

Тематический раздел: Теоретическая и компьютерная химия. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Теория строения вещества. Регистрационный код публикации: 11-28-18-1

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>
Поступила в редакцию 20 октября 2011 г. УДК 539.182; 535.33.

Тематическое направление: Компьютерное моделирование атомов. Часть 1.

Моделирование электронного строения атомов щелочных металлов

© **Потапов Алексей Алексеевич и Демидюк Алексей Игоревич**

Институт динамики систем и теории управления СО РАН. Ул. Лермонтова, 134. г. Иркутск, 664033.
Россия. Тел.: (3952) 42-71-00. E-mail: aleksey.potapov.icc@gmail.com

*Ведущий направление; [†]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: щелочные металлы, модель, электронное строение, теория.

Аннотация

Анализируется электронное строение атомов I группы таблицы Менделеева методом моделирования, в основе которого положена планетарная модель Резерфорда-Бора. Согласно данной модели валентный электрон обращается по эллиптической орбите в центральном поле положительно заряженного остова. Такое сведение многочастичной задачи многоэлектронных атомов к двухчастичной задаче основано на применении теоремы Гаусса. В принятой модели атомы щелочных металлов являются водородоподобными и уравнение движения электрона решается в рамках кеплеровой задачи.