hbar$$

Where s; is the spin quantum number. It can take only the one value 1/2. As quantum mechanics developed, scientist found that the correct magnitude of S is not 1/2 ħ but is given by

حيث s؛ هو العدد الكمي البرمي. ويأخذ قيمة واحدة فقط وهي 1/2. ولما تطورت ميكانيك الكم وجد العلماء ان القيمة الصحيحة ل S لم تكن ħ 1/2 و انما تعطى بالعلاقة:

$$S = \sqrt{s(s+1)}\hbar = \frac{3}{2}\hbar$$

$$S_z = m_s\hbar \quad , \quad m_s = \frac{1}{2} or -\frac{1}{2}$$

And m_s is called the spin magnitude quantum number

Total angular momentum vector J

J=L+s

$$J = \sqrt{j(j+1)}\hbar$$

The magnitudes of the angular momentum L, S, J in units of ħ according to quantum mechanics, are given by

$$\frac{L}{\hbar} = \sqrt{l(l+1)} \quad , \frac{S}{\hbar} = \sqrt{s(s+1)} \quad , \frac{J}{\hbar} = -\sqrt{j(j+1)}$$

$$\cos\theta = \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{\sqrt{l(l+1)}\sqrt{s(s+1)}}$$

Example /4

Calculate the two possible orientations of the spin vector S with respect to a magnetic field direction.

احسب الإتجاهين المحتملين لمتجه البرم S تدور بالنسبة الى اتجاه المجال المغناطيسي.

Example /5

Consider a d electron in a one electron atomic system. Calculate the value of

افترض الكترون d في نظام ذري يحتوي على الكترون. احسب قيمة

i) *l*, s, j

ii) L, S, J

iii) Possible angles between L and S

Example 1:
What is the maximum number of the electrons in an atom that can share the following quantum numbers?
i) n, l, m_l, m_s ii) n, l, m_l iii) l iv) n?

ما هو اعظم عدد للإلكترونات في ذرة ما التي تشترك في الأعداد الكمية التالية؟

Solution

i)n, l, m_l, m_s

وفقا لمبدأ الإستبعاد لباولي فإنه لا يمكن لإلكترونين في نظام واحد ان يمتلكا نفس القيم للأعداد الكمية الأربعة فلهذا سيكون هناك الكترون واحد فقط يمتلك هذه الأعداد الكمية الأربعة.

ii) n, l, m_l

n=1

واحد فقط
n, l, m_l
1 0 0
2 1 0
2 1 1

Example 2:
How are electrons distributed in the various sub shells for n=3, give the quantum numbers in the first sub shell.
كيف تتوزع الإلكترونات في القشور الثانوية (الأغلفة او المدارات الثانوية) لل n=3 ، اعطي الأعداد الكمية في اول قشرة ثانوية (في اول غلاف او مدار ثانوي).

Solution
1)
n = 3 → l=0, 1, 2
2(2 l+1) = 2(2×0+1) = 2 electron
= 2(2×1+1) = 6 electrons
= 2(2×2+1) = 10 electrons
2) لإيجاد الأعداد الكمية في المدار الثانوي الأول:
n, l, j, m_j, m_l, m_s

$n = 3 \qquad l = 0$

$j = l + s$

$= 0 + 1/2 = 1/2$

$j = l - s \;\; = 0 - 1/2 = -1/2$ (يهمل)

$m_j = 2j + 1$

$= 2 \times 1/2 + 1 = 2 \qquad m_j = (1/2, -1/2)$

$m_l = 2l + 1 \longrightarrow m_l(0)$

$= 2 \times 0 + 1 = 1$

$m_s = +1/2, -1/2$

Example 3:

Find the number of electrons in atom which have the following level filled in the ground state

a) K and L shells, the 3s sub shell and one half of the 3p sub shell.

b) The K, L, M shells and the 4s,4p and 4d sub shells

جد عدد الإلكترونات في الذرة التي تمتلك المستويات المملوءة في المستوى الأرضي

a) الأغلفة K and L الغلاف الثانوي 3s ونصف الغلاف الثانوي 3p .

b) الأغلفة K, l, M والأغلفة الثانوية 4s, 4p, and 4d.

$K \rightarrow n = 1 \rightarrow 2n^2 = 2$ electrons

$L \rightarrow n = 2 \rightarrow 2n^2 = 8$ electrons

$M \rightarrow n = 3 \rightarrow 2n^2 = 18$ electrons

$4s \rightarrow l = 0 \rightarrow 2(2l + 1) = 2$ electrons

$4p \rightarrow l = 1 \rightarrow 2(2l + 1) = 6$ electrons

$3d \rightarrow l = 2 \rightarrow 2(2l + 1) = 10$ electrons

The total number of electrons in atom = 46 electrons

Example 4

Calculate the two possible orientations of the spin vector S with respect to a magnetic field direction.

احسب الإتجاهين المحتملين لمتجه البرم S بالنسبة لإتجاه المجال المغناطيسي

$$S=\sqrt{s(s+1)}\hbar=\frac{3}{2}\hbar,\quad S_z=m_s\hbar,\quad m_s=\frac{1}{2}\ or\ -\frac{1}{2}$$

For $m_s = 1/2$

$$\cos\theta=\frac{S_z}{S}=\frac{m_s\hbar}{\sqrt{s(s+1)}\hbar}=\frac{m_s}{\sqrt{s(s+1)}}$$

$$\cos\theta=\frac{m_s}{\sqrt{s(s+1)}}=\frac{\frac{1}{2}}{\sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)}}=\frac{1}{\sqrt{3}}\rightarrow\cos\theta=0.578$$

$\theta = 45.69^{o}$

For $m_s = -1/2$

$$\cos\theta=\frac{m_s}{\sqrt{s(s+1)}}=\frac{-\frac{1}{2}}{\sqrt{-\frac{1}{2}(-\frac{1}{2}+1)}}=\frac{-1}{\sqrt{3}}\rightarrow\cos\theta=-0.578$$

$\theta = 125.3^{o}$

Example 5

Consider a ' d' electron in a one electron atomic system. Calculate the value of

i) l, s, j
ii) L, S, J
iii) Possible angles between L and S

i) l, s, j

$l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \ldots\ldots$
$l = s, p, d, f, g, h, \ldots\ldots$
$l = 2 \quad s = 1/2$
$j = l + s \rightarrow \quad j = 2+1/2 = 5/2$
$j = l - s \rightarrow \quad j = 2-1/2 = 3/2$

ii) L, S, J

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar \quad \rightarrow \quad L = \sqrt{2(2+1)}\hbar = \sqrt{6}\hbar$$

$$S = \sqrt{s(s+1)}\hbar \quad \rightarrow \quad S = \sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)}\hbar = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar$$

For j= 5/2

$$J = \sqrt{j(j+1)}\hbar \quad \rightarrow \quad J = \sqrt{\frac{5}{2}(\frac{5}{2}+1)}\hbar = \frac{\sqrt{35}}{2}\hbar$$

For j= 3/2

$$J = \sqrt{\frac{3}{2}(\frac{3}{2}+1)}\hbar = \frac{\sqrt{15}}{2}\hbar$$

ii) Possible angles between L and S

For j= 5/2

$$\cos\theta_1 = \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{\sqrt{l(l+1)}\sqrt{s(s+1)}}$$

$$\cos\theta_1 = \frac{\frac{5}{2}(\frac{5}{2}+1) - 2(2+1) - \frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)}{\sqrt{2(2+1)}\sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)}} = \frac{8}{8.45} = 0.94$$

$$\theta = \cos^{-1}(0.94) \rightarrow \theta = 19.94^{\circ}$$

For j= 3/2

$$\cos\theta_2 = \frac{\frac{3}{2}(\frac{3}{2}+1) - 2(2+1) - \frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)}{\sqrt{2(2+1)}\sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)}} = \frac{-12}{8.45} = -1.42$$

$$\theta = \cos^{-1}(-1.42) \rightarrow \theta = 180^{\circ}$$

Example 6

Consider a ' f ' electron in a one electron atomic system. Calculate the value of

i) *l*, s, j
ii) L, S, J
iii) Possible angles between L and S

i) l, s, j
l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, ...
l = s, p, d, f, g, h, ...
l = 3 *s* = 1/2

l = 3 تتبع نفس الخطوات في المثال السابق مع الانتباه لقيمة

Q1 /

How are the electrons distributed in the various sub-shells for N shell?
Give the quantum numbers for the electron **in the third sub-shell**.

كيف تتوزع الإلكترونات في الأغلفة الثانوية المختلفة بالنسبة للغلاف N ؟
اعطي الأعداد الكمية للإلكترون في الغلاف الثانوي الثالث

K, L, M, N

n = 1, 2, 3, 4, 5 → n = 4→ l = 0, 1, 2, 3

$2(2l+1) = 2((2 \times 0)+1) = 2$ electrons

$2(2l+1) = 2((2 \times 1)+1) = 6$ electrons

$2(2l+1) = 2((2 \times 2)+1) = 10$ electrons

$2(2l+1) = 2((2 \times 3)+1) = 14$ electrons

The quantum numbers for the electron **in the third sub-shell**.

The third sub-shell → $l = 2$

n, l, j, m_j, m_l, m_s

n = 4 , $l = 2$ → $j = l + s$, $j = l - s$

$j = 2 + 1/2 = 5/2$ $j = 2 - 1/2 = 3/2$

$m_j = 2j + 1 = (2 \times 5/2) + 1 = 6$

m_j (- 5/2, - 3/2, -1/2, 1/2, 3/2, 5/2)

$m_j = 2j + 1 = (2 \times 3/2) + 1 = 4$

m_j (- 3/2, -1/2, 1/2, 3/2)

$m_l = 2l + 1 = (2 \times 2) + 1 = 5$

m_l = (-2, -1, 0, 1, 2)

ms= +1/2, -1/2

$n=2 \rightarrow l = n-1 = 2-1 = 1$

$K=1 \rightarrow l = 1-1 = 0$

$K=2 \rightarrow l = 2-1 = 1$, $l = 0,1$

Q2 /

How are the electron distributed in the various sub-shells for **L** shell?
Give the quantum numbers for the electron **in the second sub-shell**, taking into spin orbit interaction.

كيف تتوزع الإلكترونات في الأغلفة الثانوية المختلفة بالنسبة للغلاف L ؟
اعطي الأعداد الكمية للإلكترون في الغلاف الثانوي الثاني مع الأخذ بنظرالإعتبار التفاعل البرمي المداري

K, L, M, N

$n = 1, 2, 3, 4, 5 \rightarrow n = 2 \rightarrow l = 0, 1$

The quantum numbers for the electron **in the second sub-shell**.

The second sub-shell $\rightarrow$ $l = 1$

n, l, j, m_j, m_l, m_s

$n = 2$, $l = 1 \rightarrow$ $j = l + s$, $j = l - s$

$n = 2$, $l = 1$ تتبع نفس الخطوات في السؤال السابق مع الانتباه لقيمة

ملاحظات مهمه جدا!!!!!!!****

١)اذا طلب في السؤال : اوجد الأعداد الكمية الأربعة مع اهمال تأثير التفاعل البرمي المداري

(Find the numbers with the quantity of the four neglect the effect of the spin orbit interaction)

(n, l, j, m_j, m_s)

٢) اذا طلب في السؤال : اوجد الأعداد الكمية الأربعة مع تأثير التفاعل البرمي المداري

(Find the numbers with the quantity of the four taking into the effect of the spin orbit interaction)

(n, l, j, m_j, m_l, m_s)