

Тематический раздел: Теоретическая и компьютерная химия. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Теория строения вещества. Регистрационный код публикации: 12-30-4-25

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>
Поступила в редакцию 23 апреля 2012 г. УДК 539.182; 535.33.

Тематическое направление: Компьютерное моделирование атомов. Часть 2.

Моделирование атомов и катионов с двумя валентными электронами

© **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: атом гелия, гелийподобные атомы, модель, электронное строение, теория.

Аннотация

Предложена модель гелийподобных структур, представляющая систему двух связанных между собой эллиптических орбит с общим фокусом в положении ядра атома. Дано описание модели. Рассчитаны основные параметры гелия и атомов II группы таблицы Менделеева в основном и возбуждённом состоянии. Поставлен и выполнен вычислительный эксперимент.