

# Энергия связи многоэлектронных атомов по данным их поляризуемостей и ее периодичность в таблице Д.И. Менделеева

Потапов А.А. ([alex\\_p@icc.ru](mailto:alex_p@icc.ru))

Институт динамики систем и теории управления СО РАН

Основные закономерности, подтверждающие периодичность элементов, были установлены на основании анализа ряда экспериментально определяемых величин, таких как атомные объемы, плотность, ионизационные потенциалы и др. [1-6]. Наиболее представительной из числа известных величин, претендующих на роль атомной константы, является потенциал ионизации, который по определению представляет собой работу, необходимую для отрыва электрона от свободного атома. Однако связь между потенциалом ионизации и энергией связи внешнего электрона с атомом не однозначна, поскольку потенциал ионизации складывается из двух составляющих – энергии отрыва электрона и энергии, освобождаемой за счет перестройки электронной оболочки после удаления электрона. Аналогичная ситуация имеет место и с родственной потенциалу ионизации величиной – сродством к электрону.

По сравнению с перечисленными величинами поляризуемость имеет ряд несомненных преимуществ. Поляризуемость может быть измерена в условиях идеального состояния вещества, что обеспечивает ей безусловный статус константы. При этом она может быть измерена с высокой точностью (до 0,02%). В настоящее время найдены надежные корреляции поляризуемости с электронной структурой микрочастиц. Существенным представляется и то, что относительно недавно были получены достоверные данные по поляризуемостям большинства атомов в свободном состоянии [7]. В таблице сведены наиболее достоверные данные по поляризуемостям атомов в соответствии с их порядковым номером  $N$  в таблице Менделеева. Эти данные приняты для построения зависимости  $\alpha(N)$  (см. рис. 1). Здесь представлены *ns*- и *np*- элементы первых четырех периодов [7]. Зависимости  $\alpha(N)$  обнаруживают регулярное поведение поляризуемости в соответствии с периодическим характером заполнения электронных оболочек атомов. Из рис. 1 видно, что наибольшие значения  $\alpha$  у атомов щелочных металлов, а минимальные – у атомов благородных газов. В пределах каждого из периодов поляризуемость

атомов плавно уменьшается при увеличении порядкового номера Таблицы. В четвертом периоде эта закономерность для  $4s$ - и  $4p$ -элементов также сохраняется.

Наблюдаемое поведение  $\alpha(N)$  вполне согласуется со сложившимися представлениями об электронном строении атомов. У атомов 1-й группы Таблицы (атомы щелочных металлов) на внешней оболочке имеется по одному электрону, которые связаны с остовом атома относительно слабыми силами. А у атомов VIII группы оболочка заполнена полностью и электроны на этой оболочке имеют наибольшую энергию связи с ядром. Этим объясняется наблюдаемое поведение  $\alpha(N)$ : у атомов I группы поляризуемость (как мера податливости) имеет наибольшую величину, а у атомов VIII группы – наименьшую; у промежуточных атомов она плавно изменяется от наибольшего значения к наименьшему.

Поляризуемость атомов связана с их радиусом  $a_e$  простым соотношением [8]

$$a_e = \sqrt[3]{\alpha} \quad (1)$$

Понятно, что зависимости  $a_e(N)$  должны передавать закономерности рассмотренных выше зависимостей  $\alpha(N)$ . Примем в качестве периодической функции обратный радиус  $v_e = 1/a_e$ . Рассчитанные величины  $v_e$  приведены в таблице. Построенная по этим данным зависимости  $v_e(N)$  приведены на рис. 2. В таком виде зависимости  $v_e(N)$  выявляют новые особенности, присущие связям между поляризуемостью и электронным строением атома. Во-первых, выявляется небольшое различие в поведении  $s$ - и  $p$ -элементов, проявляющееся в различной крутизне зависимости  $v_e(N)$  как следствие различия в электронном строении  $s$ - и  $p$ -подоболочек атомов. Во-вторых, наблюдается высокая степень линейности у зависимостей  $v_e(N)$   $p$ -элементов в соответствующих периодах; их крутизна уменьшается при переходе от  $2p$ - к  $3p$ - и затем к  $4p$ -элементам.

Зависимости  $v_e(N)$  по своему характеру очень близки к аналогичным зависимостям рассчитываемых обратных орбитальных радиусов [1]. С другой стороны, ранее было установлено, что поляризационный и орбитальный радиусы связаны между собой соотношением  $a_e = 2a_0$  [8]. Орбитальный радиус атома водорода – это боровский радиус  $a_B$ , который выступает в качестве атомной константы и который предопределяет энергию связи атома водорода

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

где  $e$  – элементарный заряд.

Аналогичная (2) связь обратного орбитального радиуса с энергией связи (или потенциалом ионизации), по-видимому, характерна для всех атомов [1, с. 49].

Выявленные закономерности в поведении  $\alpha(N)$  и  $v_e(N)$  являются следствием присущей всем элементам обусловленности свойств (поляризуемости) их структурой (радиус, обратный радиус). В свою очередь структура атома предопределяет величину его энергии связи. Примером тому может служить основополагающее уравнения (2).

Принимая во внимание линейность зависимости  $v_e(N)$ , уравнение (2) можно обобщить на многоэлектронные атомы, так что

$$\mathcal{E} = -e^2 v_a \text{ или } \mathcal{E} = -\frac{e^2}{a_e} \quad (3)$$

В таком простейшем виде уравнение (3) было принято для расчета энергии связи атомов (см. таблицу), по которым, в свою очередь, построены зависимости  $\mathcal{E}(N)$  для соответствующих периодов таблицы Менделеева (см. рис. 3). Закономерности, характерные для зависимостей  $v_e(N)$  по рис. 2, проявляются и у соответствующих зависимостей  $\mathcal{E}(N)$ . Это вполне ожидаемый результат, подтверждающий линейную связь между величинами  $\mathcal{E}$  и  $v_e$ . Неожиданным оказалось то, что величины  $\mathcal{E}$ , рассчитанные по уравнению (3), находятся на удивление в неплохом согласии с данными по потенциалам ионизации  $I$  [9]. У отдельных элементов имеются достаточно большие расхождения между этими величинами, но они имеют вполне систематический характер. Зависимости  $\mathcal{E}(N)$  выглядят как результат спрямления зависимостей  $I(N)$ . Такое соответственное поведение величин  $\mathcal{E}$  и  $I$  указывает на их одинаковое происхождение.

Наблюдаемые различия между  $\mathcal{E}$  и  $I$  имеют простое объяснение. Энергия связи  $\mathcal{E}$  определяется методом измерения, согласно которому энергетический уровень отсчета в процессе измерения поляризуемости остается неизменным. При определении потенциала ионизации  $I$  происходит значительная перестройка энергетического уровня конечного (ионизированного) состояния атома за счет перестройки электронной оболочки после удаления электрона. Поэтому потенциал 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: для I группы ( $ns^1$ -элементы) величина  $\Delta$  находится в пределах (0,2-0,4)эВ (что свидетельствует об относительно небольшом возмущении энергии остовов водородоподобных атомов); для II группы ( $ns^2$ -элементы)  $\Delta$  увеличивается до (1-1,2)эВ (свидетельствуя о различии  $ns^1$ - и  $ns^2$ -состояний атомов этой группы); для III группы ( $np^1$ -элементы)  $\Delta$  соответствует (1-1,6)эВ; для IV группы  $\Delta$  снова уменьшается и т.д. Наибольшие величины  $\Delta$  (до 3,6эВ) наблюдаются у атомов благородных газов ( $np^6$ -элементы VIII группы).

Т.о., между энергией связи и потенциалом ионизации имеется вполне однозначное соответствие. Зависимости  $\mathcal{E}(Z)$  и  $I(Z)$  коррелированы между собой, отражая их единство в самом важном аспекте нашего рассмотрения – стабильности и устойчивости атомов. Они не тождественны друг другу, но взаимодополнительны.

Характерно, что для атомов II периода, у которых потенциалы ионизации  $I$  и энергии связи  $\mathcal{E}$  атомов наиболее близки друг к другу, имеет место неплохое согласие между поляризационными и орбитальными радиусами  $a_e = 2a_0$  [8]. Напротив, чем большее различие между  $I$  и  $\mathcal{E}$ , тем большая разница ( $2a_0 - a_e$ ). Можно предположить, что различие между величинами  $2a_0$  и  $a_e$  связано с недостаточно совершенными расчетами орбитальных радиусов  $a_0$ , включающими в себя процедуру нормирования подгоночных параметров (константы экранирования и эффективного квантового числа) по эмпирическим потенциалом ионизации  $I$  [10, с. 339].

Конечно же, наблюдаемое совпадение величин  $\mathcal{E}$  и  $I$ , а также  $2a_0$  и  $a_e$  нельзя считать случайным. Чтобы объяснить это совпадение, надо дать обоснование фактически угаданному уравнению (3).

В первую очередь, надо отметить, что по своей форме уравнение (3) представляет потенциальную энергию взаимодействия единичных зарядов. Действительно, данное требование выполняется для электронов, находящихся на максимальном удалении от ядра (т.е. на расстоянии  $a_e$ ), когда в соответствии с законом сохранения энергии кинетическая энергия достигает минимума, а полная энергия связи  $\mathcal{E}$  определяется её потенциальной энергией.

Далее, в формулу (3) входят не эффективные, а единичные заряды. Объяснить такое упрощение модели атома можно на основании следующего. Внешние электроны не различимы между собой и к ним вполне применимо хорошо известное в атомной физике приближение независимых электронов. В данном приближении

энергия взаимодействия эффективного заряда остова атома с каждым из электронов внешней оболочки одинакова для всех электронов. Поэтому один из зарядов в (3) можно с полным правом отнести к заряду электрона  $e_-$ .

В соответствии с оболочечной моделью атома и на основании теоремы Гаусса действующий на внешние электроны заряд ядра равен  $q_+ = Ne_+$ , где  $N$  – число электронов на внешней оболочке. Энергия взаимодействия между ними равна  $\mathcal{E} = \frac{Ne_+e_-}{a}$ , где  $a$  – расстояние между зарядами  $q_+$  и  $e_-$ . Это выражение тождественно уравнению (3) в приближении  $a_e = \frac{a}{N}$ , где  $a_e$  – эффективный (измеряемый) радиус атома.

Т.о., уравнение (3) имеет не только эмпирическое обоснование (на уровне погрешности соответствия между энергией связи и потенциалом ионизации атомов таблицы Менделеева), но и правильно отражает концептуальные положения оболочечной модели атома.

Некоторое неудовлетворение вызывает тот факт, что при относительно неплохом согласии величин  $\mathcal{E}$  и  $I$  атомов I группы (металлы), различие между величинами  $2a_0$  и  $a_e$  этих же атомов оказывается более существенным и достигает 20%. Причина такого расхождения заключается в следующем.

По определению орбитальный радиус  $a_0$  – это расстояние между ядром и внешними электронами, которому соответствует максимум электронной плотности [1]. В гипотетической модели слабого взаимодействия внешнего электрона с остовом атома удвоенный орбитальный радиус был бы равен действительному радиусу атома  $2a_0 = a_e$ . Но резкий переход от одного периода к другому сопровождается сильным возмущением остова атома, имеющего конфигурацию атома VIII группы предшествующего  $(n-1)$  периода,  $ns^1$ -электроном. Дело в том, что переход между периодами сопровождается закономерным сокращением радиусов всех внутренних оболочек атома и соответствующим перераспределением заряда остова  $ns^1$ -элемента при увеличении заряда ядра на единицу  $e_+$ . В результате этого остова атома «приобретает» эффективный заряд  $\Delta q$ , соответствующим образом оказывая воздействие на валентный  $ns^1$ -электрон. Степень такого воздействия можно оценить производя экстраполяцию линейного участка зависимости  $\mathcal{E}(N)$  в область предполагаемого нулевого заряда остова атома как показано на рис. 3.

Отсекаемый на оси ординат отрезок  $\mathcal{E}_{\text{ост}}$  представляет собой «остаточную» энергию взаимодействия  $\mathcal{E}_{\text{ост}}$  остова атома с внешним электроном  $e_-$ . Эта энергия обусловлена дополнительным зарядом  $\Delta q$ , так что  $\mathcal{E}_{\text{ост}} = \frac{\Delta q e_-}{a_e}$  (здесь  $a_e$  – радиус остова атома, принимаемый равным радиусу атома благородного газа предшествующей оболочки). Данное выражение для  $\mathcal{E}_{\text{ост}}$  можно привести к виду  $\frac{\mathcal{E}_{\text{ост}}}{\mathcal{E}} = \frac{\Delta q}{e_-}$ , поскольку относительные изменения радиуса  $\frac{\Delta a}{a}$  обусловлены относительными изменениями заряда  $\frac{\Delta q}{e_-}$ , то  $\frac{\mathcal{E}_{\text{ост}}}{\mathcal{E}} = \frac{\Delta a}{a_e}$ . Т.о., поправку на возмущение остова атома можно найти, используя данные  $\mathcal{E}_{\text{ост}}$ , полученные путем экстраполяции зависимостей  $\mathcal{E}(N)$  на  $N=0$ , так что  $\Delta a = a_e \frac{\mathcal{E}_{\text{ост}}}{\mathcal{E}}$ .

Можно дать количественную оценку поправок  $\Delta a$  для  $ns^1$ -элементов таблицы Менделеева. Для  $2s^1$ -элемента (лития) экстраполяция прямой Li – Be дает  $\mathcal{E}_{\text{ост}} \approx 2\text{эВ}$  и соответственно  $\frac{\mathcal{E}_{\text{ост}}}{\mathcal{E}} = \frac{2}{5}$ ; отсюда данная поправка равна  $\Delta a = 0,4a_e \approx 0,21\text{Å}$ , где  $a_e$  – радиус атома гелия, выступающего как радиус невозмущенного остова атома лития. С учетом данной поправки величина  $(2a_0 - \Delta a)$  равна  $2,96\text{Å}$ , что с погрешностью порядка 1% согласуется с поляризационным радиусом  $a_e$ .

Для  $2s^2$ -элемента (бериллия) экстраполяция прямой Be – Ne на рис. 3 дает  $\mathcal{E}_{\text{ост}} \approx 4\text{эВ}$  и соответственно  $\frac{\mathcal{E}_{\text{ост}}}{\mathcal{E}} = 0,5$ ;  $\Delta a = 0,5 \cdot 0,59\text{Å} = 0,29\text{Å}$ ;  $2a_0 - \Delta a = 2,08 - 0,29\text{Å} = 1,79\text{Å}$  (при  $a_e = 1,78\text{Å}$ ).

В силу линейной зависимости  $\mathcal{E}(N)$ , поправка  $\Delta a$  для  $2p$ -элементов невелика и для них равенство  $2a_0 \approx a_e$  выполняется на уровне погрешности принимаемых для расчета величин.

Сопоставим между собой величины  $(2a_0 - \Delta a)$  и  $a_e$  других  $ns$ -элементов.

Натрий ( $3s^1$ ):  $\mathcal{E}_{\text{ост}} = 3\text{эВ}$ ,  $\frac{\mathcal{E}_{\text{ост}}}{\mathcal{E}} = \frac{3}{5}$ ;  $\Delta a = 0,6a_e = 0,6 \cdot 0,735\text{Å} \approx 0,44\text{Å}$ ;

$2a_0 - \Delta a = (3,42 - 0,4)\text{Å} = 2,98\text{Å}$  (при  $a_e = 2,89\text{Å}$ ).

$$\text{Магний } (3s^2): \quad \mathcal{E}_{\text{ост}} = 4,5\text{эВ}; \quad \frac{\mathcal{E}_{\text{ост}}}{\mathcal{E}} = \frac{4,5}{6,5}; \quad \Delta a = 0,735 \cdot 0,69 \text{ \AA} \approx 0,82 \text{ \AA};$$

$$2a_0 - \Delta a = (2,56 - 0,52) \text{ \AA} \approx 2,04 \text{ \AA} \quad (\text{при } a_e = 2,20 \text{ \AA}).$$

$$\text{Калий } (4s^1): \quad \mathcal{E}_{\text{ост}} = 3\text{эВ}, \quad \frac{\mathcal{E}_{\text{ост}}}{\mathcal{E}} = \frac{3}{4}; \quad \Delta a = 0,75 \cdot 1,18 \text{ \AA} \approx 0,88 \text{ \AA};$$

$$2a_0 - \Delta a = (4,32 - 0,88) \text{ \AA} \approx 3,44 \text{ \AA} \quad (\text{при } a_e = 3,51 \text{ \AA}).$$

$$\text{Кальций } (4s^2): \quad \mathcal{E}_{\text{ост}} = 3\text{эВ}, \quad \frac{\mathcal{E}_{\text{ост}}}{\mathcal{E}} = \frac{3}{5}; \quad \Delta a = 0,6 \cdot 1,18 \text{ \AA} \approx 0,7 \text{ \AA};$$

$$2a_0 - \Delta a = (3,38 - 0,7) \text{ \AA} = 2,68 \text{ \AA} \quad (\text{при } a_e = 2,20 \text{ \AA}).$$

$$\text{Рубидий } (5s^1): \quad \mathcal{E}_{\text{ост}} = 3\text{эВ}, \quad \frac{\mathcal{E}_{\text{ост}}}{\mathcal{E}} = \frac{3}{4}; \quad \Delta a = 0,75 \cdot 1,35 \text{ \AA} \approx 1,0 \text{ \AA};$$

$$2a_0 - \Delta a = (4,58 - 1,0) \text{ \AA} \approx 3,58 \text{ \AA} \quad (\text{при } a_e = 3,62 \text{ \AA}).$$

$$\text{Стронций } (5s^2): \quad \mathcal{E}_{\text{ост}} = 3\text{эВ}, \quad \frac{\mathcal{E}_{\text{ост}}}{\mathcal{E}} = \frac{3}{5}; \quad \Delta a = 0,6 \cdot 1,35 \text{ \AA} \approx 0,8 \text{ \AA};$$

$$2a_0 - \Delta a = (3,68 - 0,8) \text{ \AA} \approx 2,9 \text{ \AA} \quad (\text{при } a_e = 3,02 \text{ \AA}).$$

Полученные таким образом оценки поправок  $\Delta a$  показывают, что они улучшают согласие между рассчитываемыми орбитальными радиусами и эмпирическими поляризационными радиусами  $ns$ -элементов.

Зависимости  $\mathcal{E}(N)$  (рис. 3) внешне напоминают закон Мозли, которому подчиняются внутренние электроны атомов. Этот закон можно представить в виде [11, с. 68]

$$\mathcal{E} = -\frac{e^2(Z-\delta)^2}{2a_B n^2}, \quad (5)$$

где  $Z$  – порядковый номер элемента,  $\delta$  – константа экранирования,  $n$  – номер электронной оболочки,  $a_B$  – борковский радиус.

С позиций классической электростатики уравнение (5) можно интерпретировать следующим образом. Для выделенного электрона  $n$ -й оболочки данное уравнение описывает взаимодействие эффективного заряда ядра  $e_+(Z-\delta)$  с эффективным зарядом всех вышележащих электронов, равным  $e_-(Z-\delta)$ , разделяемых расстоянием  $2a_B n^2$ . Такой подход основан на теореме Гаусса о квазиточечном заряде сферы с зарядом, равным сумме всех положительных и

отрицательных зарядов внутри данной сферы. Здесь константа экранирования  $\delta$  соответствует числу электронов внутри выделенной сферы.

В пределе внешних электронов и в приближении невзаимодействующих электронов заряд  $e_-(Z - \delta)$  в формуле (5) становится равным единичному заряду  $e_-$ , а заряд ядра в соответствии с теоремой Гаусса – квазитоочечному заряду на предшествующей внешним электронам оболочки, т.е.  $Ze_+ + (Z - N)e_- = Ne_+$ .

Производя замену зарядов в (5) на  $e_-$  и  $Ne_+$  для внешних электронов, получаем

уравнение (3) с эффективным радиусом  $a_e = \frac{2a_b n^2}{N}$ . В отличие от закона Мозли,

согласно которому энергия связи внутренних электронов квадратична по  $Z$ , уравнение (3) представляет линейную связь энергии внешних электронов с порядковым номером элемента  $N$  в соответствующем периоде таблицы Менделеева и в этом отношении его можно рассматривать как предельный случай уравнения (5).

Интересные закономерности в поведении  $\mathcal{E}(Z)$  обнаруживаются при рассмотрении энергии связи  $\mathcal{E}$  в зависимости от порядкового номера элемента  $Z$  в группах таблицы Менделеева. На рис. 4 представлены зависимости  $\mathcal{E}(Z)$   $ns^1$ -элементов (атомов водорода и металлов – Li, Na, K, Rb, Cs, Fr) и  $\mathcal{E}(Z)$   $np^6$ -элементов (атомов благородных газов – He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn). У обеих зависимостей наблюдается быстрое падение энергии  $\mathcal{E}$  в области малых  $Z$  и насыщение величин  $\mathcal{E}$  в области больших  $Z$ . Такое поведение  $\mathcal{E}(Z)$  атомов в крайних группах таблицы Менделеева отражает характер заполнения электронных оболочек. Заполнение каждой новой оболочки начинается с одного  $ns^1$ -электрона, который для всех  $ns^1$ -элементов находится в кулоновском поле единичного положительного заряда  $e_+$  (в соответствии с теоремой Гаусса). Т.е. энергия связи  $\mathcal{E}$

$ns^1$ -элементов  $\mathcal{E} = -\frac{e^2}{a_e}$  зависит только от радиуса атома  $a_e$ . В свою очередь, радиус

$a_e$  увеличивается с увеличением номера  $n$  оболочки и в качественном отношении объясняет обратную степенную функцию  $\mathcal{E}(Z)$  на рис. 4. Естественно предположить, что для двух взаимодействующих единичных зарядов  $e_+$  и  $e_-$  при достижении некоторого предельного радиуса, энергия связи уже не сможет обеспечить устойчивость атома как целостной автономной системы. Из рис. 4 видно, что энергия атома франция вплотную примыкает к критической величине энергии,



получаемой в пределе  $Z \rightarrow \infty$  (на рис. 4 показана пунктиром). Образование следующей оболочки (VIII), как это следует из рис. 4, оказывается не возможным из-за недостаточной энергии связи такого гипотетического  $8s^1$ -элемента.

Наблюдаемая зависимость  $\mathcal{E}(Z)$  для атомов благородных газов также имеет свое объяснение. Увеличение энергии связи в каждом из периодов в процессе заполнения внешней оболочки в соответствии с теоремой Гаусса определяется увеличивающимся зарядом  $Ne_+$  остова атома. Поэтому в каждом из периодов энергия связи атома благородного газа достигает максимальной величины (см. таблицу). Отличие энергий связи разных атомов благородных газов лишь в их радиусах. Поэтому увеличение числа оболочек атома приводит к увеличению его радиуса и согласно (3) к соответствующему уменьшению энергии связи, что находит свое подтверждение в виде экспериментальной зависимости  $\mathcal{E}(Z)$  на рис. 4. В пределе  $Z \rightarrow \infty$  имеем предельно допустимую величину энергии связи для атомов благородных газов. К этой величине (пунктирная линия на рис. 4) вплотную приближается энергия связи атома радона – последнего из класса благородных газов, а завершение следующей  $7p^6$ -оболочки по этой причине становится уже не возможным.

Обращает на себя внимание тот факт, что лучи зависимостей  $\mathcal{E}(Z)$   $ns$ -элементов IV, V, и VI периодов при их экстраполяции на нулевой заряд  $N \rightarrow 0$  остова сходятся в узловой точке, равной некоторой критической энергии  $\mathcal{E}_{кр}$  (рис. 3). Это означает, что распределение зарядов высоколежащих оболочек на границе остова атома и внешнего электрона уже не зависит от порядкового номера элемента и фактически определяется только радиусом атома. Радиус атома также предопределяет и крутизну зависимости  $\mathcal{E}(Z)$  внутри каждого из периодов. Так что устойчивость и стабильность атома целиком определяется его оболочечным строением и его радиусом.

В этом отношении напрашивается связь между устойчивостью атома и явлением радиоактивности. В начале 20-го столетия достаточно популярной была гипотеза о зависимости устойчивости тяжелых ядер от электронного строения оболочек, в первую очередь  $K$ -оболочки (в связи с сильным сокращением исходного боровского радиуса) [2, с. 196]. Если принять эту версию, то  $\alpha$ -распад как первичный процесс явления радиоактивности неизбежно должны приводить к нарушению равновесия между электрическими зарядами ядра и электронов, что запускает процесс испускания «избыточных» электронов, в результате которого

восстанавливается первоначальный баланс между зарядами в атоме. В свою очередь,  $\beta$ -распад влечет за собой  $\gamma$ -излучение, обусловленное квантовыми переходами электронов между оболочками.

## ВЫВОДЫ

1. При всей сложности (или неопределенности нашего понимания) электронного строения атомов, их энергия связи подчиняется предельно простому эмпирическому уравнению  $\mathcal{E} = -\frac{e^2}{a_e}$ , которое представляет собой энергию кулоновского взаимодействия точечных единичных зарядов  $e$  ядра атома и валентных электронов, находящихся на максимальном друг от друга удалении  $a_e$ . Данной феноменологии атома соответствует оболочечная модель слабо взаимодействующих электронов.

2. Величины  $\mathcal{E}$  и  $a_e$  взаимосвязаны и взаимообусловлены, что обеспечивает атомам высокий уровень самоорганизации их электронной структуры, проявляющийся в присущей атомам индивидуальности и тождественности.

3. Энергия связи атомов обнаруживает линейную зависимость от порядкового номера в пределах соответствующих периодов таблицы Менделеева. Зависимости энергии связи от порядкового номера элемента  $Z$  в крайних (I и VIII) группах таблицы Менделеева представляют собой обратные степенные функции, которые путем их экстраполяции позволяют выявить уровни предельной «естественной» устойчивости атомов в области больших  $Z$ .

## ЛИТЕРАТУРА

1. Годовиков А.А. Кристаллохимия простых веществ. – Новосибирск: Наука, 1979. – 181 с.
2. Трифонов Д.Н. Структура и границы периодической системы. – М.: Атомиздат, 1969. – 272 с.
3. Трифонов Д.Н. Возникновение и развитие современной атомистики. – В кн.: Физика XX века: развитие и перспективы. – М.: Наука, 1984. – с. 93-135.
4. Фримантл М. Химия в действии. – М.: Мир, 1998. – 528 с.
5. Кораблева Т.П., Корольков Д.В. Развитие теории периодической системы во второй половине 20 века. Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия. 2002, т.43, № 2, с. 113-116.
6. Регель А.З., Глазков В.М. Периодический закон и физические свойства электронных расплавов. – М.: Наука, 1978. – 309 с.
7. Miller T.M., Bederson B. – Adv. At. Mol. Phys., 1977, v. 13. с. 1-40.

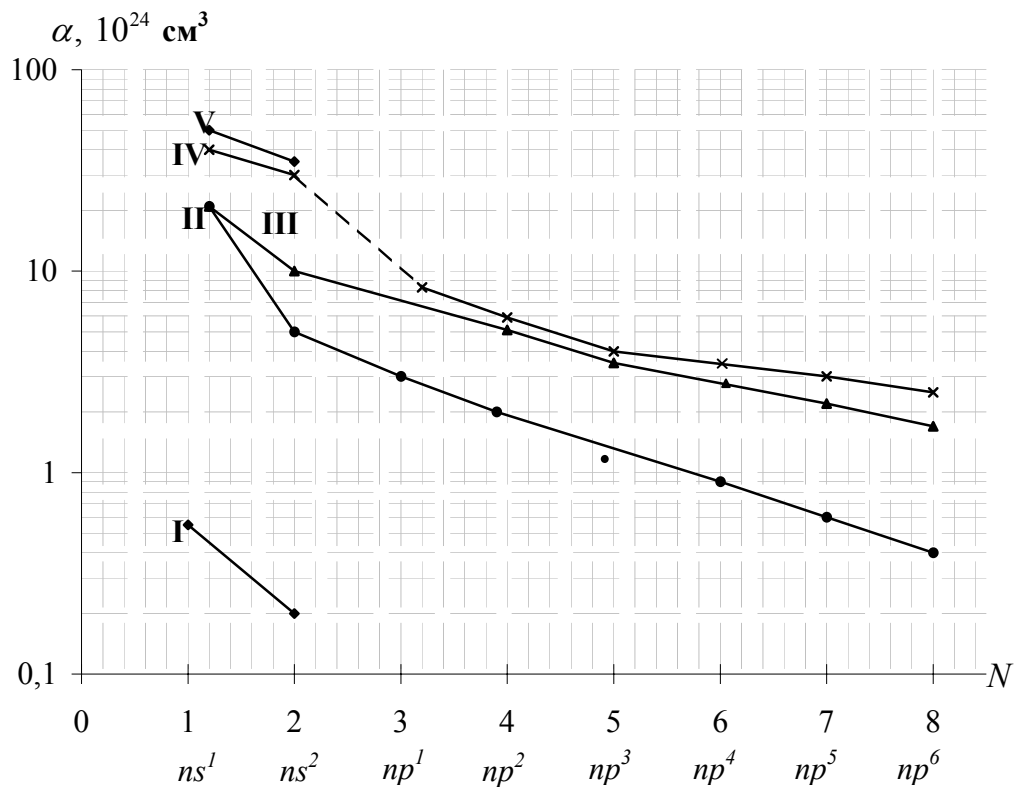
8. Потапов А.А. Деформационная поляризация: поиск оптимальных моделей. – Новосибирск: Наука, 2004. – 511 с.
9. Бацанов С.С. Экспериментальные основы структурной химии. – М. Изд-во стандартов, 1986. – 240 с.
10. Флайгер У. Строение и динамика молекул. – М.: Мир, 1982. т. 1. – 407 с.
11. Робертсон Б. Современная физика в прикладных науках. – М.: Мир, 1985. – 272с.

## ПРИЛОЖЕНИЕ

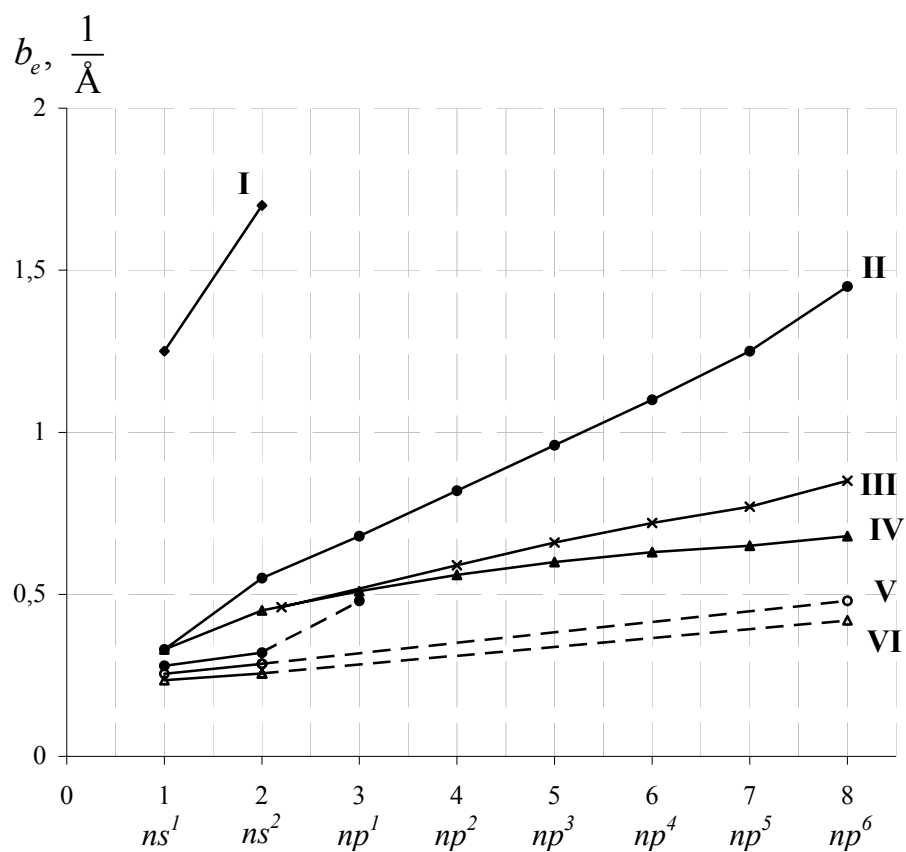
Таблица. Данные по поляризуемостям, поляризационным радиусам, орбитальным радиусам, потенциалам ионизации, энергиям связи, обратным поляризационным радиусам элементов периодической таблицы Д.И. Менделеева

$Z$	$\alpha, \text{Å}^3$	$a_e, \text{Å}$	$a_0, \text{Å}$	$I, \text{эВ}$	$\mathcal{E}, \text{эВ}$	$\epsilon_e, 1/\text{Å}$	$N$	период
H	0,667	0,874	0,529	13,6	16,5	1,145	1	I
He	0,205	0,590	0,291	24,6	24,5	1,70	2	
Li	24,3	2,90	1,586	5,39	4,97	0,345	1	II
Be	5,60	1,78	1,040	9,32	8,06	0,56	2	
B	3,03	1,49	0,776	8,30	9,65	0,67	3	
C	1,76	1,21	0,620	11,3	12,0	0,83	4	
N	1,10	1,03	0,521	14,5	14,0	0,97	5	
O	0,802	0,93	0,450	13,6	15,5	1,08	6	
F	0,557	0,823	0,396	17,4	17,5	1,215	7	
Ne	0,395	0,734	0,354	21,6	19,6	1,36	8	
Na	24,1	2,89	1,713	5,14	4,98	0,346	1	III
Mg	10,6	2,20	1,28	7,65	6,55	0,455	2	
Al	8,34	2,03	1,31	5,99	7,1	0,493	3	
Si	5,38	1,75	1,07	8,15	8,21	0,57	4	
P	3,63	1,54	0,92	10,5	9,36	0,65	5	
S	2,90	1,43	0,81	10,4	10,1	0,70	6	
Cl	2,18	1,30	0,725	13,0	11,1	0,77	7	
Ar	1,64	1,18	0,66	15,8	12,24	0,85	8	
K	43,4	3,514	2,16	4,34	4,1	0,285	1	IV
Ca	25,0	2,92	1,69	6,11	4,9	0,34	2	
Ga	8,12	2,01	1,25	6,00	7,16	0,50	3	
Ge	6,07	1,82	1,09	7,90	7,89	0,55	4	
As	4,31	1,63	1,00	9,81	8,85	0,614	5	
Se	3,77	1,56	0,92	9,75	9,25	0,64	6	
Br	3,05	1,45	0,85	11,8	9,93	0,69	7	
Kr	2,48	1,35	0,795	14,0	10,64	0,74	8	
Rb	47,3	3,62	2,29	4,18	3,98	0,28	1	V
Sr	27,6	3,02	1,84	5,69	4,76	0,33	2	
⋮								
Xe	4,04	1,64	0,99	12,1	8,79	0,61	8	
Cs	59,6	3,9	2,52	3,89	3,69	0,256	1	VI
Ba	39,7	3,4	2,06	5,21	4,22	0,29	2	
⋮								

Rh	6,3	5,8	1,09	10,8	8,1	0,55	8	
Fr	67	4,05	2,45	3,98	3,56	0,25	1	



**Рис. 1. Зависимость поляризуемостей  $ns$ - и  $np$ -элементов от порядкового номера  $N$  в разных (I-IV) периодах таблицы Менделеева.**



**Рис. 2. Зависимость обратного поляризационного радиуса от порядкового номера атома в разных (I-VI) периодах таблицы Д.И. Менделеева.**

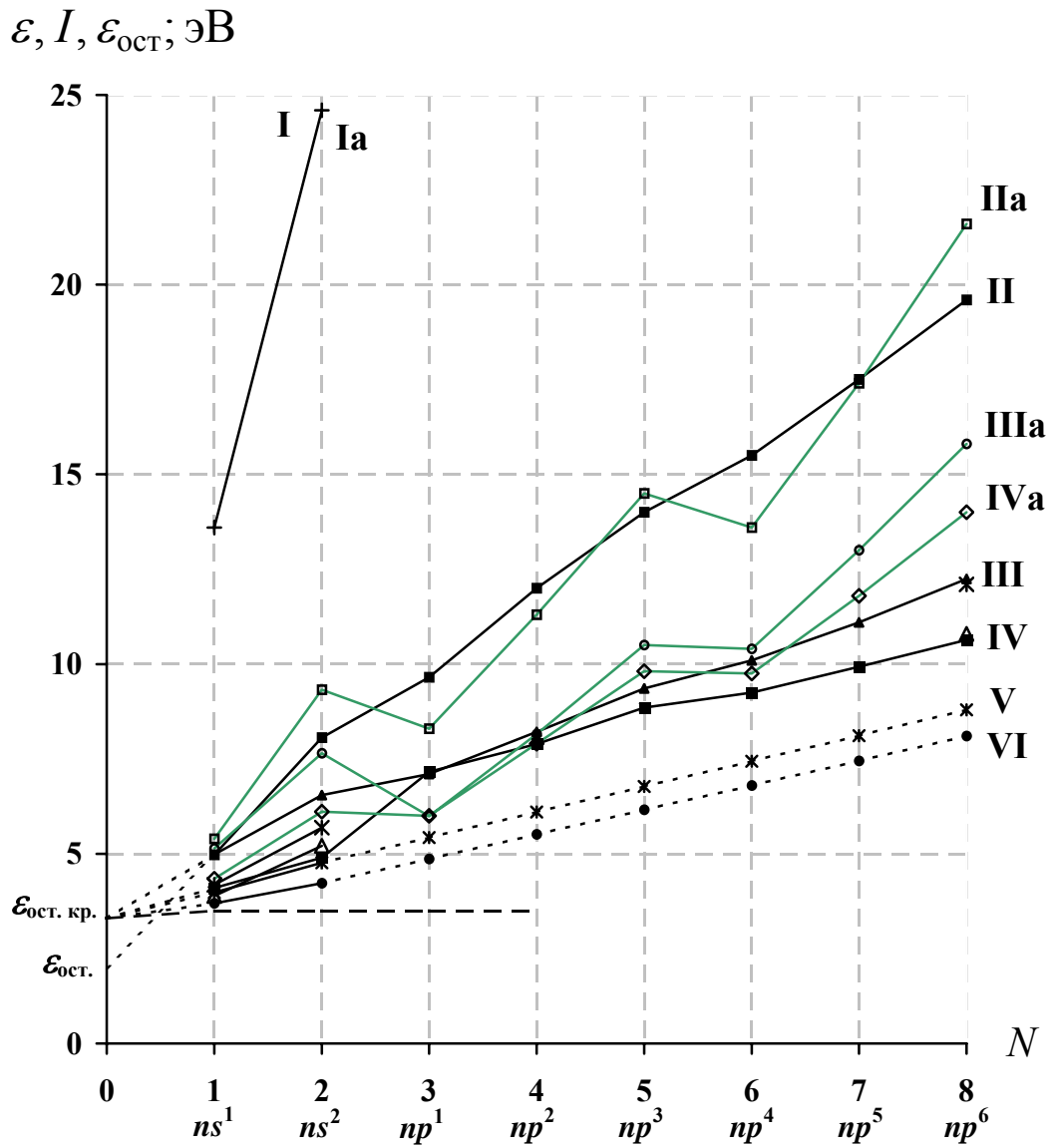
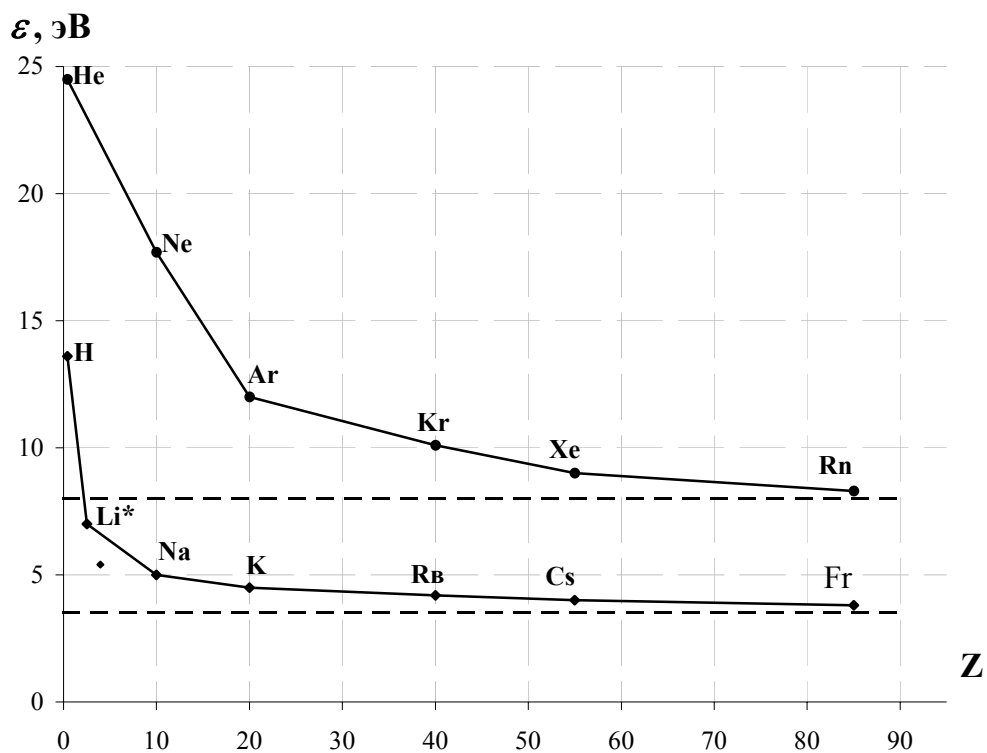


Рис. 3. Зависимости энергии связи  $\varepsilon$  (I-VI) и потенциала ионизации  $I$  (Ia-IVa) от порядкового номера  $N$  в разных периодах I-VI для  $ns$ - и  $np$ -элементов.





**Рис. 4. Зависимости энергии связи и потенциала ионизации от порядкового номера элемента таблицы Д.И.Менделеева:**

—●— 1 - для первой группы —●— 2 - для восьмой группы

Пунктиром показаны предельные уровни энергии, полученные путем экстраполяции этих зависимостей на  $Z \rightarrow \infty$ .

\* Здесь для расчета энергии принята поляризуемость  $\alpha = 12 \cdot 10^{-24} \text{ см}^3$  по данным Парселл Э. «Электричество и магнетизм». – М.: Наука, с. 306.