

Оболочечная модель атомов и периодическая система элементов

© Потапов Алексей Алексеевич

Институт динамики систем и теории управления СО РАН

Ул. Лермонтова, 134. г. Иркутск, 664003. Россия. Тел.: (395) 251-17-79. E-mail: alex_p@icc.ru

Ключевые слова: атом, электронная конфигурация, оболочечная модель, поляризационный радиус, поляризуемость, энергия связи, потенциал ионизации, расстояние между оболочками.

Аннотация

Дается обоснование эмпирическому подходу к изучению внутриатомного строения, опирающемуся на данные измерения поляризуемости. На основании анализа имеющихся экспериментальных данных по энергиям связи, межоболочечным расстояниям и потенциалам ионизации атомов предлагается для обсуждения усовершенствованная оболочечная модель атома. Описание предлагаемой модели ведется в рамках основополагающих законов электростатики. Согласно данной модели каждая из оболочек атома формируется в результате кулоновского притяжения внешних электронов к остову атома; при этом положительный заряд остова (согласно теореме Гаусса) играет роль притягивающего центра, наподобие ядра атома водорода. Заполнение оболочек электронами осуществляется в соответствии с правилом равного отстояния электронов друг от друга; оно обеспечивает формирование высокосимметричных электронных конфигураций. На основании данной модели определены ее основные атомные константы – радиус и энергия связи большинства атомов таблицы Менделеева.

Введение

Наиболее приемлемой для понимания электронного строения многоэлектронных атомов является наглядная оболочечная модель, предложенная Н. Бором. Согласно теории Бора последовательное увеличение заряда ядра сопровождается соответствующим увеличением числа электронов, образующих электронные оболочки атома. Заряд ядра предопределяет порядковый номер элемента таблицы Д.И. Менделеева, а каждой оболочке соответствует свой период [1].

В настоящей работе оболочечная модель атома принимается в качестве отправного пункта для анализа электронной конфигурации атомов и для расчета радиуса и энергии связи атома, оставаясь в рамках классической электростатики. Ключевыми для нашего рассмотрения выступают закон Кулона, а также теорема Гаусса, согласно которой поток электрического поля через любую замкнутую поверхность однозначно определяется полным зарядом, заключенным в полости, охватывающей этот заряд [2]. Для нашего рассмотрения также важны концепция круговой и/или сферической симметрии атома и принцип неразличимости электронов, согласно которому все электроны данной оболочки равноправны и одинаковым образом связаны с ядром [3, 4]. Оболочечная модель дополнена предположением о высокосимметричной конфигурации электронов каждой из оболочек, удовлетворяющей условию минимума потенциальной энергии атома и обеспечивающей тем самым его устойчивость.

Усовершенствование оболочечной модели стало возможным в связи с новыми данными по радиусам a_e и энергиям связи \mathcal{E} атомов, полученным на основе данных измерения поляризуемости α этих атомов [5]. Отличительной особенностью данного подхода является то, что используемый при этом радиус представляет действительное, точно заданное расстояние между ядром и валентными электронами. Величины a_e и \mathcal{E} характеризуют геометрию атома и его устойчивость и по своей сути являются атомными константами. Рассмотрение их в методологии «от простого к сложному», т.е. в последовательности от атомов водорода и гелия к последующим многоэлектронным атомам, позволяет выявить ряд закономерностей строитурообразования атомов в зависимости от заряда ядра и числа электронов на оболочках.

1. Поляризационный метод изучения электронного строения атомов

Для исследования атомной структуры широкое распространение находят методы оптической и рентгеновской спектроскопии [3, с. 41 и с. 638]. Однако получаемые с помощью этих методов оптические и рентгеновские спектры дают лишь косвенную информацию о действительном распределении электронов в основном (невозмущенном) состоянии атомов. На раннем этапе становления атомной физики была предпринята попытка применения рефрактометрического метода для исследования атомов, основанного на связи поляризуемости атомов (данные о которой получают на основании измерений показателя преломления n или диэлектрической восприимчивости χ веществ в газовой фазе) с их геометрическими размерами [5, 6]. Рефрактометрический метод не получил своего достойного развития. Причиной тому явилось, прежде всего, отсутствие корректных уравнений связей между поляризуемостью атома α и его радиусом a . Немаловажную роль в этом отношении сыграло противоречие, якобы возникшее между классическим ($\alpha = a^3$) и квантовомеханическим ($\alpha = 4,5a_B^3$, где a_B – радиус Бора) описанием атома водорода, проявляющееся в различии коэффициентов (1 и 4.5) в соответствующих уравнениях связи между α и a . В настоящее время данное противоречие удалось преодолеть, благодаря уточнению физического смысла радиуса атома. Появились систематизированные данные по поляризуемостям атомов. Предпринята достаточно успешная попытка распространить уравнение для водородоподобных атомов на многоэлектронные атомы [5]. Все это подвигло автора вернуться к анализу возможностей рефрактометрического метода в приложении его к исследованиям электронного строения атома.

Исходным для нашего рассмотрения принято концептуальное положение, заключающееся в том, что именно явление деформационной поляризации выступает в качестве источника первичной информации об электронном строении атомов. А количественным выражением данного свойства выступает поляризуемость атома, характеризующая способность электронных оболочек атомов к упругой деформации под действием внешних электрических полей. Поляризуемость α входит коэффициентом пропорциональности между диэлектрической восприимчивостью χ и атомной плотностью N :

$$\chi = \alpha N. \tag{1}$$

В общем случае величина χ является функцией «состава» N , «структуры» s и «энергии связи» U . Данную задачу можно существенно упростить, если обеспечить условие малости межатомных взаимодействий (т.е. задать $U \rightarrow 0$). На практике это достигается, благодаря выполнению измерений величин χ и N в газовой фазе при относительно

небольших давлениях, т.е. при условии $\alpha = \lim_{N \rightarrow 0} \frac{\chi}{N}$ [5, 7]. С другой стороны, величина χ

входит в материальное уравнение диэлектрической поляризации в виде

$$P = \chi E, \tag{2}$$

где P – так называемая поляризация,
 E – напряженность внешнего электрического поля.

Уравнение (2) является частным случаем общего соотношения $x = \chi X$, определяющего эмпирический путь изучения вещества, который заключается в установлении характера отклика x вещества на внешнее воздействие X ; величина χ – это обобщенная восприимчивость, являющаяся функцией отклика x и несущая исходную информацию о строении вещества [7]. Обобщенная восприимчивость χ как количественная мера обобщенного свойства представляет одно из главных свойств (по признаку воздействующего физического поля X) из числа механических, тепловых, электрических, магнитных и оптических свойств [7]. Данная классификация применима и в отношении к атомам с учетом специфики

эксперимента; она заключается в том, что измерение величины χ должно выполняться в газовой фазе при относительно невысоком давлении. В этих условиях «механическая» восприимчивость и соответственно «механическая поляризуемость» оказываются исчезающе малыми (поскольку механическое воздействие возможно только через посредство механического контакта между атомами, что в свою очередь должно предполагать наличие межатомных взаимодействий). Понятие «тепловой поляризуемости» по отношению к отдельному атому не применимо по тем же причинам; величина χ , измеренная при низком давлении газа, соответствующем его идеальному состоянию, не чувствительна к атомной структуре. Оставшиеся три поляризуемости можно объединить по признаку единства их электромагнитной природы; на практике ее называют электромагнитной поляризуемостью или просто поляризуемостью α .

Вывод о значимости поляризуемости α как источника эмпирической информации о внутриатомном строении непосредственно следует из того факта, что и поле, и вещество имеют одинаковую электромагнитную природу; данное обстоятельство играет решающую роль в формировании наблюдаемого в эксперименте отклика в виде поляризации по (2), количественно определяемого поляризуемостью атомов. Опыт также подтверждает данный вывод; все прецизионные измерения поляризуемости выполнены с помощью электромагнитных методов [5, 7].

Осознание того факта, что информация о структуре атомов содержится в его поляризуемости, заставляет вновь обратиться к анализу настоящей проблемы. В уравнении (1) поляризуемость α представляет собой исходную величину, причинно обусловленную электронным строением атома. Как всякое «свойство», поляризуемость атома является функцией «состава» и «структуры». Под «составом», в данном случае надо понимать общее число электронов и ядро, имеющее заряд eZ , где Z – порядковый номер элемента периодической таблицы Менделеева. Для каждого элемента «состав» атома однозначно определен и его можно считать заданным. Что касается «структуры» атома, то под этим термином следует понимать его электронную конфигурацию (т.е. взаимное расположение электронов в атоме). Именно «структура» атома, непосредственным образом связана с выбором приемлемой модели атома, как основы построения теории электронного строения атома.

При всем многообразии моделей электронного строения атомов в основе их рассмотрения лежит основополагающая оболочечная модель, в начальном варианте предложенная Н. Бором [1, 3, 8]. Согласно данной модели электроны в атоме распределены вокруг своего ядра по оболочкам; устойчивость атома достигается за счет вращательного движения электронов в центральном поле ядра атома. Безусловным подтверждением оболочечной модели атомов служит периодичность физико-химических свойств элементов в таблице Д.И. Менделеева как следствие последовательного заполнения «разрешенных» энергетических уровней атома, скачкообразный характер поведения потенциалов ионизации в зависимости от порядка ионизации при переходе от одного периода к другому, а также эмпирический закон Мозли [1, 8]. Однако модель Н. Бора, также как и ее последующие модификации не смогли раскрыть внутреннего устройства атомов и объяснить механизм их образования.

Предлагаемый подход к исследованию электронного строения атомов основан на сведении многочастотной задачи к двухзарядовой системе, представляющей квазиточечный заряд $+eN$ остова атома и заряд внешней электронной оболочки. Такое сведение достигается благодаря применению теоремы Гаусса, согласно которой заряд на поверхности замкнутой полости (сферы) равен сумме всех положительных и отрицательных зарядов внутри этой полости, а результирующий заряд на сфере эквивалентен точечному заряду, помещенному в центр данной сферы [2]. При таком подходе атом рассматривается как система из двух взаимодействующих между собой зарядов – положительно заряженного остова с электронами внешней оболочки. При заданном «составе» атома решаемая задача сводится к установлению электронной конфигурации («структуры») внешней оболочки атома. Присущая атомам

круговая и/или сферическая симметрия предполагает возможность описания их геометрии с помощью только одного параметра – радиуса a . Переход от поляризуемости α к радиусу осуществляется с помощью известного соотношения [5, 6, 9]

$$\alpha = ka^3, \quad (3)$$

где k – коэффициент, зависящий от электронного строения атома.

2. Радиус атомов по данным измерения поляризуемости

В настоящее время для описания размеров атома используются около десятка различного типа атомных радиусов, таких как ван-дер-ваальсовы, орбитальные, кинетические, ковалентные и др. Каждый из них несет достаточно условный смысл, соответствующий применяемому методу регистрации или принимаемой модели атома. Сам факт такого многообразия радиусов обычно связывают с вероятностным характером волновых функций, принимаемых для квантомеханического описания электронного строения атома. Согласно волновым представлениям атомы не имеют четких границ, а его радиус к некоторой условной сфере, в которой заключена «подавляющая часть электронной плотности атома» (90-98%) [3, с. 40]. В то же время, наблюдаемое различие численных значений между разными видами радиусов может достигать 100% и более. Создалась парадоксальная ситуация, когда такое основополагающее понятие атомной физики как атомный радиус оказалось таким размытым и по своей сути не определенным.

Предшествующий анализ и многочисленные исследования подтверждают простую связь между поляризуемостью и радиусом атомов по (3) [5, 6, 9]. Ее можно объяснить тем, что в силу сферической симметрии атомов у них проявляется только один вид поляризации - деформационный. С другой стороны, опять же, благодаря сферической симметрии атомов, для описания их структуры достаточно лишь одного параметра – радиуса. По имеющимся литературным данным коэффициент k в (3) может быть как равным, а также меньшим или большим единицы. Наибольшее распространение на практике имеет случай $k = 1$, для которого имеется косвенное обоснование, опирающееся на модели Томсона и Моссотти для атома водорода. Квантомеханические расчеты для атома водорода дают $k = 4,5$. Такая неопределенность коэффициента k , надо полагать, обусловлена неопределенностью входящего в (3) радиуса a . С другой стороны, уравнение (3) представляет собой описание метода измерения поляризуемости и тем самым предопределяет способ формирования соответствующего ему радиуса, который получил название «поляризационный радиус» a_e [5]. В настоящее время понятие «поляризационный радиус» в семействе известных типов атомов отсутствует; это можно объяснить отсутствием до самого последнего времени соответствующей методологии и корректного уравнения связи между величинами α и a_e . В этом отношении важно раскрыть содержание и физический смысл поляризационного радиуса.

В первом приближении атомную систему можно представить в виде мгновенного диполя, образуемого связанными между собой эффективным зарядом q_+ положительного ядра (или остова атома) и эффективным зарядом q_- валентных электронов, которые находятся на расстоянии a_e друг от друга, так что $p = a_e q$ (в приближении $q_+ = q_- = q$). Диполь представляет жестко связанную систему, прочность которой определяется энергией связи между ядром и внешними электронами; она достаточно велика и имеет порядок 10 эВ. Внешняя оболочка атома радиусом a_e действует как экран, препятствуя проникновению внешнего поля E вглубь атома. При этом на заряды диполя действует пара разнонаправленных сил $F_+ = q_+ E$ и $F_- = q_- E$, которые вызывают его растяжение (или сжатие). Надо особо подчеркнуть то, что точками приложения сил F_{\pm} являются квазиточечные заряды q_{\pm} , которые, находясь на расстоянии a_e между ядром и валентными электронами, устанавли-

вают естественную границу атома. Т.е. неопределенность относительного положения ядра и электронов ограничивается лишь степенью локализации их зарядов. Экспериментальные средства позволяют регистрировать энергетические состояния атомов с погрешностью на уровне до 10^{-10} и лучше. В результате вращательного движения электронов по некоторым заданным орбитам на достаточно больших временных интервалах образуется квазинепрерывная сфера радиусом a_e , т.е. внешняя граница атома оказывается однозначно заданной поляризационным радиусом a_e . Поляризация атомов вызывает смещение внешних электронов относительно ядра (остова атома) на $2\Delta a$, которое приводит к возникновению у атомов индуцированных дипольных моментов $p_i = 2\Delta a q$, совокупность которых формируют макроскопическую поляризацию P и соответствующую ей и доступную для измерения диэлектрическую восприимчивость χ , которая, в свою очередь, непосредственно связана с поляризуемостью α . Т.о., явление электрической поляризации позволяет установить происхождение поляризационного радиуса и природу связи этого радиуса с измеряемой величиной - поляризуемостью. При этом константность поляризуемости предопределяет поляризационному радиусу статус атомной константы.

Существенным представляется то, что рассмотренный выше механизм формирования поляризации лежит в основе экспериментального наблюдения многочисленных поляризационных явлений и эффектов. Данное обстоятельство служит неоспоримым эмпирическим доказательством фиксированных размеров атома. Действительно, поляризация как отклик системы на воздействующее поле E регистрируется в виде совокупности индуцированных дипольных моментов p_i всех микрочастиц системы, т.е. $P = \sum p_i$. В линейной области взаимодействия вещества и поля они связаны эмпирическим соотношением $p_i = \alpha E$, где $\alpha = const$. Константность величины α подтверждается всем опытом экспериментальных исследований в широком диапазоне напряженностей поля E , а также согласием данных измерения поляризуемостей, получаемых в самых разных экспериментах по наблюдению поляризационных явлений, таких как оптические спектры, светорассеяние, преломление и отражение света на границе двух сред, резонансные явления дисперсии и поглощения электромагнитных волн и др. [5]. В нелинейной области взаимодействия атомов с полями высокой напряженности E поляризуемость становится функцией напряженности внешнего поля, т.е. $\alpha(E)$, что также имеет надежное экспериментальное обоснование [10]. Известные явления и эффекты с наложением электрического поля E (такие как эффект Керра, Штарка, Поппельса и др.) также могут служить подтверждением пространственной локализации электронов в пределах сферы радиусом a_e .

Убедительным аргументом в пользу заданных размеров радиуса может служить его взаимосвязь с энергией связи ε (и потенциалом ионизации). Действительно, энергия связи ε (потенциал ионизации I) имеет чисто кулоновскую природу взаимодействия (см. ниже), так что $\varepsilon(\approx I) = e^2/d$, где d – расстояние между эффективными зарядами e в атоме, количественная определенность которого (а соответственно и радиуса атома) является логическим следствием определенности измеряемых величины ε и I . Итак, вся совокупность поляризационных явлений может служить убедительным доказательством в пользу модели атома как упругой сферической оболочки с четко выраженной границей.

Еще одним эмпирическим доказательством замкнутого объема атома может служить наблюдаемое у атомов так называемое сродство к электрону (или протону), заключающееся в способности атомов притягивать к себе электроны (или протоны) [11]. Данное обстоятельство предполагает, что на поверхности атомов имеются относительно небольшие эффективные электрические заряды. Их происхождение связано с неполной взаимной компенсацией зарядов ядра q_+ и электронов q_- на радиусе a . Сродству электронов соответствует разностный заряд $\Delta q_s = q_+ + q_- \geq 0$. Для систем со сферически симметричным распределением заряда соглас-

но теореме Гаусса такой суммарный заряд эквивалентен точечному положительному заряду Δq_s , помещенному в центр атома [2]. Этот заряд обладает электрическим потенциалом

$$\varphi = \frac{\Delta q_s}{a} \text{ с напряженностью электрического поля } E = \frac{\Delta q_s}{a^2}, \text{ благодаря которым у атомов и}$$

проявляется сродство к электрону. Такое распределение зарядов $\Delta q_s > 0$ предполагает, что за пределами сферы с радиусом a_e какие-либо проявления электронного заряда q_- полностью исключены. Аналогичные рассуждения справедливы и для атомов, обладающих сродством к протону; изменяется только направление действия атомного поля.

Все приведенные выше доводы дают право говорить о том, что для описания атома необходимо и достаточно иметь всего один «абсолютный» радиус. Имеются все основания для того, чтобы в качестве такого радиуса был принят поляризационный радиус a_e . Граница атома не размыта, как это следует из представлений о диффузной природе волновых функций атомов, но строго задана в соответствии с определением поляризационного радиуса. Введение в обиход действительного атомного радиуса a_e позволяет упорядочить всю систему «атомных радиусов» и обеспечить саму возможность установления количественных связей между атомами как исходных строительных элементов молекул, кластеров и собственно вещества.

Чтобы применить уравнение (1) для расчета поляризационных радиусов атомов, необходимо определить коэффициент k . Рассмотрим сначала простейшие водородоподобные системы.

Известно, что во внешнем электрическом поле E атомы приобретают индуцированный дипольный момент

$$p_i = \alpha E, \tag{4}$$

причем $p_i = q_2 \Delta a$.

В результате поляризации атома его электронная оболочка деформируется, что приводит к возмущению его исходного состояния; новое равновесное состояние атома достигается, благодаря противодействию возвращающей силы со стороны заряда ядра (остова) $F = q_- \Delta E_+$, где q_- – заряд внешних электронов; ΔE_+ – приращение напряженности поля заряда ядра(остова) q_+ , вызванное поляризацией атома, так что

$$\Delta E_+ = \frac{q_+}{a_e^2} - \frac{q_+}{(a_e + 2\Delta a)^2} \approx \frac{q_+}{a_e^2} \frac{4\Delta a}{a_e},$$

где a_e – эффективный радиус атома в исходном состоянии.

Таким образом, с одной стороны, на водородоподобный атом действует пара сил внешнего поля $F_{\pm} = q_- E = \frac{q_- 2\Delta a q_-}{\alpha}$ (здесь учтено уравнение (2)), а с другой, – возвращающая

сила F . Решение уравнения баланса $F = F_{\pm} \approx \frac{q_+ q_-}{a_e^2} \frac{4\Delta a}{a_e} = \frac{q_- 2\Delta a q_-}{\alpha}$ приводит к выражению

для поляризуемости водородоподобных систем

$$\alpha = \frac{a_e^3}{2}. \tag{3}$$

Этот результат отличается от результата, полученного в рамках моделей Томсона и Моссотти [9] в 2 раза (см. выше); это объясняется тем, что при выводе (3) было учтено действие удвоенной силы на атомный диполь со стороны электрического поля. Расчеты по вновь полученной формуле (3) оказались сопоставимыми с квантовомеханическими расчета-

$$\alpha_H = \frac{9}{2} a_B^3, \quad (4)$$

где a_B – борковский радиус.

В свою очередь, рассчитываемая по формулам (3) и (4) поляризуемость согласуются с экспериментально определяемой величиной $\alpha_H = 0,67E^3$ [12] с погрешностью около 10%. Тем самым упомянутое выше противоречие между классическим и квантовомеханическим описанием снимается. Просто уравнения (3) и (4) содержит в себе разные радиусы a_B и a_e ; с одной стороны, борковский радиус по определению представляет собой наиболее вероятное положение электрона относительно ядра [2], а, с другой, – поляризационный радиус – максимальное расстояние между ядром и электроном. Здесь уместно отметить, что между орбитальным радиусом a_0 (для атома водорода $a_0 = a_B$) и поляризационным радиусом a_e выполняется соотношение $2a_0 = a_e$ [5]. Подстановка $a_e = 2a_B$ в (4) дает $\alpha_H = \frac{9}{16} a_e^3$, что дает практическое совпадение с (3).

В силу структурного подобия, выражение (3) можно распространить на атомы щелочных металлов (атомы первой группы таблицы Менделеева) в приближении их жестких остовов. Действительно, согласно теореме Гаусса [2] заряд остова атома равен квазиточечному заряду $+e$ как результату суммирования заряда ядра $+eZ$ и заряда электронов $-e(Z-1)$, находящихся на внутренних оболочках. Это означает, что взаимодействие зарядов остова и внешних электронов атомов щелочных металлов может быть сведено к взаимодействию двух элементарных зарядов, наподобие атому водорода, и к ним может быть применено уравнение (3). Но с одной немаловажной оговоркой. При переходе к атомам щелочных металлов прямое электрон-ядерное взаимодействие должно быть заменено на взаимодействие заряда остова атома с его внешним электроном (согласно теореме Гаусса). При этом, наблюдаемая в эксперименте энергия связи внешних электронов в атомах определяется расстоянием d между внешними электронами и их остовом, но не их радиусом. Поэтому в приведенном выше уравнении баланса сил F и F_{\pm} радиус a_e следует заменить эффективным расстоянием d между зарядами остова и внешней оболочкой. Эти величины связаны соотношением

$$a_n = d_n + a_{\text{ост.}}, \quad (5)$$

где $a_{\text{ост.}}$ – радиус остова атома; d_n – эффективное расстояние между остовом атома n -го периода и внешним электроном.

Замена a_e на d_n приводит к уточнению формулы (3), так что

$$\alpha = \frac{d_n^3}{2} \quad (6)$$

Для гелийподобных систем по аналогии с водородоподобными системами можно составить уравнение баланса $\frac{4q_-^2}{a_e^2} \cdot \frac{\Delta a}{a_e} = q_- E = \frac{q_-^2 4\Delta a}{\alpha}$, в котором принято эффективное приращение $2\Delta a$, а также индуцированный момент $p_i = q_- 4\Delta a$. Решение уравнения баланса сил дает

$$\alpha = a_e^3. \quad (7)$$

Таблица. Данные по поляризуемостям α ; поляризационным a_n , орбитальным a_0 , ван-дер-ваальсовым a_B , ковалентным a_k радиусам; энергиям связи \mathcal{E} и потенциалам ионизации I .

Элементы	α	d_n	a_n	$2a_0$	a_B	a_k	\mathcal{E}	I
Li	24.3	3.5	3.9	3.17	2.46	1.34	4.4	5.39
Be	5.60	1.78	2.1	2.08	2.14	0.98	8.06	9.32
B	3.03	1.45	1.7	1.55	2.06	0.85	9.95	8.30
C	1.76	1.21	1.4	1.24	1.97	0.77	12.0	11.3
N	1.10	1.03	1.2	1.04	1.88	0.73	14.0	14.5
O	0.802	0.93	1.1	0.90	1.78	0.73	15.5	13.6
F	0.557	0.823	0.04	0.79	1.68	0.71	17.5	17.4
Ne	0.395	0.734	0.84	0.71	1.544	-	19.6	21.6
Na	24.1	3.5	3.7	3.43	2.68	1.65	4.1	5.14
Mg	10.6	2.20	2.4	2.46	2.41	1.42	6.55	7.65
Al	8.34	2.03	2.2	2.62	2.34	1.29	7.1	5.99
Si	5.38	1.75	1.9	2.14	2.27	1.18	8.2	8.15
P	3.63	1.54	1.7	1.84	2.20	1.11	9.35	10.5
S	2.90	1.43	1.6	1.62	2.13	1.03	10.1	10.4
Cl	2.18	1.30	1.5	1.45	2.05	0.99	11.1	13.0
Ar	1.64	1.18	1.3	1.32	1.88	-	12.6	15.8
K	43.4	4.3	5.0	4.3	3.07	2.0	3.4	4.34
Ca	25	2.92	3.6	3.4	2.79	1.73	4.9	6.11
Sc	16.9	2.56	3.2	3.1	2.59	1.44	5.6	6.56
Ti	13.6	2.38	3.0	3.0	2.37	1.35	6.05	6.82
V	11.4	2.25	2.8	2.8	2.27	1.31	6.3	6.74
Cr	6.8	1.89	2.4	2.9	2.23	1.32	7.6	6.77
Mn	8.6	2.05	2.6	2.6	2.22	1.28	7.2	7.44
Fe	7.5	1.95	2.4	2.4	2.21	1.31	7.35	7.87
Co	6.8	1.89	2.3	2.3	2.21	1.24	7.6	7.86
Ni	6.5	1.86	2.3	2.3	2.20	1.20	7.8	7.63
Примечание: величины α – в ед. 10^{24} см^3 ;								
a_n, a_0, a_B, a_k – в ед. Å ; \mathcal{E} и I – в ед. эВ								

продолжение таблицы

Cu	6.1	1.83	2.2	2.3	2.24	1.12	7.9	7.73
Zn	7.08	1.92	2.3	2.1	2.27	1.23	7.6	9.39
Ga	8.12	2.01	2.4	2.5	2.44	1.25	7.2	6.0
Ge	6.07	1.82	2.2	2.2	2.42	1.22	7.9	7.9
As	4.31	1.62	2.0	2.0	2.34	1.23	8.9	9.8
Se	3.77	1.36	1.9	1.8	2.27	1.19	9.3	9.75
Br	3.05	1.45	1.8	1.7	2.20	1.14	9.9	11.8
Kr	2.48	1.36	1.7	1.4	2.01	-	10.7	14.0
Rb	47.3	4.4	5.9	4.6	3.23	2.12	4.0	4.2
Sr	27.6	3.02	4.4	3.7	2.98	1.89	4.75	5.7
Y	22	2.8	3.8	3.4	2.69	1.62	5.2	6.4
Zr	18	2.6	3.6	3.2	2.52	1.53	5.5	6.6
Nb	14	2.4	3.4	3.2	2.41	1.36	6.0	6.7
Mo	13	2.35	3.2	3.0	2.37	1.33	6.3	7.2
Tc	10	2.15	3.0	2.6	2.34	1.34	6.6	7.3
Ru	8.6	2.05	2.9	2.9	2.32	1.31	7.0	7.3
Rh	7.6	1.95	2.8	2.7	2.32	1.27	7.3	7.5
Pd	6.9	1.9	2.7	-	2.35	1.30	7.6	8.4
Ag	6.3	1.85	2.6	2.6	2.41	1.27	7.8	7.6
Cd	6.0	1.8	2.5	2.4	2.48	1.36	8.05	9.0
In	4.5	1.65	2.4	2.8	2.62	1.45	8.7	5.8
Sn	4.4	1.65	2.4	2.5	2.57	1.40	8.7	7.3
Sb	4.0	1.6	2.3	2.4	2.50	1.43	9.1	8.6
Te	3.9	1.6	2.3	2.2	2.42	1.40	9.2	9.0
I	3.9	1.6	2.3	2.1	2.34	1.33	9.2	10.5
Xe	4.04	1.59	2.3	2.0	2.18	-	9.4	12.1

Корректность данного соотношения подтверждается хорошим согласием рассчитываемой величины энергии связи на основании данных d по (6) и экспериментальными данными по потенциалам ионизации (см. таблицу). Полученную формулу можно распространить на атомы 2-й группы таблицы Менделеева; такой переход от гелийподобных систем к атомам щелочноземельных элементов возможен только в приближении жестких остовов. При этом необходимо также учесть оболочечное строение атомов и осуществить замену в уравнении (7) величины a_e на d_n , так что

$$\alpha = d_n^3 . \quad (8)$$

Можно показать, что данное соотношение применимо и к остальным атомам таблицы Менделеева в приближении изотропного (сферического) распределения зарядов внешней оболочки. Действительно, в модели упругой сферы-оболочки эффективное приращение ее размера в общем случае равно $2\Delta a_{эф}$; ему соответствует индуцированный дипольный момент

$$p_i = q_- 4\Delta a_{эф} \text{ и уравнение баланса сил } \frac{4q_-^2}{a_e^2} \cdot \frac{\Delta a_{эф}}{a_e} = q_- E = \frac{q_-^2 4\Delta a_{эф}}{\alpha}.$$

Решение данного уравнения приводит к универсальному соотношению (8), применимому ко всем неводородоподобным атомам. Фактически оно совпадает с формулой, полученной в моделях Томсона и Моссотти [9]. На данном этапе исследования поляризационного метода, по-видимому, целесообразно ограничиться приведенными выше уравнениями (3), (6), (7) и (8) и принять их в качестве исходных уравнений для установления связи между поляризуемостью и радиусом атомов. Согласно (5) для определения радиуса атома необходимо также знать радиус остова $a_{ост.}$, который, очевидно, складывается из радиуса первой K -оболочки и суммы межоболочечных расстояний $d_{1-2}, d_{2-3}, d_{3-4} \dots$, т.е.

$$a_{ост.} = a_1 + d_{1-2} + d_{2-3} + d_{2-3} + d_{3-4} + \dots \quad (9)$$

Радиус a_1 K -оболочки определяется в результате прямого кулоновского взаимодействия ядра атома с его двумя внешними электронами, а также с учетом взаимного отталкивания этих электронов друг от друга. В этом случае энергию K -оболочки \mathcal{E}_1 можно представить в виде

$$\mathcal{E}_1 = \frac{e^2 (Z^2 - Z)}{2a_B}, \quad (10)$$

где Z – порядковый номер атома, a_B – боровский радиус.

С другой стороны, энергия \mathcal{E}_1 связана с радиусом a_1 универсальным образом через посредство соотношения $\mathcal{E} = -\frac{e^2}{a}$ (см. ниже), так что

$$a_1 = \frac{e^2}{\mathcal{E}_1} = \frac{2a_B}{\sqrt{Z^2 - Z}} \quad (11)$$

Здесь учтен эффект кулоновского сжатия оболочки, который наглядно можно представить с помощью известного соотношения для водородоподобных атомов $a = \frac{2a_B}{Z}$. Входящие в (9) межоболочечные расстояния можно найти, используя эмпирический закон Мозли [8, 13], представленный в виде

$$\mathcal{E}_{nm} = \mathcal{E}_H (Z - \delta_{nn})^2 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right), \quad (12)$$

где \mathcal{E}_H – энергия связи атома водорода; \mathcal{E}_{nm} – энергия внутриатомного перехода $n \rightarrow m$ между соответствующими оболочками; δ_{nm} – константа перехода.

Выражение (12) можно интерпретировать следующим образом. Оно представляет разность энергий, соответствующих состояниям n и m . Каждая из этих энергий – это результат кулоновского взаимодействия положительного заряда $(Z - \delta)e$ на соответствующей оболочке и заряда электронов $(Z - \delta)e$, находящихся за пределами данной оболочки, разделяемых расстоянием $2a_B n^2$ (или $2a_B m^2$). Такое понимание закона Мозли является следствием

ОБОЛОЧЕЧНАЯ МОДЕЛЬ АТОМОВ И ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ЭЛЕМЕНТОВ _____ 1-23
 применения теоремы Гаусса, согласно которой заряды на оболочках $(Z - \delta)e$ можно рассмат-
 ривать как точечные заряды. Энергия перехода \mathcal{E}_{nm} и соответствующее ему межоболочечное
 расстояние d_{nm} , как уже отмечалось выше, взаимосвязаны между собой наподобие (11)

$$d_{nm} = \frac{e^2 (Z - \delta_{nm})}{\mathcal{E}_{nm}} \quad (13)$$

Распишем выражение (13) для искомых переходов:

$$\left. \begin{aligned} d_{12} &= \frac{e^2 (Z - 1)}{\mathcal{E}_{12}} = \frac{4}{3} \cdot \frac{e^2}{\mathcal{E}_H (Z - 1)}; \quad n = 1, m = 2, \delta_{nm} = 1; \\ d_{23} &= \frac{e^2 (Z - 7)}{\mathcal{E}_{23}} = \frac{36}{5} \cdot \frac{e^2}{\mathcal{E}_H (Z - 7)}; \quad n = 2, m = 3, \delta_{nm} = 7; \\ d_{34} &= \frac{e^2 (Z - 7)}{\mathcal{E}_{34}} = \frac{144}{7} \cdot \frac{e^2}{\mathcal{E}_H (Z - 7)}; \quad n = 3, m = 4, \delta_{nm} = 7; \\ d_{45} &= \frac{e^2 (Z - 17)}{\mathcal{E}_{45}} = \frac{400}{9} \cdot \frac{e^2}{\mathcal{E}_H (Z - 17)}; \quad n = 4, m = 5, \delta_{nm} = 17; \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

На основании формул (5), (13) и (14) для примера были рассчитаны радиусы ряда атомов, которые представлены в таблице. Отличие этих данных от полученных ранее в работе [5] минимально для атомов 2-го и 3-го периодов (около 10%) и возрастает для более «тяжелых» атомов, достигая 50% для ксенона. При этом основной вклад в радиус вносит расстояние между внешними электронами и остовом атома; внутренние межоболочечные расстояния выступают как поправки к величине d_n . Уточненные в настоящей работе данные по радиусам несколько отличаются от данных, полученных ранее в работе [5]. Уточнения касаются, в первую очередь, атомов щелочных металлов, для которых применена формула (6), а также уточнения в связи с введением поправок на конечные размеры остовов атомов. Вместе с этим, надо иметь в виду, что и новые данные по радиусам не претендуют на высокую точность; они получены в приближении абсолютно жестких остовов атомов (к сожалению, рассчитать поправки на конечную упругость оболочек пока не удастся; они оказываются весьма заметными для атомов четвертого и последующих периодов таблицы Менделеева). Можно обсуждать и другие погрешности полученных уравнений. Однако, на данном этапе, по мнению автора, более важным представляется необходимость в обсуждении и предварительной апробации концепции «абсолютного» радиуса атома. Тем более, что достигнутая точность уже сейчас позволяет провести сравнительный анализ данных поляризованного радиуса a_n с другими радиусами, в первую очередь с орбитальным a_0 , ван-дер-ваальсовым a_B и ковалентным a_K . Они также приведены в таблице. Сравнение этих радиусов показывает, что для большинства атомов таблицы Менделеева выполняется неравенство $a_B > a_e > a_K$. Оно является отражением физического смысла, заложенного в каждом из этих радиусов: ван-дер-ваальсов радиус (как половинное расстояние между атомами в конденсированном состоянии вещества) приближается к действительному радиусу атома в гипотетическом пределе малости межатомных взаимодействий, а ковалентный радиус (как половинное расстояние между атомами в составе молекулы) приближается к действительному радиусу атома в приближении малости химической связи. Признание поляризованного радиуса a_e как действительного радиуса атома позволяет внести в сложившуюся на сегодняшний день систему атомных радиусов вполне определенный порядок и установить количественные взаимосвязи между ними. Поляризованный радиус a_e по определению представляет естественную границу внешней электронной оболочки атома и с полным на то основанием может претендовать на роль «абсолютного» радиуса атома.

3. Энергия связи атомов

Энергия связи атома предопределяет формирование всех физических свойств атома, в том числе таких уникальных как устойчивость, воспроизводимость и самотождественность. Единственным в настоящее время измеряемым параметром, характеризующим энергию атома в основном состоянии, является потенциал ионизации I . По определению он представляет собой энергию, необходимую для отрыва электрона от свободного атома. Потенциалы ионизации атомов известны с достаточно высокой точностью и стандартизированы [11]. Под потенциалом ионизации зачастую понимается энергия связи \mathcal{E} электрона с ядром (в приближении малости эффекта перестройки электронной оболочки атома в результате удаления электрона). В этом случае потенциал ионизации $\mathcal{E} = I$ выступает как центральное поле, обеспечивающее атому сферическую симметрию. Как уже отмечалось выше, данное обстоятельство означает, что для описания геометрии атома достаточно иметь всего один параметр – радиус атома. Поэтому энергия \mathcal{E} и радиус a атома внутренне взаимосвязаны, что собственно подтверждается одним из основополагающих уравнений атомной физики – уравнением для энергии связи электрона с ядром атома водорода

$$\mathcal{E} = -\frac{e^2}{2a_B}, \quad (15)$$

где a_B – боровский радиус, e – элементарный заряд.

Надо полагать, что аналогичное соотношение может быть получено и для многоэлектронных атомов. В этой связи обратимся к исходному уравнению для полной энергии атома. В качестве рабочей модели примем оболочечную двухзарядовую модель атома, согласно которой в соответствии с теоремой Гаусса внутриатомные взаимодействия могут быть сведены к кулоновскому взаимодействию положительно заряженного остова атома с электронами его внешней оболочки.

Запишем полную энергию электронов внешней оболочки многоэлектронного атома в центральном поле остова как сумму кинетической \mathcal{E}_K и потенциальной \mathcal{E}_P энергий

$$\mathcal{E}(d) = \mathcal{E}_K + \mathcal{E}_P = \frac{mv^2}{2} - \frac{e^2 N_n}{d} \quad \text{или} \quad \mathcal{E}(d) = \frac{L^2}{2md^2} - \frac{e^2 N_n}{d}, \quad (16)$$

где d – эффективное расстояние между остовом и внешними электронами;
 v – орбитальная скорость движения электрона с массой m ; L – момент количества движения, равный $L = mvd$; N_n – число электронов на внешней оболочке (n -го периода). Здесь потенциальная энергия определена как кулоновское взаимодействие заряда $+eN_n$ остова (в соответствии с теоремой Гаусса) с каждым из электронов внешней оболочки, находящихся на расстоянии d .

Устойчивое состояние атома соответствует минимуму его потенциальной энергии. Она может быть найдена стандартным путем (путем нахождения экстремума), так что

$$\frac{d\mathcal{E}}{dd} = -\frac{L^2}{md^3} + \frac{e^2 N_n}{d^2} = 0. \quad (17)$$

Отсюда следует энергия связи, соответствующая равновесному расстоянию d_0 ,

$$\mathcal{E} = -\frac{e^2 N_n}{2d_0}. \quad (18)$$

В пределе $n = 1$, $N_n = 1$ уравнение переходит в формулу (15) для энергии атома водорода.

Выразим кинетическую энергию как разность полной и потенциальной энергий

$$\mathcal{E}_K = \mathcal{E} - \mathcal{E}_P = \frac{e^2 N_n}{2a_0} \left(1 - \frac{2a_0}{d} \right). \quad (19)$$

Из этого выражения следует, что на расстоянии $d = 2a_0$ кинетическая энергия обращается в ноль и полная энергия всецело определяется потенциальной энергией

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_P = \frac{e^2 N_n}{2d_0} \quad \text{или} \quad \mathcal{E} = -\frac{e^2}{d_n}. \quad (20)$$

где $d_n = \frac{2d_0}{N_n}$ – эффективное расстояние между остовом атома и его внешними электронами, d_0 – расстояние, имеющее смысл орбитального радиуса [4].

Полученный результат можно трактовать как проявление условно-периодического движения электрона в модели анизотропного осциллятора [8, с. 349]. При этом минимуму кинетической энергии соответствует максимальное удаление электрона от остова, равное $d_n = 2d_0$. Этот результат в количественном отношении согласуется с квантовомеханической моделью атома, для которой плотность вероятности нахождения электрона от ядра на расстоянии d в основном $1s$ -состоянии равна [14, с. 216] $P(d) \propto \frac{d^2}{d_0^3} \exp\left(\frac{-2d}{d_0}\right)$, где d_0 – представляет собой орбитальный радиус; на расстоянии, равном $d = 2d_0$, вероятность $P(d)$ нахождения электрона падает более чем 50 раз, что практически соответствует границе классического атома. Немаловажным в этом отношении представляется установленная ранее закономерность $a_e = 2a_0$ (или $d = 2d_0$) [5].

Справедливость уравнения (20) подтверждается всей совокупностью имеющихся в настоящее время экспериментальных данных. Определенность межоболочечных расстояний d является следствием константности поляризуемости α атомов (см. раздел 2), а определенность энергии связи подтверждается прямыми измерениями потенциалов ионизации, оптических и рентгеновских спектров. Полученное уравнение (20) отражает факт взаимобусловленности энергии связи и расстояния между остовом и внешними электронами; их произведение выступает в качестве инварианта $\mathcal{E}d_n = e^2 = \text{inv}$, который применим ко всем атомам.

Рассчитываемые по (20) величины энергий связи неплохо коррелируют с данными по потенциалам ионизации [11]. Смысл выражения (20) раскрывается в модели двухзарядового атома, согласно которой и в соответствии с теоремой Гаусса [2] остов атома имеет положительный квазиточечный заряд $+eN$ и обуславливает кулоновский характер взаимодействия его с зарядами $-e$ валентных электронов, так что $\mathcal{E} = -\frac{e^2 N_n}{d_{1n}}$, где N_n – число электронов на внешней оболочке n -ГО периода, d_{1n} – расстояние между остовом и внешним электроном атомов 1 группы n -ГО периода в приближении недеформируемого остова, при $d_n = \frac{d_{1n}}{N_n}$ получаем уравнение (20).

Рассчитанные по (20) величины энергий \mathcal{E} представлены на рис. 1 в виде зависи-мостей $\mathcal{E}(N_n)$ ns - и np -атомов в отдельных периодах, где N_n – порядковый номер атома в соответствующем n -ОМ периоде. В приближении изотропной поляризуемости $\mathcal{E}(N_n)$

имеют близкий к линейному характер для своих ns - и np -элементов. Переход от ns - и np -атомов сопровождается характерным изломом зависимостей $\mathcal{E}(N_n)$ в случае II и III периодов и скачком энергии (в области $N_n = 2 \div 3$) для IV-VI периодов. Такое поведение вполне объяснимо. Изломы зависимостей $\mathcal{E}(N_n)$ при $N_n = 2$ (для $n = 2$ и 3) связаны с различным характером взаимодействия электронов при переходе от ns - к np -атомам. Скачки энергии $\mathcal{E}(N_n)$ (для $n = 4 \div 6$) обусловлены не показанными здесь вкладами энергии от d - и f -электронов, которыми заполняются внутренние оболочки атомов IV-VI периодов. Наклон зависимостей $\mathcal{E}(N_n)$ быстро уменьшается с увеличением номера n периода и у np -элементов VI периода становится отрицательным.

В целом зависимости $\mathcal{E}(N_n)$ правильно передают общую картину периодичности элементов таблицы Менделеева. Они представляют как бы сглаженные зависимости потенциалов ионизации $I(N_n)$ [5, 15]. Для иллюстрации данного эффекта на рис. 1 приведены также зависимости $I(N_n)$ для атомов II-V периодов с характерными для этих зависимостей изломами. Такое поведение $\mathcal{E}(N)$ можно объяснить регулярным изменением расстояния $d(N_n)$, обусловленным изменением энергии взаимодействия между зарядом остова $+eN_n$ с каждым из электронов внешней оболочки согласно (20), когда увеличение заряда ядра $+eZ$ на единицу заряда e приводит к увеличению заряда остова и соответствующему уменьшению величины d .

Интересным представляется то, что наблюдаемые на экспериментальных зависимостях $I(N_n)$ зубцы связаны с наличием у атомов анизотропии поляризуемости. Предварительные расчеты показывают, что введение поправки на анизотропию поляризуемости приводит к уменьшению энергии связи атомов 3-й и 6-й групп (см. рис.1). Именно в этих точках $N_n = 3$ и 6 потенциалы ионизации выпадают из линейной зависимости $I(N_n)$. Если в последующем данный факт подтвердится, то он сможет объяснить причину столь загадочного поведения зависимостей $I(N_n)$. С другой стороны, между величинами \mathcal{E} и I имеются принципиальные различия. Энергия связи \mathcal{E} определяется методом измерения, согласно которому энергетический уровень отсчета в процессе измерения поляризуемости остается неизменными. При определении потенциала ионизации I происходит значительная перестройка энергетического уровня конечного (ионизированного) состояния атома за счет перестройки электронной оболочки после удаления электрона. Поэтому величина потенциала ионизации зависит не только от действительной энергии связи электрона с ядром, но и от энергии конечного состояния ионизированного атома. Данное положение подтверждается систематическими отклонениями энергии $\Delta = (\mathcal{E} - I)$ по группам таблицы Менделеева.

Полученные экспериментальные данные по энергиям связи атомов отражают сложный характер электрон-ядерных и электрон-электронных взаимодействий. С другой стороны, данный факт предполагает, что экспериментальные данные по потенциалам ионизации и энергиям связи содержат в себе исходную информацию о составляющих вкладах в энергию внутриатомного взаимодействия и об их действительной природе. Квазилинейность зависимостей $\mathcal{E}(N_n)$ предполагает, что $\mathcal{E} \propto \mathcal{E}_{1n}^g N_n$ где \mathcal{E}_{1n}^g – энергия, которая выступает здесь в качестве энергетической единицы при расчете энергии атома соответствующего n -го периода. Казалось бы, что в качестве такой размерной единицы можно было бы использовать энергию связи \mathcal{E}_{1n} атомов 1-й группы. Однако именно у этих атомов остовы имеют достаточно высокую поляризуемость; это приводит к значительной деформации их оболочек со

ОБОЛОЧЕЧНАЯ МОДЕЛЬ АТОМОВ И ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ЭЛЕМЕНТОВ _____ 1-23
 стороны своих внешних электронов, что, в свою очередь, приводит к значительным возмущениям исходной кулоновской энергии \mathcal{E}_{1n}^g . Поэтому на энергии связи \mathcal{E}_{1n} необходимо вводить соответствующую поправку. Например, в качестве величины \mathcal{E}_{1n}^g можно использовать потенциалом ионизации однозарядных катионов благородных газов, приведенных к единице заряда его остова, т.е. $\mathcal{E}_{1n}^g \approx I_{8n}^{7+}/8$; в этом случае остов катиона имеет наибольшую жесткость (наибольший потенциал ионизации) и вносит минимальный вклад в возмущение исходной энергии связи.

$\mathcal{E}, I, \text{эВ}$

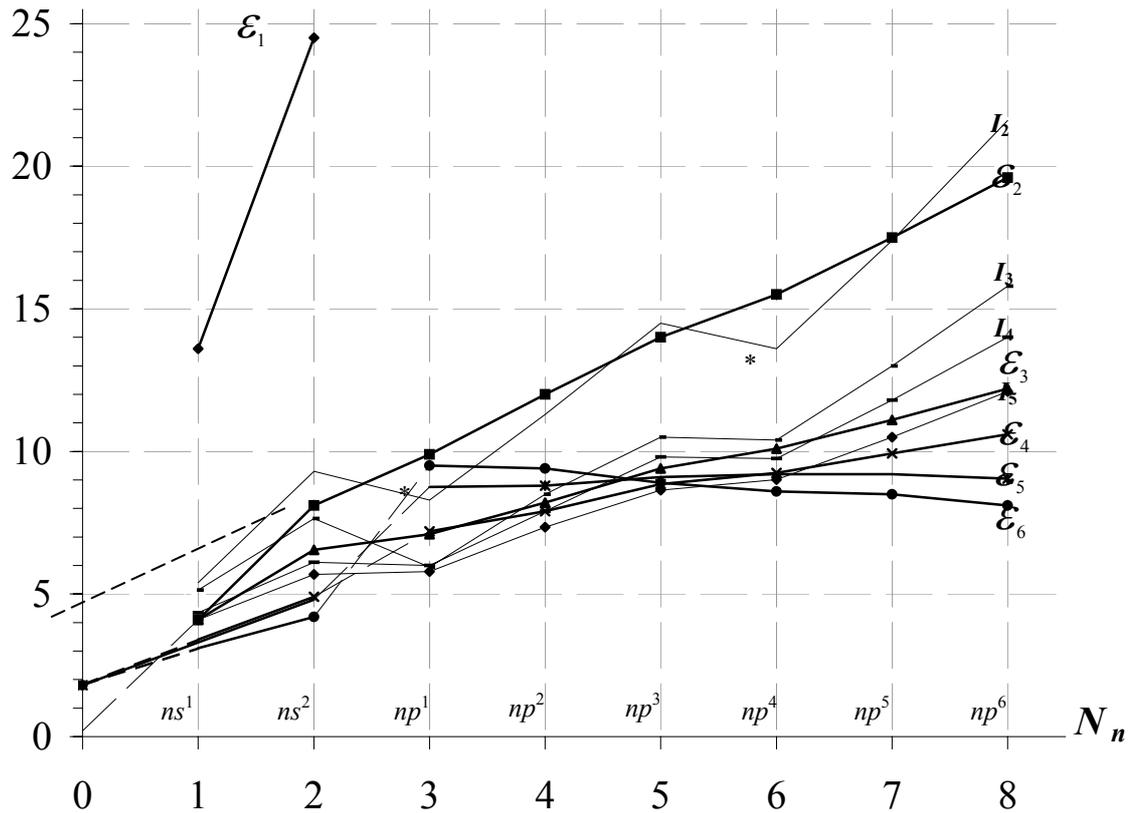


Рис. 1. Зависимости энергии связи (\mathcal{E}) и потенциала ионизации (I) от порядкового номера N в разных периодах (1-6) для ns - и np -элементов

С другой стороны, энергия связи \mathcal{E} – это, как минимум, результат совместного действия сил электрон-ядерного притяжения \mathcal{E}_{ne} и сил электрон-электронных отталкивания \mathcal{E}_{ee} . Анализ экспериментальных данных по энергиям связи \mathcal{E} и по потенциалам ионизации показывает, что эти вклады имеют кулоновскую природу и могут быть представлены в виде [15] (см. также раздел 4)

$$\mathcal{E}_{ne} + \mathcal{E}_{ee} = \mathcal{E}_{1n}^g N_n^2 + \mathcal{E}_{1n}^g N_n (N_n - 1) = \mathcal{E}_{1n} N_n = -\frac{e^2 N_n}{d_{1n}}. \quad (21)$$

Первый член в (21) соответствует величине энергии связи водородоподобных атомов (катионов) и определяет энергию кулоновского притяжения электронов в центральном поле остова атома (в соответствии с теоремой Гаусса). Второй член в (21) получен в предположении о правильной конфигурации оболочки, образуемой равноудаленными друг от друга

электронами (см. раздел 4). Энергия по (21) записана без учета энергии межоболочечного взаимодействия \mathcal{E}_{ss} , которая равна разности измеренной величины \mathcal{E} и энергии по (21). Ее можно найти путем экстраполяции зависимости $\mathcal{E}(N_n)$ на нулевой номер $N \rightarrow 0$, в результате чего на оси ординат отсекается энергия (см. рис.1), которую, по-видимому, можно трактовать как энергию межоболочечного притяжения \mathcal{E}_{ss} . Природа «остаточного» взаимодействия, как можно предположить, обусловлена деформируемостью электронной оболочки остова атома; кулоновское притяжение между остовом и внешними электронами приводит к увеличению радиуса остова в направлении действия этих сил. В результате этого эффективное расстояние d между остовом и внешними электронами уменьшается на Δd . Кроме того, у атомов, имеющих дипольный момент (например, как у атомов 1-й группы), имеет место перераспределение заряда остова относительно ядра, которое приводит к дополнительной концентрации заряда Δq на линии связи остов – внешний электрон. В результате этого энергия связи изменяется на $\Delta \mathcal{E} = \mathcal{E} \left(\frac{\Delta q}{e} + \frac{\Delta d}{d} \right)$. В первом приближении данную поправку можно оценить как отношение потенциала ионизации атома к потенциалу ионизации его остова. Наибольший эффект $\Delta \mathcal{E}$, судя по крутизне зависимости $\mathcal{E}(N_n)$, наблюдается у ns -атомов (т.е. у атомов 1-й группы); у всех зависимостей $\mathcal{E}(N_n)$ в точке $N_n = 2$ обнаруживается излом в их крутизне (см. рис.1).

Полученные зависимости энергии связи (21) имеют определенное сходство с зависимостями, представляющими эмпирический закон Мозли [13, с. 68]

$$\mathcal{E}_n = \frac{e^2 (Z - \delta)}{2 a_B n^2}, \quad (22)$$

где Z – порядковый номер элемента, δ – константа экранирования, n – номер оболочки, a_B – борковский радиус.

Формула (22) представляет энергию, которую необходимо затратить для того, чтобы удалить электрон с n -й оболочки. С позиций оболочечной двухзарядовой модели эту формулу можно трактовать следующим образом. Для выделенной n -й оболочки уравнение (22) представляет взаимодействие эффективного заряда ядра $+e(Z - \delta)$ с эффективным зарядом всех вышележащих электронов равным $-e(Z - \delta)$, и разделяемых расстоянием $2 a_B n^2$. Согласно теореме Гаусса константа экранирования δ равна числу электронов внутри выделенной сферы. В пределе внешних электронов, когда взаимодействие по (22) сводится к взаимодействию остова $+eZ + (Z - N_n)e = +eN_n$ с каждым из валентных электронов, получаем $\mathcal{E}_n \rightarrow \mathcal{E} = \frac{e^2 N_n}{2 a_B n^2}$, которое при замене $d_n = \frac{2 a_B n^2}{N_n}$ дает формулу (21) для энергии связи. В отличие от закона Мозли, согласно которому энергия связи внутренних электронов квадратична по Z , уравнение (21) выражает линейную зависимость энергии связи валентных электронов от порядкового номера атома N_n в n -ом периоде таблицы Менделеева. В этом отношении ее можно рассматривать как предельный случай закона Мозли для внешних электронов.

Небезынтересным представляется и тот факт, что энергия связи всех атомов находится в пределах приблизительно от 3 до 25 эВ. При этом нижняя граница (~3 эВ) непосредственно примыкает к высокочастотной (фиолетовой) границе частотного спектра солнечного излу-

чения. Такое удивительно точное сопряжение обеспечивает устойчивость «вещества» к оптическому воздействию во всем диапазоне солнечного излучения. Верхняя граница энергий связи (25 эВ) тоже имеет вполне определенный смысл. Дело в том, что при таких и больших энергиях связи поляризуемость атомов становится настолько малой, что атомы становятся не способными к взаимодействию и образованию молекулярных структур. За этой чертой все процессы структурообразования останавливаются. То есть, атомам отведена энергетическая «ниша», в которой созданы условия для осуществления процессов самоусложнения и эволюции.

Сам факт возможности определения энергии связи атомов по формуле (20) представляется чрезвычайно важным в методологическом отношении, поскольку он свидетельствует о том, что появился новый независимый метод измерения энергетических параметров атомов.

4. Электронные конфигурации атомов и механизм их образования

Полученные данные по энергиям связи \mathcal{E} и эффективным расстоянием d между остовом и внешними электронами позволяют приступить к рассмотрению одного из краеугольных вопросов атомной физики – вопросу об электронном строении и механизмах структурообразования атомов.

В общем случае получаемая в эксперименте энергия \mathcal{E} складывается из трех составляющих: 1) энергия \mathcal{E}_{ne} притяжения каждого из электронов к ядру; 2) энергия \mathcal{E}_{ee} взаимного отталкивания электронов, принадлежащих одной оболочке; 3) энергия \mathcal{E}_{ss} взаимодействия оболочек друг с другом, так что $\mathcal{E} = \mathcal{E}_{ne} + \mathcal{E}_{ee} + \mathcal{E}_{ss}$.

Согласно теореме Гаусса энергия \mathcal{E}_{ne} представляет собой кулоновскую энергию притяжения каждого из внешних электронов к заряду остова $+eN_n$, находящегося на расстоянии $\frac{d_{1n}}{N_n}$,

$$\mathcal{E}_{ne} = -\frac{e^2 N_n^2}{d_{1n}} = \mathcal{E}_{1n}^g N_n^2, \quad (23)$$

где d_{1n} – расстояние между остовом и внешними электронами атомов 1-й группы, \mathcal{E}_{1n}^g – энергия связи атомов 1-й группы в приближении недеформируемых остовов.

Для водородоподобных атомов $N_n = 1$ и энергия (23) соответствует формуле связи (20); для атомов водорода $d_{11} = 2a_B$ и энергия равна $\mathcal{E}_H = 13,6$ эВ, а для многозарядных катионов атома водорода $d_{1n} = \frac{2a_B}{Z}$ и $N_n = Z$ и формула $\mathcal{E}_{ne} = \mathcal{E}_H Z^2$ выполняется с высокой точностью вплоть до $Z \in 30$. К данному выводу приводит анализ имеющихся данных по потенциалам ионизации многозарядных водородоподобных катионов [16].

Энергия \mathcal{E}_{ee} согласно закону Кулона представляет энергию взаимного отталкивания электронов. В простейшем случае гелийподобных систем два электрона внешней оболочки должны занимать положение на максимальном удалении друг от друга, приняв зеркально симметричную конфигурацию относительно ядра (остова). Анализ данных по потенциалам ионизации многозарядных гелийподобных катионов показывает, что к ним применима с высокой точностью формула $\mathcal{E}_{ee} = \frac{e^2 Z}{2a_B}$ [16], которая выражает энергию взаимного отталкивания электронов n -й оболочки, находящихся на максимальном удалении друг от друга,

равным $\frac{2a_B}{Z}$, где Z – порядковый номер атома (заряд катиона). В приближении жестких оболочек эту формулу можно распространить на двухэлектронные атомы 2-й группы таблицы Менделеева, так что $\mathcal{E}_{ee} = \frac{e^2 N_n}{d_{1n}} = \mathcal{E}_{1n}^g N_n = \mathcal{E}_{1n}^g \cdot 2$. Обязательным условием выполнимости

данного соотношения является электронная конфигурация с зеркальной симметрией электронов относительно ядра (остова).

Надо полагать, что характер взаимного отталкивания электронов сохраняется и для большего числа электронов на оболочке. При этом электроны всегда стремятся к максимальному удалению друг от друга и образованию конфигурации в виде правильной фигуры, типа треугольника, тетраэдра, тригональной бипирамиды, октаэдра, куба и др. с электронами в вершинах этих фигур (рис. 2). В общем случае энергия отталкивания между электронами \mathcal{E}_{ee} равна сумме составляющих энергий, действующих на линии притяжения каждого из электронов к ядру (остову), так что [15]

$$\mathcal{E}_{ee} = \sum_{i=1}^{N_n-1} \mathcal{E}_{ni} \cos \varphi_i = \sum_{i=1}^{N_n-1} \frac{e^2 \cos \varphi}{b_{ni}}. \quad (24)$$

где φ_i – угол с вершиной в точке нахождения i -ГО электрона, образуемого радиусом a_n и межэлектронным расстоянием b_{ni} .

Суммирование ведется по всем $(N_n - 1)$ электронным парам. В результате взаимного отталкивания электроны на внешней оболочке стремятся разместиться на равноудаленных друг от друга расстояниях b_{ni} , поэтому межэлектронное расстояние можно выразить через радиус атома, так что $b_{ni} = 2a_n \cos \varphi_i$.

Согласно теореме Гаусса заряд остова атома равен $+eN_n$; он закономерно увеличивается, благодаря увеличению порядкового номера N_n атома в n -ом периоде. В свою очередь, увеличение заряда остова приводит к уменьшению начального для данного периода расстояния a_{1n} до величины $a_n = \frac{a_{1n}}{N_n}$. Подстановка в (24) величин b_{ni} и a_n дает

$$\mathcal{E}_{ee} = \sum_{i=1}^{N_n-1} \frac{e^2}{2a_n} \approx \frac{e^2}{a_{1n}} N_n (N - 1) = \mathcal{E}_{1n}^g N_n (N_n - 1), \quad (25)$$

где \mathcal{E}_{1n}^g – энергия связи атомов 1 группы n -ГО периода таблицы Менделеева, в приближении жестких остовов.

На рис. 2 показаны электронные конфигурации внешних оболочек атомов каждого из n -ГО периодов. Здесь же показаны силы отталкивания, действующие на выделенный электрон (0) со стороны остальных электронов ($i = 1, 2, \dots, 7$). Наиболее простой является рассмотренная выше двухэлектронная зеркально симметричная относительно ядра конфигурация, для которой $\mathcal{E}_{ee} = \mathcal{E}_{1n} \cdot 2$ ($N_n = 2$). Для треугольной конфигурации энергия отталкивания складывается из $N_n - 1 = 2$ пар энергия \mathcal{E}_{0-1} и \mathcal{E}_{0-2} , действующих на линии связи электрона 0 с ядром; при этом $b_n = 2a_n \cdot \cos 30^\circ$, $a_n = \frac{a_0}{N_n} = \frac{a_{03}}{3}$ и $\mathcal{E}_{ee} = \mathcal{E}_{1n} \cdot 3(3 - 1)$.

Аналогичным образом в соответствии с (25) могут быть определены энергии \mathcal{E}_{ee} и для других электронных конфигураций. Наибольшую для внешних оболочек энергия \mathcal{E}_{ee} имеет 8-и

электронная конфигурация. Она складывается из 1) трех граниобразующих пар \mathcal{E}_{0-1} , \mathcal{E}_{0-3} и \mathcal{E}_{0-7} куба, 2) трех «диагональных» пар \mathcal{E}_{0-2} , \mathcal{E}_{0-4} и \mathcal{E}_{0-6} , и 3) одной диагональной пары \mathcal{E}_{0-5} , действующих на линии связи электрона 0 с ядром (в противодействии с энергией \mathcal{E}_{ee})

(рис.2), так что $\mathcal{E}_{ee} = 3 \frac{e^2}{2a_n} \cdot \frac{\cos \varphi_1}{\cos \varphi_1} + +3 \frac{e^2}{2a_n} \cdot \frac{\cos \varphi_2}{\cos \varphi_2} + \frac{e^2}{2a_n} = \mathcal{E}_{1n} 7(7-1)$, где φ_1 и φ_2 –

углы между радиусом (ядро – 0) и соответствующими межэлектронными расстояниями вдоль ребер – граней, квадратов и их диагоналей соответственно; последнее слагаемое представляет энергию отталкивания электронов на диагонали куба, равной $2a_n$ [15].

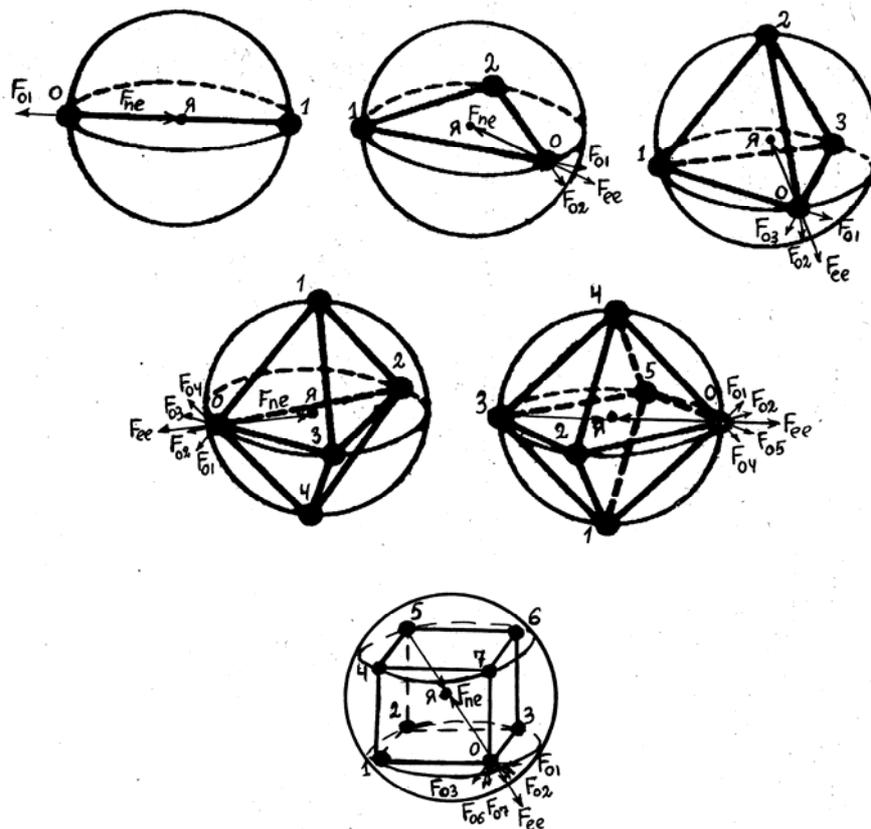


Рис. 2. Конфигурации 2-х, 3-х, 4-х, 5-и, 6-и, и 8-и электронных оболочек атомов, представляющие правильные фигуры (линия, треугольник, тетраэдр, тригональная бипирамида, октаэдр, куб). Стрелками показаны направления составляющих сил отталкивания F_{oi} , силу притяжения ядра F_{ne} и результирующую силу взаимного отталкивания F_{ee} , действующих на выделенный (o) электрон.

Суммарная энергия без учета межоболочечных взаимодействий в соответствии с (23) и (25) равна

$$\mathcal{E}_{ne} + \mathcal{E}_{ee} = \frac{e^2 N_n}{2d_{1n}} = \mathcal{E}_{1n}^g N_n. \tag{26}$$

Надо отметить, что величина этой суммарной энергии у многоэлектронных атомов много меньше ее составляющих энергий \mathcal{E}_{ne} и \mathcal{E}_{ee} , т.е. $\mathcal{E}_{ne} \approx \mathcal{E}_{ee} \gg \mathcal{E}$. Энергия связи \mathcal{E} соответствует минимуму потенциальной функции $\mathcal{E}(d_0)$, которая формируется благодаря совместному действию притягивательной $\mathcal{E}_{ne}(d)$ и отталкивательной $\mathcal{E}_{ee}(d)$ ветвей этой функции. Высокий уровень противостояния энергий \mathcal{E}_{ne} и \mathcal{E}_{ee} обеспечивает крутизну стенок

потенциальной функции $\mathcal{E}(d)$ и тем самым высокую устойчивость электронной конфигурации атомов.

Соотношение (26) неплохо выполняется для s -элементов II периода. Экстраполяция $\mathcal{E}(N_2)$ этих атомов на $N_2 \rightarrow 0$ дает «остаточную» энергию близкую к нулю (на рис. 2, $\mathcal{E}(N_2)$). Это может указывать на малость взаимодействия K -оболочки с s -электронами L -оболочки. Взаимодействие между этими оболочками становится заметным для p -элементов этого периода, что проявляется в уменьшении крутизны $\mathcal{E}(N_2)$ для $N_2 = 3, \dots, 8$. Экстраполированное значение \mathcal{E} на $N_2 \rightarrow 0$ дает $\mathcal{E}_2 \approx 4$ эВ (см. рис. 2), которую надо полагать, следует принять как энергию межоболочечных взаимодействий; она равна разности $\mathcal{E}_{ss} = \mathcal{E} - \mathcal{E}_{ne} - \mathcal{E}_{ee} = \mathcal{E} - \mathcal{E}_{1n}N_n$, где \mathcal{E} – экспериментальная величина энергии связи. С помощью такой экстраполяционной процедуры можно найти энергии межоболочечного взаимодействия \mathcal{E}_{ss} и для других оболочек.

Таким образом, энергия связи \mathcal{E} электронов внешних оболочек обусловлена действием сил кулоновского притяжения электронов к ядру и сил взаимного отталкивания электронов, а также сил межоболочечного притяжения, которые в совокупности определяют характер наблюдаемого поведения зависимостей $\mathcal{E}(N_n)$ (см. рис. 2). Собственно они и предопределяют порядок заполнения отдельных оболочек и их электронную конфигурацию.

Обратимся теперь к установлению механизма формирования самих оболочек. Исходным пунктом для последующего рассмотрения может служить всесторонне апробированная модель атома водорода. Согласно которой атом водорода представляет собой ядро, в центральном поле которого удерживается вращающийся электрон. Устойчивость атома достигается за счет баланса сил кулоновского притяжения электрона к ядру и сил центробежного отталкивания [3, 8]. Состояние атома определяется орбитальным радиусом a_B , которому соответствует минимум потенциальной энергии, равной $\mathcal{E} = 13,6$ эВ. Это величина, называемая энергией связи электрона с ядром, является количественной мерой устойчивости атома.

Согласно теореме Гаусса щелочных металлов (атомы I группы) представляют собой связанную систему из остова атома и электрона на внешней оболочке. В приближении недеформируемого остова такая система представляет квазиточечный единичный заряд $+e$, в поле которого удерживается вращающийся электрон. В таком представлении щелочные атомы структурно изоморфны атому водорода. В этой связи можно предположить, что и механизм образования электронных оболочек щелочных атомов должен быть таким же как у атома водорода. Т.е. «кинетический» барьер, определяемый кинетической энергией центробежного отталкивания электрона, препятствует его проникновению на оболочку остова и он сам (остов) становится центром образования новой орбиты (новой оболочки). Т.е. для образования новой оболочки необходимо, чтобы энергия ее образования была не меньше приращения энергии связи, вызванного предполагаемым захватом электрона нижележащей оболочкой.

Рассмотрим наиболее характерные аспекты эволюции элементов таблицы Менделеева.

Образование K -оболочки (атома гелия) осуществляется в полном соответствии с законами электростатики и не требует дополнительных пояснений. При образовании третьего атома его K -остов согласно теореме Гаусса играет роль притягивающего центра, имеющего единичный положительный заряд $+e$. В результате третий электрон захватывается этим зарядом на орбите, подобной боровской орбите атома водорода. Эта орбита, по сути, представляет новую L -оболочку атома лития; устойчивость такого атома (Li) как и в случае с атомом водорода достигается за счет баланса сил притяжения электрона к квазиточечному K -остову и сил центробежного отталкивания. Энергия связи электрона у атома лития $\mathcal{E} \approx 4,1$ эВ; на L -орбите она равна кинетической энергии электрона, которая быстро

ОБОЛОЧЕЧНАЯ МОДЕЛЬ АТОМОВ И ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ЭЛЕМЕНТОВ _____ 1-23
увеличивается при уменьшении радиуса орбиты. Чтобы образовать гипотетический атом с 3-х электронной K -оболочкой, необходимо было бы преодолеть «кинетический» потенциал порядка 4 эВ. Этим объясняется то, что в естественных условиях для образования атома лития энергетически более выгодной является не 3-х электронная K -оболочка, а двухслойная структура с дополнительной L -оболочкой.

Последующий атом бериллия ($Z = 4$) образуется путем присоединения четвертого электрона к L -оболочке, повторяя тем самым гелийподобную структуру, в которой в роли аттрактора выступает квазиточечный K -остов с зарядом $+2e$. Структура следующего атома бора ($Z = 5$), казалось бы, должна быть такой же как у атома лития; т.е. у него должна быть образована третья оболочка. Однако потенциал заряда L -остова такого гипотетического атома бора относительно невелик и он не может обеспечить условий образования новой оболочки. Поэтому образование атома бора как и образование последующих атомов II-го периода осуществляется путем последовательного заполнения $2p$ -электронами L -оболочки, что обеспечивает последовательное увеличение энергий связи. Второй период завершается устойчивой высокосимметричной конфигурацией L -оболочки атома неона. Энергия связи неона достигает максимальной в этом периоде величины. Емкость L -оболочки равна $2n^2 = 8$.

У следующего атома натрия ($Z = 11$) энергетически более выгодной оказывается структура с образованием новой M -оболочки. Это можно объяснить тем, что 9-и электронная гипотетическая L -оболочка имела бы низкосимметричную конфигурацию, которая не может обеспечить должную устойчивость атома в целом. С другой стороны, электрический потенциал L -остова достигает уровня, при котором становится возможным образование следующей M -оболочки по типу водородоподобного атома (см. выше). В результате у атома натрия формируется водородоподобная структура, в которой в качестве притягивающего центра выступает квазиточечный L -остов, имеющий единичный заряд $+e$. Атом натрия начинает формирование следующей M -оболочки. Ее первые 8 электронов точно повторяют строение L -оболочки, представляя 3-й период таблицы Менделеева. Но на этом построение M -оболочки не завершается, но изменяется последовательность ее заполнения. Вначале образуется двухэлектронная (Ca) N -оболочка; последующие 10 электронов, попадая на N -оболочку, не удерживаются на ней и транзитом переносятся на внутреннюю M -оболочку. Это может означать, что энергия ионизации гипотетических $4p$ -элементов оказывается меньше энергии связи $3d$ -электронов атомов M -оболочки. Всего на M -оболочке умещается 18 электронов; ее емкость подчиняется правилу $2n^2$. В результате заполнения M -оболочки потенциал M -остова атомов 4 периода увеличивается до уровня, достаточного для удержания электронов последующих шести $4p$ -элементов на N -оболочке. Таким образом формируется внешняя N -оболочка 4-го периода. Заполнение N -оболочки возобновляется после образования O -оболочки из двух $5s$ -электронов. Сначала N -оболочка пополняется десятью d -электронами в результате из переноса с внешней O -оболочки по рассмотренному выше механизму. Затем после завершения внешней O -оболочки и формирования $6s$ -элементов P -оболочки начинается заполнение N -оболочки $5f$ -электронами. Емкость N -оболочки равна 32 электронам, что удовлетворяет законности $2n^2$ ($= 2 \cdot 4^2 = 32$).

После завершения N -оболочки начинается заполнение O -оболочки $5d$ -электронами до $N_5 = 18$, после чего возобновляется заполнение внешней O -оболочки $6p$ -электронами. Радоном ($Z = 86$) завершается 6-й период. Емкость O -оболочки также как и у N -оболочки

равна 32 электронам. Начиная с этой оболочки, порядок заполнения оболочек нарушается. На p -оболочке удерживается только 10 электронов, а на Q -оболочке – всего 2. Нарушение в порядке заполнения оболочек, надо полагать, связано с изменением соотношения между составляющими вкладками \mathcal{E}_{ne} , \mathcal{E}_{ee} , \mathcal{E}_{ss} в энергию связи \mathcal{E} . Зависимости $\mathcal{E}(N_n)$ на рис. 1 дают этому наглядное представление. Видно, что крутизна этих зависимостей $\mathcal{E}(N_n)$ снижается с увеличением номера n оболочки. Она становится близкой к нулю для атомов 5-го периода и даже меняет знак у атомов 6-го периода. В результате этого число электронов на последних P - и Q -оболочках резко падает, свидетельствуя тем самым о падении движущего потенциала эволюции химических электронов. Другими словами, присущая атомам способность к самоорганизации и самоусложнению начинает быстро спадать при достижении системы некоторого критического уровня.

Можно констатировать тот факт, что наблюдаемая периодичность свойств атомов (таких как потенциалы ионизации, поляризуемость, радиус и др.) причинно обусловлена периодичностью электронных конфигураций их внешних оболочек. Выше было показано, что электронная конфигурация является внутренне присущим свойством атома, а его устойчивость характеризуется энергией связи. Естественной единицей энергии связи выступает энергия связи атома водорода \mathcal{E}_H . Аналогичную роль в каждом их периодов выполняет гипотетическая энергия связи атомов щелочных металлов (атомов 1-й группы). Эти энергии связаны между собой с помощью идеализированного соотношения

$$\mathcal{E}_{1n}^g = \frac{\mathcal{E}_H}{n^2} \approx \frac{\mathcal{E}_{He}}{2n^2}. \quad (27)$$

Оно получено, исходя из предположения о том, что между формированием электронных оболочек атома и структурой оптических спектров существует некоторое глубинное родство [17, с. 374]. С другой стороны, энергию связи завершающего n -ю оболочку атома согласно (21) можно выразить через \mathcal{E}_{1n}^g

$$\mathcal{E}_{mn} = \mathcal{E}_{1n}^g N_n \quad (28)$$

сравнение (27) и (28) дает уравнение связи между n и N_n

$$N_n = 2n^2 \frac{\mathcal{E}_{mn}}{\mathcal{E}_{He}}. \quad (29)$$

В гипотетическом приближении $\mathcal{E}_{mn} = \mathcal{E}_{He}$ данное уравнение описывает наблюдаемую для первых четырех периодов закономерность $N_n = 2n^2$. Тот факт, что энергия \mathcal{E}_{mn} все же уменьшается от периода к периоду, приводит к нарушению данной закономерности по (29) и тем самым объясняет сложившуюся структуру элементов таблицы Менделеева с характерными для нее отклонениями от так называемой теоретической периодичности.

Характерно, что первая (самая глубокая), вторая и все внешние оболочки остаются структурно не изменяющимися в процессе формирования многослойных атомов. Такое строение атомов обеспечивает им устойчивость и в тоже время допускает непрерывное самоусложнение за счет увеличения емкости внутренних оболочек.

Электронная плотность атомов неравномерна: она предельно высока вблизи ядра и минимальна на внешней оболочке, тем самым отражая характер зависимости расстояния между остовом атома и его внешними электронами от эффективного заряда на остове.

Выводы

1. Дано обоснование эмпирическому подходу к получению информации о внутриатомном строении, основному на измерении поляризуемости атомов. Получены соотношения между поляризуемостью и основными атомными константами, на основании которых рассчитаны радиусы и энергии связи большинства атомов таблицы Менделеева. Установлен ряд закономерностей в поведении энергии связи атомов в зависимости от числа электронов на их внешних оболочках.
2. Предложена непротиворечивая двухзарядовая оболочечная модель атома как система вложенных друг в друга сфер, устойчивость которой достигается благодаря кулоновскому притяжению электронов вышележащей оболочки к положительно заряженной нижележащей оболочке (в соответствии с теоремой Гаусса). Каждая из оболочек атома представляет собой правильную электронную конфигурацию (в виде пары зеркально симметричных относительно ядра/остова электронов, равностороннего треугольника, тетраэдра, октаэдра и т.д.), образуемую электронами в ее вершинах. Образование новой оболочки – это результат химического захвата электрона остовом атома, центральное поле которого формирует новую орбиту, наподобие атома водорода. Разрешенные состояния атома соответствуют минимуму потенциальной энергии системы, которая в свою очередь, определяется свойствами симметрии электронной конфигурации.
3. Описание предлагаемой модели осуществляется в рамках классических представлений. Параметрами модели являются радиус и энергия связи, а также параметры оболочек – номер оболочки n и число электронов N_n на n -й оболочке.

Литература

- [1] Барсуков О.А., Ельяшевич М.А. Основы атомной физики. М.: *Научный мир*. 2006. 648с.
- [2] Парселл Э. Электричество и магнетизм. М.: *Наука*. 1975. 440с.
- [3] Физический энциклопедический словарь. Гл. ред. А.М. Прохоров. М.: *Сов. Энциклопедия*. 1983. 928с.
- [4] Годовиков А.А. Орбитальные радиусы и свойства элементов. *Новосибирск: Наука*. 1977. 155с.
- [5] Потапов А.А. Деформационная поляризация. *Новосибирск: Наука*. 2004. 511с.
- [6] Иоффе Б.В. Рефрактометрические методы химии. Л.: *Химия*. 1983. 352с.
- [7] Потапов А.А. Молекулярная диэлькометрия. *Новосибирск: Наука*. 1994. 285с.
- [8] Шпольский Э.В. Атомная физика. Т. 1. М.: *Физматгиз*. 1963. 576с.
- [9] Браун В. Диэлектрики. М.: *ИЛ*. 1961. 326с.
- [10] Делоне Н.Б. Атом в сильном поле лазерного излучения. М.: *Физматгиз*. 2002. 64с.
- [11] Бацанов С.С. Структурная химия. Факты и зависимости. М.: *Диалог. МГУ*. 2000. 292с.
- [12] T.M. Miller, B. Bederson. Atomic and Molecular Polarizabilities. *Adv. At. Mol. Phys.* 1977. Vol.13. P.1-55.
- [13] Робертсон Б. Современная физика в прикладных науках. М.: *Мир*. 1985. 272с.
- [14] Шпольский Э.В. Атомная физика. Т. 2. М.: *Физматгиз*. 1974. 418с.
- [15] Потапов А.А. Оболочечная модель электронного строения атомов. *Вестник ИрГТУ*. 2006. №3. с.109-115.
- [16] Яценко А.С. Оптические спектры H- и He-подобных ионов. *Новосибирск: Наука*. 2003. 216с.
- [17] Дикерсон Р., Грей Г., Хейт Дж. Основные законы химии. Т. 1. М.: *Мир*. 1982. 652с.