

ЗАКОНЫ ФОРМИРОВАНИЯ ЭЛЕКТРОННЫХ ОБОЛОЧЕК АТОМОВ.

© Верин О.Г.

Контакт с автором verinOG@list.ru

Анализ, основанный на экспериментальных характеристиках атомов, показывает, что теория «движения» электронов в атомах в ее современном виде принципиально ошибочна. Электроны в составе атомов нельзя рассматривать как отдельные частицы, так как в каждом электронном слое они образуют бозе-конденсат. Поэтому реальные электронные «коллективы» совершенно не похожи на рисуемые теорией вероятностные «рыхлые» орбитали, «размазанные» по всему пространству.

Опубликованная мной статья [1], посвященная теории атома, вызвала много положительных откликов, но значительная часть читателей считает, что из-за большого объема статьи и вследствие ее общей направленности на анализ физических основ строения атома, описанию собственно электронных оболочек (во второй половине статьи) уделено недостаточно внимания.

*Отвечая на эти замечания, данную статью я полностью посвящаю анализу **электронных оболочек** (используется как общий термин) атомов.*

В статье проанализированы известные многократно подтвержденные экспериментами справочные данные о физических характеристиках атомов. Поэтому обнаруженные закономерности, несомненно, носят объективный характер и послужат надежной основой для дальнейших исследований.

1. Резонансная природа электронных оболочек атомов

Свойства и строение электронных оболочек атомов естественным образом определяются *корпускулярно-волновой* природой электронов, которая отчетливо проявляется и надежно установлена в самых разных экспериментах.

Поэтому, исходя из волновых свойств электрона, известный постулат Бора о квантовании момента количества движения на самом деле логичнее рассматривать как **условие резонанса**: на длине орбиты должно укладываться целое количество длин волн электрона h/p (хотя математически это одно и то же):

$$2\pi R = n\lambda = n\frac{h}{p}, \quad pR = n\hbar, \quad (h = 2\pi\hbar). \quad (1)$$

Число n называется *главным квантовым числом* и принимает целые значения, R – радиус орбиты, p – импульс электрона, h – постоянная Планка.

Выражение (1) фактически задает «разрешенные» резонансные значения пространственного волнового коэффициента для электронной оболочки

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{n}{R}. \quad (2)$$

Такой сугубо «практический подход», без привлечения «высокой» теории, как мы увидим, вполне достаточен и эффективен для исследования накопленных экспериментальных данных и дал возможность выявить важнейшие закономерности строения электронных оболочек атомов. Тем более что анализ справочных характеристик, как уже говорилось, убедительно свидетельствует о несостоятельности существующей теории атома.

Ближайшие к ядру электронные оболочки атомов

При рассмотрении простейших электронных оболочек атомов «бросается в глаза» точное соответствие результатов расчетов, получаемых из обычных резонансных условий (1), имеющимся экспериментальным данным.

Как известно, это в первую очередь относится к расчету атома водорода [2].

В электронной оболочке водорода единственный электрон испытывает на себе силу притяжения ядра, в противовес которой действует центробежная сила.

Это равенство сил определяет величину кинетической энергии электрона:

$$\frac{mv^2}{R} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon R^2}, \quad \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon R}. \quad (3)$$

Из выражений (1) и (3) находим возможные значения радиуса орбиты

$$R = n^2 \frac{\epsilon h^2}{\pi m e^2} = n^2 R_B, \quad R_B = \frac{\epsilon h^2}{\pi m e^2} \approx 0,529 \cdot 10^{-10} \text{ м}. \quad (4)$$

При $n=1$ радиус принимает наименьшее значение, равное «радиусу Бора».

В полном соответствии с *теоремой о вириале*, кинетическая энергия (3) оказывается равной половине абсолютной величины отрицательной потенциальной энергии электрона. Поэтому полная энергия электрона является также отрицательной величиной, численно равной кинетической энергии

$$W = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon R} + \frac{mv^2}{2} = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon R}. \quad (5)$$

С учетом (4) полная энергия электрона принимает дискретные значения:

$$W = -\frac{m e^4}{8 \epsilon^2 h^2} \frac{1}{n^2}. \quad (6)$$

Этот результат в свое время помог разобраться со спектром водорода. При этом наименьшая энергия (6) при $n=1$ оказалась точно равна известной величине потенциала ионизации атома водорода 13,6 эВ.

Такие простые и точные расчеты возможны и в ряде других случаев.

В частности, полное соответствие расчетного значения потенциала ионизации для *последнего электрона* с экспериментальными данными имеет место у всех атомов, имеющих в общем случае заряд ядра ze

$$\varphi_{iz} = \frac{z^2 e}{8\pi\epsilon R_B} = z^2 \cdot 13,6 \text{ эВ}. \quad (7)$$

Например, экспериментальное значение потенциала ионизации последнего (десятого) электрона атома неона равно 1360,2 эВ [3].

В отличие от атома водорода, где электрон располагается в одном из максимумов резонанса, **в атоме гелия** электронная оболочка также имеет один период $n=1$, но содержит два электрона, которые занимают обе пучности резонанса, располагаясь с разных сторон от ядра (рис. 1).

Заметим, что свойства гелия как инертного газа определяются как раз этим обстоятельством – в электронной оболочке гелия нет свободного места для присоединения других электронов (обе пучности резонанса заняты электронами).

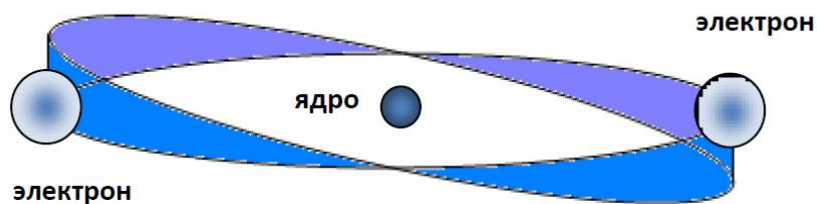


Рис. 1. Схематическое изображение атома гелия.

Радиус электронной оболочки гелия почти в два раза меньше, чем у атома водорода, так как электроны испытывают на себе большую притягивающую силу со стороны ядра гелия, заряд которого равен двум зарядам электрона.

Проведем расчет, исходя из баланса сил, действующих на электроны оболочки - электростатической (центростремительной) и центробежной

$$F_{uc} = \frac{2e^2}{4\pi\epsilon R^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon (2R)^2}, \quad F_{цб} = \frac{mv^2}{R} = \frac{p^2}{mR}. \quad (8)$$

Учитывая условие резонанса ($n=1$)

$$2\pi R = \lambda = \frac{h}{p}, \quad (9)$$

и приравняв друг другу разнонаправленные силы (8), получаем:

$$R = \frac{4}{7} \frac{\epsilon h^2}{\pi m e^2} = \frac{4}{7} R_B. \quad (10)$$

Электроны располагаются симметрично относительно ядра и поэтому имеют одинаковую энергию. Однако в процессе ионизации, когда из атома в результате внешнего воздействия удаляется один из электронов, второй электрон одновременно с этим приближается к ядру и отдает часть своей энергии вылетающему из атома электрону. За счет этого потенциал ионизации первого электрона несколько уменьшается. Но когда происходит второй акт ионизации

(удаление из атома второго электрона), то затраты энергии возрастают на ту же величину «добавки», которая была сообщена первому электрону.

Поэтому, чтобы не заниматься таким «перераспределением» энергии, сравнение расчетов с экспериментальными данными удобно производить, используя *суммарные величины потенциалов ионизации электронов*.

Анализируя атом водорода, мы убедились, что потенциал ионизации численно соответствует кинетической энергии электрона. Принимая это в расчет, из (9) и (10) получаем кинетическую энергию каждого из электронов атома гелия (условную величину потенциала ионизации):

$$e\varphi_i = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m(2\pi R)^2} = \frac{49}{16} \frac{e^2}{8\pi\epsilon R_B} = \frac{49}{16} \cdot 13,6\text{эВ} = 41,65\text{эВ}. \quad (11)$$

Следовательно, удвоенная расчетная величина (11) должна быть равна сумме двух реальных потенциалов ионизации атома (при последовательном удалении сначала первого электрона, а затем второго электрона). Расчетная сумма двух потенциалов ионизации, таким образом, равна 83,3 эВ, а сумма экспериментальных значений равна 24,58+54,4≈79 эВ.

Можно сказать, что полученная точность для такого элементарного расчета является более чем удовлетворительной, но не «идеальной», как это было в случаях с единственным электроном в оболочке.

Но, может быть, это случайный результат?

У нас есть возможность это проверить, так как **самая близкая к ядру электронная оболочка у всех остальных атомов**, также как и электронная оболочка гелия, состоит из двух электронов ($n=1$).

Аналогично расчетам электронной оболочки гелия, но положив в общем случае заряд ядра равным ze , получаем формулы для радиуса электронной оболочки и для суммы потенциалов ионизации двух электронов оболочки:

$$R = \frac{4}{4z-1} R_B, \quad \varphi_1 + \varphi_2 = \frac{(4z-1)^2}{8} \cdot 13,6\text{эВ}. \quad (12)$$

Расчеты и экспериментальные данные [3] сведены в таблице 1.

Таблица 1

Параметры ближайшей к ядру электронной оболочки (из двух электронов)

Заряд ядра, e	Расчет $\varphi_1+\varphi_2$, эВ	Факт. $\varphi_1+\varphi_2$, эВ	Расчет/Факт.	R / R_B
2 (He)	83,3	79	1,0544	0,571
3 (Li)	205,7	198	1,0389	0,364
4 (Be)	382,5	371,51	1,0296	0,267
5 (B)	613,7	599,43	1,0238	0,211
6 (C)	899,3	881,83	1,0198	0,174
7 (N)	1239,3	1218,76	1,0168	0,148
8 (O)	1633,7	1610,23	1,0146	0,129
9 (F)	2082,5	2057,6	1,0121	0,114
10 (Ne)	2585,7	2555,6	1,0118	0,102

Из таблицы 1 следует (графа расчет/факт), что при увеличении заряда ядра относительное отличие между результатами расчетов потенциалов ионизации и соответствующими экспериментальными данными уменьшается (с 5,44% до 1,18%). То есть, расчетные величины становятся ближе к фактическим.

Обращает на себя внимание то, что оболочки из двух электронов располагаются очень близко к ядру (уже у десятого элемента периодической таблицы Д.И.Менделеева - атома неона радиус оболочки составляет $0,054\text{ \AA}$).

Факты и промежуточные выводы:

- Кроме атома водорода, расчеты, основанные на модели резонансных электронных оболочек атомов, дают хорошее совпадение с экспериментальными данными для ближайших к ядру электронных оболочек ($n=1$) всех атомов.

- Электрон в атоме, находясь на замкнутой траектории, образно говоря, «падает в резонанс сам с собой». Если же два электрона находятся на одной общей траектории, то они образуют общий резонанс и оба «встраиваются» в него, располагаясь в разных пучностях резонанса.

Резонансные электронные оболочки водородоподобных атомов

В своих знаменитых «Лекциях» Р.Фейнман неоднократно говорил о том, что решение сложной задачи полезно начать с анализа простых частных случаев, тем более, что общее решение зачастую является комбинацией частных решений.

Однако главным достоинством такого подхода является возможность получать точные результаты и «не пропустить» важные закономерности, которые могут «потеряться» в погрешностях и сложностях общего решения.

Именно таким «частным случаем», удобным для получения наиболее точных результатов, являются водородоподобные атомы.

Начнем с **атома лития**. Ядро атома лития имеет заряд, равный трем зарядам электрона и, таким образом, вторая (внешняя) оболочка представлена всего одним электроном (рис. 2).

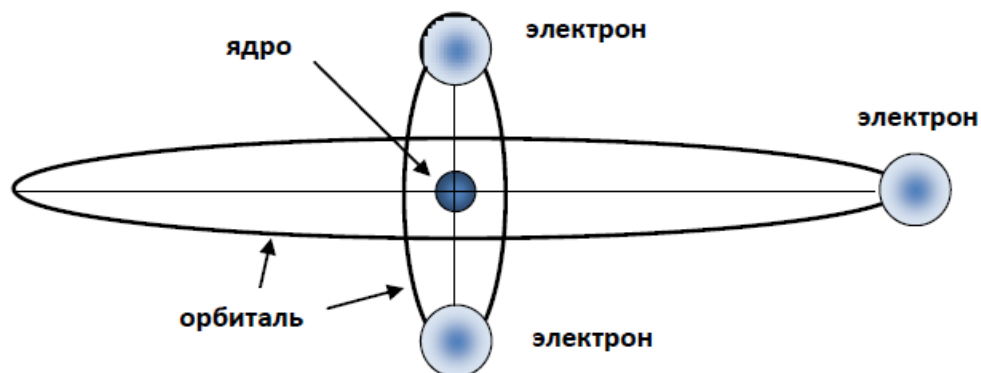


Рис. 2. Схематическое изображение атома лития.

Внешний электрон оказывается на сравнительно большом расстоянии от ядра и от двух электронов внутренней оболочки – остова атома. Размеры этого остова, как было установлено ранее, невелики и составляют около $0,364R_B$ (таблица 1). Поэтому валентный электрон находится в поле суммарного единичного положительного заряда остова атома (подобно атому водорода!).

Казалось бы, этот внешний электрон должен полностью повторять поведение электрона в атоме водорода и удовлетворять выражениям (3-6).

Но это не совсем так.

Если бы радиус внешней оболочки лития был как у атома водорода ($n=1$), то и его потенциал ионизации был бы равен потенциалу ионизации водорода (13,6 эВ). Но у лития потенциал ионизации составляет всего 5,39 эВ и указывает на то, что радиус внешней электронной оболочки атома лития существенно (в 2,523 раза) больше, чем у водорода. Это следует из выражения (5), которое связывает между собой энергию электрона в атоме водорода (численно равную потенциалу ионизации) с радиусом орбиты электрона:

$$W = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon R} + \frac{mv^2}{2} = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon R}, \quad e\varphi_i = \frac{e^2}{8\pi\epsilon R}, \quad R = \frac{e}{8\pi\epsilon\varphi_i}. \quad (13)$$

Значит, внешняя оболочка лития должна содержать больше, чем один пространственный период, и число n должно быть больше единицы.

Но, положив $n=2$, мы получим слишком большое расстояние R , равное четырем радиусам Бора. Потенциал ионизации при таком расстоянии должен быть равен 3,4 эВ, что не соответствует фактической величине 5,39 эВ.

Тем не менее, эта ситуация имеет логичное разрешение.

Определим длину волны электрона, исходя из величины его кинетической энергии, которая, как мы видели, численно также соответствует потенциалу ионизации. Следовательно

$$\frac{p^2}{2m} = e\varphi_i, \quad p = (2me\varphi_i)^{1/2}. \quad (14)$$

Отсюда получаем длину волны электрона и соответствующий радиус

$$\lambda = 2\pi R_\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{(2me\varphi_i)^{1/2}}, \quad \frac{R_\lambda}{R_B} = \frac{h}{2\pi R_B (2me\varphi_i)^{1/2}}. \quad (15)$$

Подставляя в (15) потенциал ионизации лития 5,39 эВ, получаем:

$$\lambda = 5,296 \cdot 10^{-10} \text{ м}, \quad R_\lambda = 0,843 \cdot 10^{-10} \text{ м} = 1,593 R_B.$$

Здесь нами введено новое обозначение R_λ для условного радиуса (обратная величина волнового коэффициента), являющегося показателем скорости пространственных волновых изменений. Фактически эта величина фигурирует уже в формуле (2).

Как мы и ожидали, **внешняя электронная оболочка лития характеризуется числом ($n=1,593$), которое в отличие от водорода ($n=1$), не является целым и находится в промежутке между 1 и 2!**

Однако в действительности внешняя электронная оболочка лития также является резонансной и характеризуется целым количеством длин волн. Достигается это **за счет возбуждения более высокочастотной гармонике**.

То есть, некоторое неизвестное нам целое число длин волн N_1 , характеризующее резонанс оболочки, должно быть результатом умножения числа 1,593 на другое число N_2 - номер гармонической составляющей. Поэтому здесь есть некоторый элемент неопределенности, и нам придется сделать несколько простых расчетов и подобрать подходящие цифры.

Например, поделив число $N_1=8$ на $n=1,593$, мы получаем $N_2=5,02$, то есть, пятая гармоника позволяет получить восемь длин волн для резонанса электронной оболочки лития. При этом формула (4) для реального радиуса оболочки оказывается справедливой и при значении n , отличном от целого числа

$$R = n^2 R_B = (1,593)^2 R_B = 2,54 R_B. \quad (16)$$

Эта величина действительно соответствует реальному значению радиуса внешней электронной оболочки лития, получаемому из выражения (13)

$$e\varphi_i = \frac{e^2}{8\pi\epsilon R}, \quad R = \frac{e}{8\pi\epsilon\varphi_i} = 2,52 R_B \quad (\varphi_i = 5,39 \text{ эВ}). \quad (17)$$

Так как атомов, подобных литию, с одним электроном на внешней электронной оболочке довольно много, то мы имеем возможность провести аналогичные расчеты и для них. Результаты всех расчетов сведены в таблице 2.

Мы уделяем этим расчетам так много внимания, чтобы убедиться в закономерном характере результатов. Приведенные в таблице 2 данные позволяют сделать вывод о справедливости сделанного предположения.

Природа, действительно, использует в электронных оболочках резонансы, возбуждаемые на кратных гармонических составляющих, в результате чего атомы оказываются более компактными и, в то же время, обладают способностью «разместить» в электронных оболочках большое количество электронов!

Таблица 2

Атом	φ_1 , эВ	n	n^2	R/R_B	$n \approx N_1/N_2$
3 (Li)	5,39	1,593	2,54	2,52	8/5,02
11 (Na)	5,138	1,632	2,66	2,65	5/3,06
19 (K)	4,339	1,775	3,15	3,13	7/3,94
55 (Cs)	3,893	1,875	3,51	3,49	15/8,00
37 (Rb)	4,176	1,81	3,27	3,26	9/4,97
47 (Ag)	7,574	1,342	1,8	1,79	4/2,98
78 (Pt)	8,96	1,236	1,53	1,52	5/4,04
81 (Tl)	6,106	1,498	2,24	2,23	3/2,00

Здесь следует сразу оговориться, что цифры в правом столбце таблицы 2 получены подбором и должны быть подтверждены в ходе дальнейших исследований (например, путем изучения пространственной симметрии

соединений, образуемых этими атомами). В частности, числа N_1 и N_2 , очевидно, могут иметь значения, кратные указанным в таблице числам.

Однако с принципиальной стороны не столь важно, будут ли эти числа кратными или соизмеримыми, так как в любом случае полученные результаты демонстрируют нам чрезвычайно важную закономерность строения атомов.

Аналогичные закономерности проявляются и в характеристиках возбужденных состояний атомов, а, следовательно, они могут быть использованы для **анализа и систематизации спектров поглощения (излучения) атомов**.

В качестве примера рассмотрим спектр атома лития. На рис. 3 изображена диаграмма Гротриана для атома лития [4], которая изображает совокупность возбужденных энергетических уровней и переходов между ними.

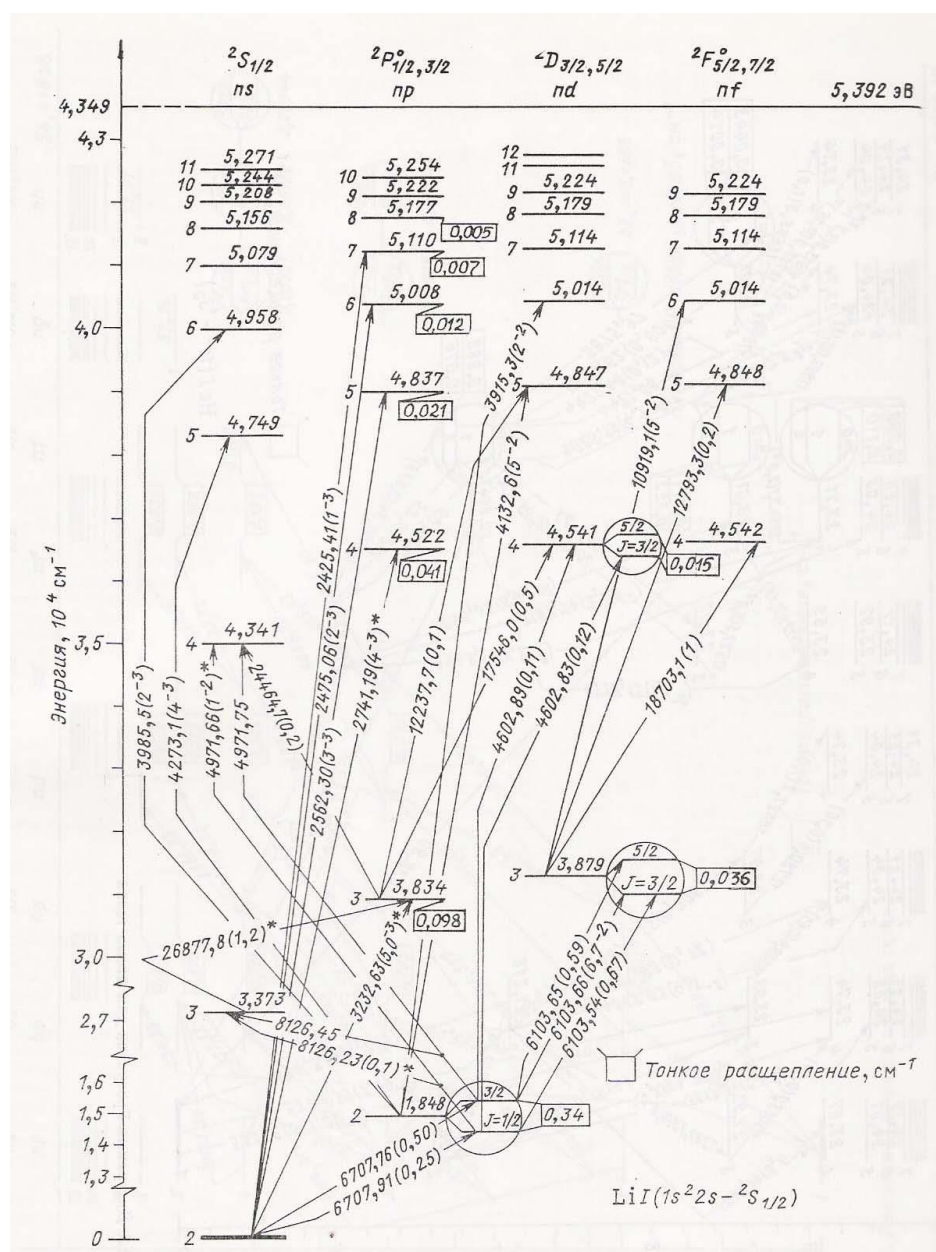


Рис. 3. Диаграмма Гротриана для атома лития [4].

Для удобства анализа этой диаграммы необходимо произвести некоторые дополнительные вычисления.

Во-первых, уровни энергии нам удобнее отсчитывать не от самого низкого уровня, соответствующего энергии ионизации (как это сделано на диаграмме), а от «абсолютного» нуля (то есть, от энергии на бесконечном расстоянии от атома).

Во-вторых, нам потребуется посчитать все те же характеристики электрона на возбужденных уровнях (оболочках), что и в таблице 2.

Итоговая таблица 3 включает в себя также главное квантовое число n (первый столбец), которым помечен каждый возбужденный уровень на диаграмме (рис. 3). Это сделано для сравнения с расчетным n (отношением N_1/N_2).

Таблица 3

n из диагр.	W , эВ из диагр.	W , эВ абсол.	n расч.	n^2 расч.	R/R_B	$n \approx N_1/N_2$
2	1,848	3,544	1,963578	3,85564	3,837472	2
3	3,373	2,019	2,601519	6,7679	6,736008	13/4,997
3	3,834	1,558	2,961498	8,770468	8,72914	3
3	3,879	1,513	3,005216	9,031321	8,988764	3
4	4,341	1,051	3,605735	13,00132	12,94006	18/4,998
4	4,522	0,87	3,963104	15,70619	15,63218	4
4	4,541	0,851	4,007101	16,05686	15,9812	4
4	4,542	0,85	4,009458	16,07575	16	4
5	4,749	0,643	4,60988	21,25099	21,15086	14/3,04
5	4,837	0,555	4,961907	24,62052	24,5045	5
5	4,847	0,545	5,007222	25,07227	24,95413	5
5	4,848	0,544	5,011822	25,11836	25	5
6	4,958	0,434	5,611129	31,48477	31,33641	17/3,03
6	5,008	0,384	5,965262	35,58435	35,41667	6
6	5,014	0,378	6,012419	36,14918	35,97884	6
7	5,079	0,313	6,607284	43,6562	43,45048	20/3,03
7	5,11	0,282	6,960983	48,45528	48,22695	7
7	5,114	0,278	7,010883	49,15248	48,92086	7
8	5,156	0,236	7,609202	57,89995	57,62712	23/3,026

Результаты, отраженные в таблице 3, весьма красноречивы. Расчетные величины главного квантового числа (n расч.) в большинстве случаев с хорошей точностью совпадают с целочисленными величинами (первый столбец), которыми отмечены соответствующие возбужденные уровни на диаграмме Гротриана.

Однако в шести случаях (почти по каждому третьему возбужденному уровню) составители диаграммы, видимо, долго не могли определиться с главным квантовым числом, так как оно должно быть дробным (N_1/N_2), а не целым, как это указано на диаграмме. При этом числа N_1 , и N_2 определяются с хорошей точностью простыми расчетами.

Обращает на себя внимание «впечатляющая» удаленность (R/R_B) внешнего электрона от ядра атома на высоких возбужденных уровнях (при больших n).

В более сложных спектрах атомов наблюдаются тысячи возбужденных уровней, и разобраться в них намного сложнее. Кроме дробности главного квантового числа существуют и другие «усложняющие» факторы. В частности, на энергию возбужденных уровней влияет возмущающее воздействие в виде различных взаимных спиновых состояний остова и внешнего электрона.

Естественно, предстоит очень большая работа по подробному описанию свойств и определению параметров всех электронных оболочек атомов. Эти чрезвычайно интересные и важные вопросы, несомненно, привлекут к себе внимание исследователей.

Факты и промежуточные выводы:

- Внешние оболочки водородоподобных атомов в невозбужденном состоянии имеют *дробные значения главного квантового числа*. Это означает, что оболочки «резонируют» на кратных гармонических составляющих.

- Возбужденные уровни энергии лития приблизительно в 2/3 случаев соответствуют целочисленным (обычным) значениям n , а в 1/3 случаев - дробным значениям главного квантового числа. Эти последние уровни на диаграмме Гротриана «вынужденно» помечены ближайшими целочисленными значениями.

2. Модель сферических электронных оболочек атомов

Попробуем взглянуть на свойства электронных оболочек атомов с еще одной не менее интересной стороны.

Из проведенного анализа можно сделать заключение, что устройство атомов основано на ***последовательном расположении электронов вокруг ядра***. Каждый из этих слоев, который мы именуем *резонансной электронной оболочкой*, является *совокупностью электронов, объединенных единым резонансом*.

Таким образом, **многоэлектронную оболочку можно представить себе в виде сферы** с симметрично расположенными на ней электронами (например, в вершинах многогранника, мысленно вписанного в сферическую поверхность).

Такая конфигурация электронной оболочки дает возможность при анализе ее свойств использовать наиболее простую модель - в виде заряженной сферы.

При этом структура атома напоминает «матрешку», в центре которой расположено ядро, а концентрические электронные оболочки располагаются вокруг него - одна внутри другой.

Каким образом отражается на свойствах атомов такая особенность строения? Рассмотрим в качестве примера атомы инертных газов, внешние электронные оболочки которых достаточно плотно «заселены» и должны действительно походить на заряженные сферы.

Как известно, электростатическая энергия заряженной сферы равна [5]

$$W_e = \frac{Q^2}{8\pi\epsilon R}. \quad (18)$$

Применительно к электронной оболочке заряд Q определяется количеством электронов в оболочке. Вспомним также, что потенциал ионизации соответствует половине абсолютной величины энергии связи электрона в составе оболочки.

Исходя из этого и с учетом (18), сумма потенциалов ионизации всех электронов внешней оболочки, например, атома неона выражается формулой:

$$e \sum_1^8 \varphi_i = \frac{(8e)^2}{16\pi\epsilon R}. \quad (19)$$

Действительно, удаление каждого электрона оболочки (акт ионизации) сопровождается «проникновением» соответствующей части некомпенсированного поля остова атома за пределы внешней оболочки, что *воспринимается как увеличение ее заряда*. Поэтому удаление каждого последующего электрона оболочки требует все больших затрат энергии, а суммарный результат будет как раз соответствовать формуле (19).

Используя формулу (19), можно определить и каждый потенциал ионизации в отдельности (как изменение энергии при удалении одного электрона), а общую энергию представить в виде суммы таких изменений энергии

$$\begin{aligned} e \sum_1^8 \varphi_i &= \frac{(8e)^2}{16\pi\epsilon R} = \frac{1}{16\pi\epsilon R} [(8e)^2 - (7e)^2] + [(7e)^2 - (6e)^2] + \dots + [(2e)^2 - e^2] + e^2 = \\ &= \frac{1}{16\pi\epsilon R} (15e^2 + 13e^2 + 11e^2 + 9e^2 + 7e^2 + 5e^2 + 3e^2 + e^2). \end{aligned} \quad (20)$$

Как мы и ожидали, потенциалы ионизации изменяются пропорционально кратности ионизации (слагаемые в скобках (20) записаны в обратном порядке по кратности ионизации). Электронные оболочки, конечно, не являются равномерно заряженными сферами (особенно при малом числе электронов), тем не менее, результаты экспериментов в целом подтверждают применимость модели (рис. 4). Отклонения от линейной зависимости, очевидно, связаны также с уже упоминавшимися ранее процессами перестройки электронных оболочек после каждого акта ионизации. В результате, общая энергия электронной оболочки дополнительно перераспределяется между потенциалами ионизации.

Однако суммарная величина (20) «поглощает» все перераспределения и, также как в уже рассмотренном случае первой оболочки из двух электронов, дает возможность наиболее наглядно и просто сравнить расчеты с данными опытов.

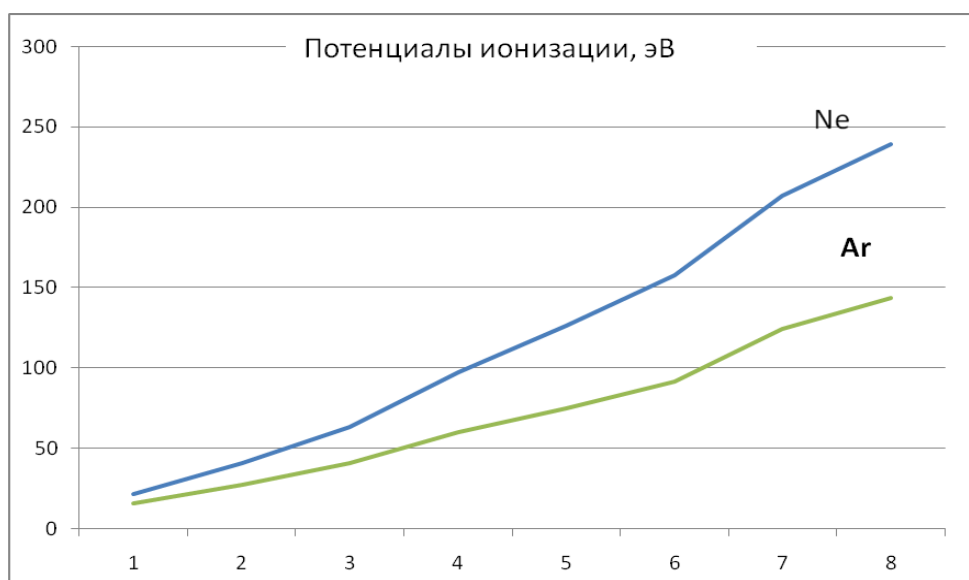


Рис. 4. Потенциалы ионизации неона и аргона в зависимости от кратности ионизации

Проверим, насколько точно выполняется соотношение (19). Но для этого необходимо как можно точнее определить радиус внешней электронной оболочки.

Для этой цели, как мы уже убедились, лучше всего подходит вариант электронной оболочки с одним электроном. Поэтому радиус внешней оболочки атома неона определим, исходя из величины восьмого потенциала ионизации

$$R = \frac{8e}{8\pi\epsilon\varphi_8} = 0,455 R_B, \quad (\varphi_8 = 239,1\text{эВ}). \quad (21)$$

Есть и другие методы расчета радиуса, которые дают близкие результаты.

Подставив конкретные величины в (19), получим

$$\frac{64e}{16\pi\epsilon \cdot 0,455R_B} = \frac{32 \cdot 13,6}{0,455} = 956,48\text{эВ}, \quad \sum_1^8 \varphi_i = 21,56 + 41,07 + 63,5 + 97,16 + 126,4 + 157,9 + 207,2 + 239,1 = 953,89\text{эВ}. \quad (22)$$

Таким образом, правая и левая части (19), действительно, близки друг к другу. Сделаем аналогичные расчеты для других благородных газов и для наглядности сведем результаты в таблицу.

Таблица 4

Атом	φ_8 , эВ	R/R_B	Расч. $\sum\varphi_i$, эВ	Факт. $\sum\varphi_i$, эВ	Расч./Факт.
10 (Ne)	239,1	0,455	956,48	953,89	1,003
18 (Ar)	143,4	0,759	573,39	577,64	0,993
36 (Kr)	126	0,863	504,29	508,16	0,992
54 (Xe)	126	0,863	504,29	484,43	1,041

У галогенов на внешней оболочке всего на один электрон меньше, чем у благородных газов, поэтому мы можем ожидать хорошего совпадения расчетов с

данными экспериментов и в этом случае. Правда, расчетные формулы необходимо соответственно «подправить»:

$$e \sum_1^7 \varphi_i = \frac{(7e)^2}{16\pi\epsilon R}. \quad (23)$$

$$R = \frac{7e}{8\pi\epsilon\varphi_7}. \quad (24)$$

Расчеты и фактические величины приведены в таблице 5.

Таблица 5

Атом	φ_7 , эВ	R/R _Б	Расч. $\Sigma\varphi_i$, эВ	Факт. $\Sigma\varphi_i$, эВ	Расч./Факт.
9 (F)	185,14	0,514	648,25	658,75	0,984
17 (Cl)	114,2	0,834	399,52	408,61	0,978
35 (Br)	103	0,924	360,6	367,94	0,98
53 (J)	104	0,915	364,15	362,44	1,005

Как видим, расчетные и фактические данные для внешних достаточно плотно заселенных оболочек галогенов (как и благородных газов) хорошо согласуются друг с другом.

Проявляются ли эти закономерности так же отчетливо для последующих оболочек? Чтобы ответить на этот вопрос, сделаем аналогичные расчеты для заполненных оболочек, находящихся непосредственно под внешними оболочками одновалентных и двухвалентных атомов.

Здесь также потребуются вполне очевидные изменения в расчетных формулах. Сначала запишем эти формулы для атомов с одним электроном на внешней оболочке:

$$e \sum_2^9 \varphi_i = \frac{(9e)^2 - e^2}{16\pi\epsilon R}, \quad (25)$$

$$R = \frac{9e}{8\pi\epsilon\varphi_9}. \quad (26)$$

Аналогичным образом модифицируем формулы для атомов с двумя электронами на внешней оболочке:

$$e \sum_3^{10} \varphi_i = \frac{(10e)^2 - (2e)^2}{16\pi\epsilon R}, \quad (27)$$

$$R = \frac{10e}{8\pi\epsilon\varphi_{10}}. \quad (28)$$

Результаты расчетов представлены соответственно в таблицах 6 и 7.

Таким образом, проведенное исследование убедительно показывает, что электроны в атомах действительно располагаются послойно в сферических электронных оболочках.

Хорошее совпадение расчетных результатов и экспериментальных данных, кроме того, свидетельствует о том, что в процессе анализа были с высокой точностью «попутно» определены радиусы внешних электронных оболочек

инертных атомов и галогенов, а также полных оболочек, находящихся под внешними оболочками атомов с одним и двумя внешними электронами.

Таблица 6

Атом	φ_9 , эВ	R/R _Б	Расч. $\Sigma\varphi_i$, эВ	Факт. $\Sigma\varphi_i$, эВ	Расч./Факт.
11 (Na)	299,7	0,408	1333,33	1299,31	1,026
19 (K)	176	0,695	782,73	769,01	1,018
37 (Rb)	150	0,816	666,67	660,76	1,009
55 (Cs)	150	0,816	666,67	621,7	1,072

Таблица 7

Атом	φ_{10} , эВ	R/R _Б	Расч. $\Sigma\varphi_i$, эВ	Факт. $\Sigma\varphi_i$, эВ	Расч./Факт.
12 (Mg)	367,2	0,370	1764,32	1702	1,037
20 (Ca)	211,3	0,644	1013,66	982	1,032
38 (Sr)	177	0,768	850	830,4	1,024

Завершая анализ строения электронных оболочек атомов, необходимо кратко упомянуть о так называемой **«экранизации» заряда ядра (или остова атома) электронами оболочек.**

Каков механизм «экранизации»? Модель сферических электронных оболочек дает возможность уточнить этот вопрос.

В соответствии с теоремой Гаусса [5], на каждую последующую заряженную сферу (согласно модели сферических электронных оболочек, рис. 5) воздействует только электрическое поле суммарного заряда, находящегося внутри этой сферы. Соответственно, заряд оболочек большего радиуса не может воздействовать на оболочки меньшего радиуса.



Рис. 5. Модель сферических электронных оболочек атома.

Однако в этой простой схеме есть одна не столь очевидная особенность. Дело в том, что каждая заряженная сфера, кроме того, «действует сама на себя». Заряды, находящиеся на ее поверхности, испытывают на себе воздействие электрического поля, напряженность которого равна половине величины

напряженности, создаваемой самой заряженной сферой непосредственно у внешней поверхности:

$$E = \frac{Q}{8\pi\epsilon R^2}. \quad (29)$$

Эту величину поля можно получить интегрированием по всем элементарным зарядам, расположенным на поверхности сферы.

Соответственно единичный заряд, находящийся на поверхности сферы, испытывает на себе воздействие силы, численно равной напряженности поля (29), создаваемой всеми остальными зарядами сферы. Поэтому суммарная сила на заряд сферы будет в Q раз больше

$$F = \frac{Q^2}{8\pi\epsilon R^2}. \quad (30)$$

Величину силы (30), действующей на заряд сферы, можно получить и более простым способом - непосредственно из выражения для энергии заряженной сферы (18) путем дифференцирования по R .

Так как сила «самодействия» всегда направлена от центра, то она уменьшает результирующую силу притяжения электронов оболочки к ядру (остову атома). В частности, если внешняя электронная оболочка атома достаточно плотно «заселена», то результирующая сила притяжения, действующая на каждый электрон оболочки, уменьшается в два раза!

Заметим, что расчетные величины в таблицах 4, 5, 6 и 7, полученные на основе модели заряженных сфер, «автоматически» учитывают рассмотренный эффект взаимного влияния электронов в составе оболочки.

Поэтому соответствие результатов расчетов экспериментальным данным свидетельствует об одновременном и постоянном нахождении электронов в составе сферических оболочек.

Следовательно, электроны не являются независимыми друг от друга и не «размазываются» по квантово-механическим вероятностным «облакам»!

В связи с тем, что эти электронные оболочки являются резонансными образованиями и имеют сферическую форму, мы должны здесь упомянуть о существовании соответствующего математического решения [6]. Оно называется сферическими гармониками на поверхности сферы

$$(A \cos m\varphi + B \sin m\varphi) \cdot P_n^m(\cos \theta). \quad (31)$$

Не углубляясь в математику, отметим, что решение (31) имеет три частных случая: зональная гармоника ($m=0$), тессеральная гармоника ($0 < m < n$) и секторальная гармоника ($m=n$). Доказано также, что произвольная функция на поверхности сферы может быть разложена в ряд по сферическим гармоникам.

Для нас эти математические решения важны с точки зрения возможных видов резонансов и вырождения энергетических уровней.

Факты и промежуточные выводы:

- Модель сферических электронных оболочек полностью подтверждается экспериментальными данными (суммы потенциалов ионизации оболочек соответствуют величине энергии заряженной сферы, моделирующей оболочку).

- Выявленная особенность строения электронных оболочек требует одновременного выполнения двух принципиальных условий:

- а) электроны в составе атома *не являются независимыми друг от друга*;
- б) все электроны *постоянно и одновременно* находятся в сферической оболочке (в противном случае модель сферических электронных оболочек не подтверждалась бы экспериментальными данными).

Заключение

Главным результатом исследования, безусловно, следует признать установление резонансной природы электронных оболочек атомов, которая закономерно вырастает из корпускулярно-волновых свойств электронов.

Это ключ к пониманию всех остальных вопросов!

Именно резонансы в электронных оболочках являются физической причиной «конденсации» электронов, то есть, встраивания их в общий резонанс с «фиксацией» в пучностях резонанса. В этом состоит сущность возникновения коллективных свойств электронов в составе оболочки.

С другой стороны, расположение электронов в пучностях резонанса оболочки сопровождается интенсивным обменом энергией (массой). В результате возникает центробежная сила, компенсирующая силу притяжения, и электроны неподвижно «зависают» над ядром атома. Таким образом, происходит имитация движения электронов без их реального движения.

И наконец, конденсация электронов в резонансные оболочки является причиной сферической формы оболочек, так как «зависающие» электроны выстраиваются по эквипотенциальным поверхностям, приобретая, таким образом, «нужную» частоту для встраивания в общий резонанс.

Эти выводы о физической природе электронных оболочек базируются на анализе экспериментальных характеристик атомов. Поэтому основные результаты исследования, в виду их принципиальной важности, мы можем сформулировать как

законы формирования электронных оболочек атомов:

Закон 1. Электронные оболочки атомов являются резонансными образованиями, которые могут возбуждаться как на основной частоте, так и на гармонических составляющих. При этом главное квантовое число соответственно может принимать как целочисленные, так и дробные значения.

Закон 2. Многоэлектронные оболочки атомов имеют сферическую форму, вследствие чего сумма всех потенциалов ионизации оболочки соответствует (с учетом теоремы о вириале) энергии заряженной сферы такого же радиуса с зарядом, определяемым количеством электронов в оболочке.

Закон 3. В электронной оболочке атома электроны встраиваются в общий резонанс, теряя свои индивидуальные свойства, в результате чего электронная оболочка приобретает свойства бозе-конденсата.

Примечания:

1. Чтобы не перегружать статью, в нее не включено описание особенностей электронных оболочек атомов, проявляющихся в зависимости от величины радиуса оболочки (больше или меньше радиуса Бора). Желающие могут самостоятельно рассмотреть этот вопрос по аналогии с приведенными в статье расчетами.

Отдельного рассмотрения требует и вопрос о том, каким образом происходит распределение общего количества электронов в атоме по конкретным оболочкам. Заметим лишь, что это распределение должно соответствовать принципу достижения минимума энергии атома в целом.

2. Некоторые читатели статьи [1] предлагают для удобства цитирования и ссылок на исследование и в соответствии со сложившейся традицией назвать открытые законы формирования электронных оболочек атомов именем автора.

Отвечая на это предложение, признаюсь, что не испытываю особой радости в связи с обнаружением несостоятельности современной теории атома, так как и я, и масса других людей потратили много времени и сил на изучение этой теории и на все связанные с ней заблуждения.

Что касается присвоения имени автора открытым закономерностям, то это действительно является традицией, но мне хотелось бы, чтобы это произошло «само собой» в результате обсуждения научной общественностью.

Литература

1. Верин О.Г. Физические основы строения атома.
<http://www.sciteclibrary.ru/rus/catalog/pages/14155.html>
2. Шпольский Э.В. Атомная физика. т. 2: Основы квантовой механики и строение электронной оболочки атома. 5-е изд. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1984. — С. 439.
3. Справочник химика. Под ред. Б.П.Никольского. Т.1 М-Л.: «Химия», 1982.
4. Физические величины. Справочник. - М.: Энергоатомиздат, 1991. С. 1232.
5. Яворский Б. М., Детлаф А. А. Справочник по физике. Главная редакция физ.-мат. литературы. - М.: Наука, 1985. - С.468.
6. Андре Анго. Математика для электро- и радиоинженеров. М., 1967. С.457.