

МНОГОЭЛЕКТРОННЫЕ АТОМЫ

**Принцип тождественности
(принцип неразличимости тождественных
частиц)**

Принципы неразличимости тождественных частиц. Фермионы и бозоны

Пусть квантовомеханическая система состоит из одинаковых частиц, например электронов. Все электроны имеют одинаковые физические свойства – массу, электрический заряд, спин и другие внутренние характеристики (например, квантовые числа). Такие частицы называют *тождественными*.

Необходимые свойства системы одинаковых тождественных частиц проявляются в *фундаментальном принципе квантовой механики – принципе неразличимости тождественных частиц: невозможно экспериментально различить тождественные частицы.*

Из соотношения неопределенности вытекает, что *для микрочастиц вообще не применимо понятие траектории; состояние микрочастицы описывается волновой функцией, позволяющей лишь вычислять вероятность $|\Psi|^2$ нахождения микрочастицы в окрестностях той или иной точки пространства.*

Если же волновые функции двух тождественных частиц в пространстве перекрываются, то разговор о том какая частица находится в данной области, вообще лишен смысла: можно говорить лишь о вероятности нахождения в данной области одной из тождественных частиц.

Принимая во внимание физический смысл величины $|\Psi|^2$, *принцип неразличимости тождественных частиц можно записать в виде:*

$$|\Psi(x_1, x_2)|^2 = |\Psi(x_2, x_1)|^2 \quad (1)$$

где x_1 и x_2 — соответственно совокупность координат первой и второй частиц.

Из этого выражения вытекает, что возможны два случая:

$$\Psi(x_1, x_2) = \pm \Psi(x_2, x_1),$$

В зависимости от величины спина в квантовой механике различают два вида частиц:

1). Фермионы

2). Бозоны

Обобщая опытные данные, В. Паули сформулировал *принцип*, согласно которому *системы фермионов встречаются в природе только в состояниях, описываемых антисимметричными волновыми функциями*

В системе одинаковых фермионов любые два из них не могут одновременно находиться в одном и том же состоянии.

Частицы с полуцелым спином (например, электроны, нейтроны и протоны) описываются антисимметричными волновыми функциями и подчиняются статистике *Ферми-Дирака*; эти частицы называются *фермионами*.

Частицы с нулевым или целочисленным спином (например, фотоны, π -мезоны) описываются симметричными волновыми функциями и подчиняются статистике *Бозе - Эйнштейна*; эти частицы называются *бозонами*.

**Принцип Паули. Распределение
электронов в атоме по состояниям**

Состояние электрона в атоме однозначно определяется *набором четырех квантовых чисел*:

- *Главного n* ($n = K, L, N, M, \dots$).
- *Орбитального l* ($l = s, p, d, f, \dots$),
обычно эти состояния обозначают: $1s, 2d, 3f$.
- *Магнитного m* ($m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \pm l$).
- *Магнитного спинового m_s* ($m_s = \pm 1/2$).

Распределение электронов в атоме происходит по принципу Паули:

в одном и том же атоме, не может быть более одного электрона с одинаковым набором четырех квантовых чисел n , l , m , m_s .

$$Z(n, l, m, m_s) = 0 \text{ или } 1,$$

где $Z(n, l, m, m_s)$ число электронов, находящихся в квантовом состоянии, описываемым набором четырех квантовых чисел: n, l, m, m_s .

Таким образом, принцип Паули утверждает, *что два электрона, связанные в одном и том же атоме различаются значениями по крайней мере одного квантового числа.*

Максимальное число $Z_2 (n, l, m_s)$ электронов, находящихся в состояниях, описываемых набором трех квантовых чисел n , l и m и отличающихся только ориентацией спинов электронов равно:

$$Z_2 (n, l, m_s) = 2, \quad (2)$$

ибо спиновое квантовое число может принимать лишь два значения $1/2$ и $-1/2$.

Максимальное число $Z_3 (n, l)$ электронов находящихся в состояниях, определяемых двумя квантовыми числами n и l :

$$Z_3 (n, l) = 2(2l + 1). \quad (3)$$

Максимальное число электронов,
находящихся в состояниях, определяемых
значением главного квантового числа n , равно:

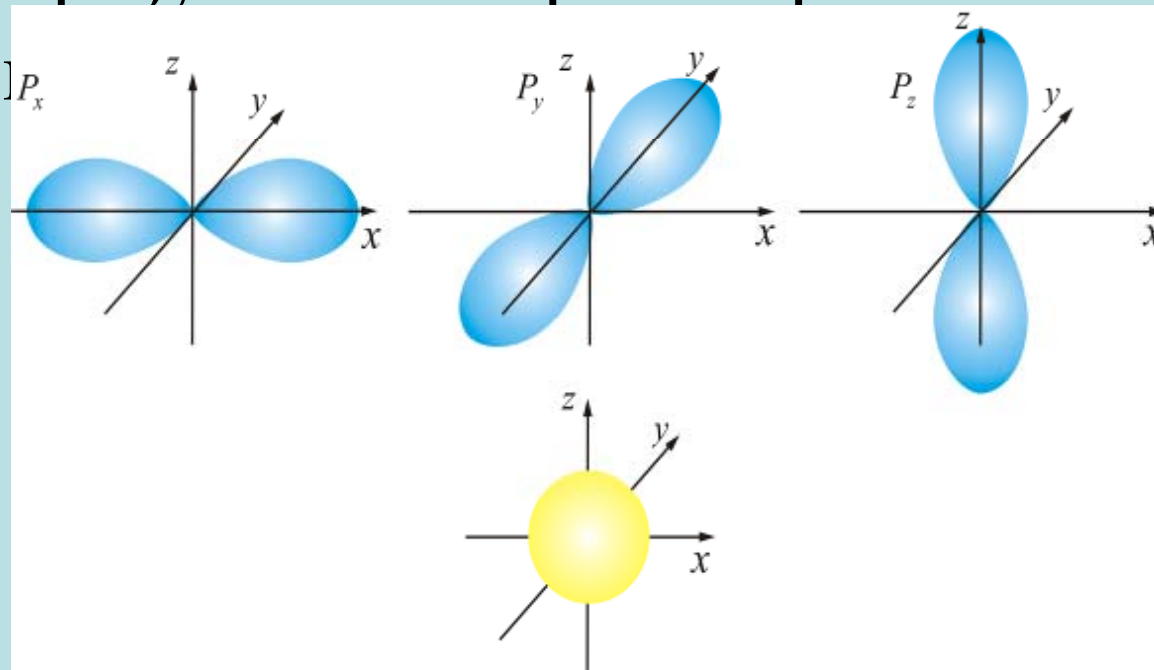
$$Z(n) = \sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1) = 2n^2 \quad (4)$$

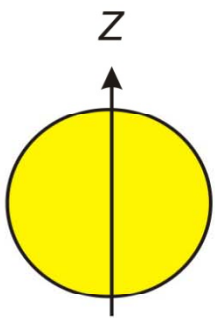
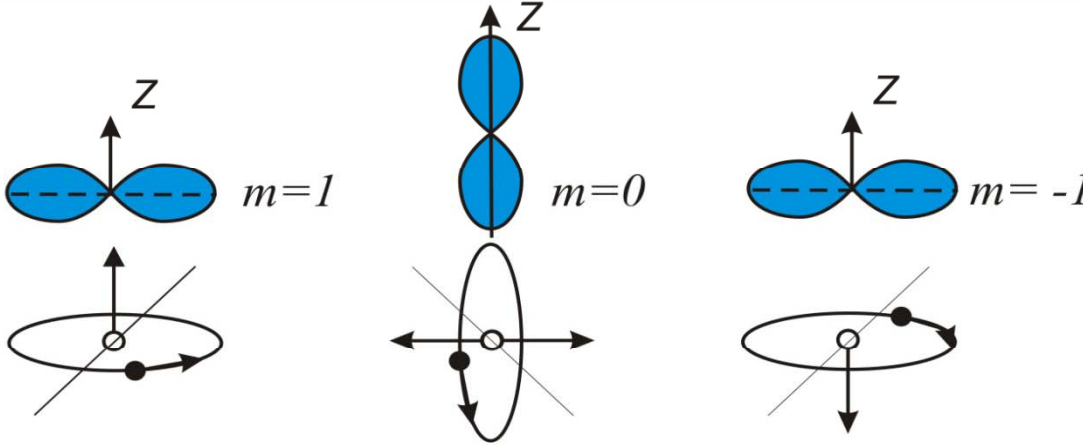
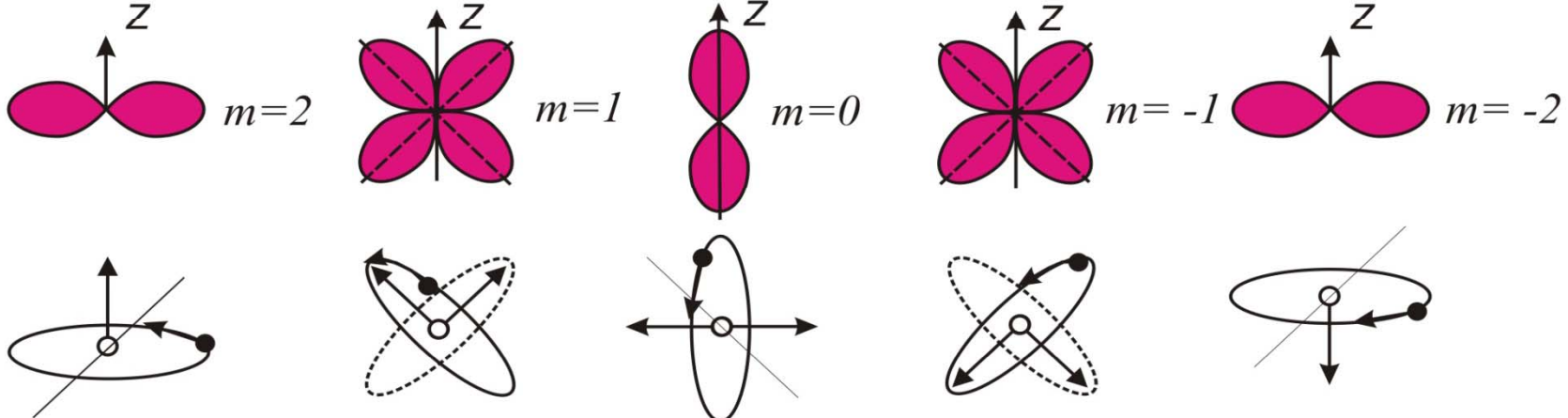
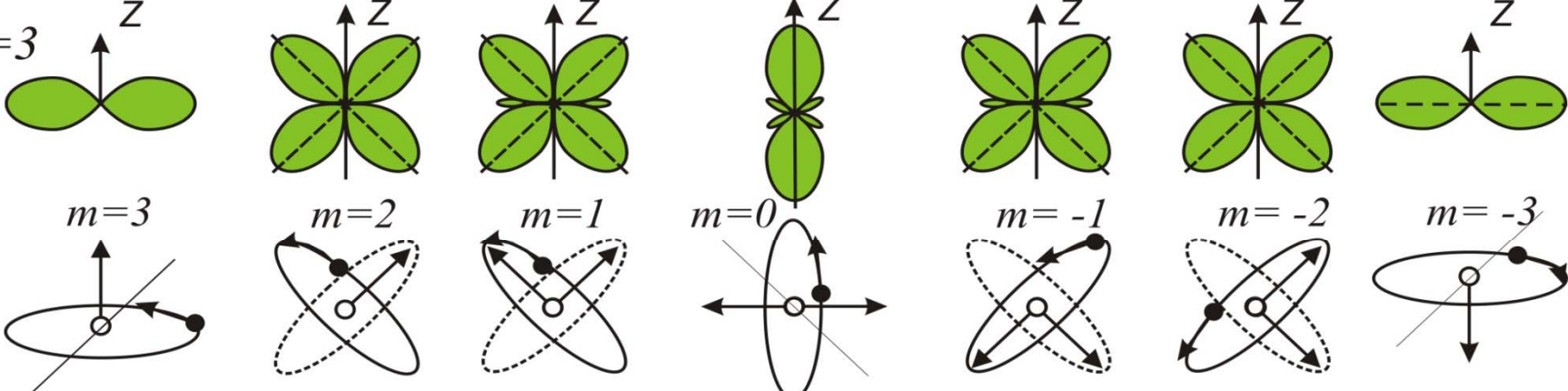
Совокупность электронов в многоэлектронном атоме, имеющих одно и то же главное квантовое число n , называется электронной оболочкой или слоем.

В каждой из оболочек электроны распределяются по подоболочкам, соответствующим данному l .

Область пространства, в которой высока вероятность обнаружить электрон (не менее 0,95), называют **подоболочкой** или **орбиталью**.

Основные типы орбиталей обозначают буквами s , p , d , f (от слов *sharp*, *principal*, *diffuse*, *fundamental*). Вид двух основных типов орбиталей s (она одна), p (их три), по которым “размазан” электронный заряд,



s-электроны	$l=0$  $M=0$	p-электроны	$l=1$ 
d-электроны	$l=2$ 		
f-электроны	$l=3$ 		

Обозначения оболочек, а также распределение электронов по оболочкам и подоболочкам приведено в таблице 1.

$$Z_2(n, l, m_s) = 2$$

$$Z_3(n, l) = 2(2l + 1)$$

$$Z(n) = \sum_{l=0}^{n-1} 2(2l + 1) = 2n^2$$

Таблица 1

Главное квантовое число n	1	2	3			4				5					
Символ оболочки	K	L	M			N				O					
Максимальное число электронов в оболочке	2	8	18			32				50					
Орбитальное квантовое число l	0	0	1	0	1	2	0	1	2	3	0	1	2	3	4
Символ подоболочки	1 s	2 s	2 p	3 s	3 p	3 d	4 s	4 p	4 d	4 f	5 s	5 p	5 d	5 f	5 g
Максимальное число электронов в подоболочке	2	2	6	2	6	1 0	2	6	1 0	1 4	2	6	1 0	1 4	1 8

**Периодическая система элементов
Д.И. Менделеева**

Периодическая система элементов Д. И. Менделеева

В начале XIX в., с развитием идей химической атомистики и методов химического анализа, появились первые попытки систематизации элементов по их атомному весу, признанному основной количественной характеристикой элемента.

1817 г. И.В. Дёберейнер

1843 г. Л. Гмелин

1863 г. А. де Шанкуртуа

1864 г. Д. Ньюлендс

1857 – 1868 гг. У. Одлинг

1864 г. Л. Мейер

1869 г. Д.И. Менделеев

ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ЭЛЕМЕНТОВ Д.И. МЕНДЕЛЕЕВА

ПЕРИОДЫ	Г Р У П П Ы								Э Л Е М Е Н Т О В							
	I	II		III	IV	V	VI	VII	VIII							
1	H 1 1,008							(H)						2 4,003 He		
2	Li 3 6,94	Be 4 9,01	B 5 10,81	C 6 12,01	N 7 14,01	O 8 16,0	F 9 19,0							10 20,18 Ne		
3	Na 11 22,99	Mg 12 24,3	Al 13 26,98	Si 14 28,09	P 15 30,97	S 16 32,06	Cl 17 35,45							18 39,95 Ar		
4	K 19 39,10	Ca 20 40,1	Sc 21 44,96	Ti 22 47,9	V 23 50,9	Cr 24 52,0	Mn 25 54,94	Fe 26 55,85	Co 27 58,93	Ni 28 58,71						
	Cu 29 63,55	Zn 30 65,4	Ga 31 69,7	Ge 32 72,59	As 33 74,92	Se 34 78,96	Br 35 79,9							36 83,80 Kr		
5	Rb 37 85,47	Sr 38 87,6	Y 39 88,9	Zr 40 91,2	Nb 41 92,9	Mo 42 95,94	Tc 43 (99)	Ru 44 101,1	Rh 45 102,9	Pd 46 106,4						
	Ag 47 107,9	Cd 48 112,4	In 49 114,8	Sn 50 118,7	Sb 51 121,75	Te 52 127,6	I 53 126,9							54 131,3 Xe		
6	Cs 55 132,9	Ba 56 137,3	* La 57 138,9	Hf 72 178,5	Ta 73 180,9	W 74 183,8	Re 75 186,2	Os 76 190,2	Ir 77 192,2	Pt 78 195,1						
	Au 79 196,9	Hg 80 200,6	Tl 81 204,4	Pb 82 207,2	Bi 83 208,9	Po 84 (210)	At 85 (210)							86 (222) Rn		
7	Fr 87 (223)	Ra 88 (226)	** Ac 89 (227)	Rf 104 (261)	Db 105 (262)	Sg 106 (263)	Bh 107 (264)	Hs 108 (265)	Mt 109 (266)							

* ЛАНТАНОИДЫ

** АКТИНОИДЫ

58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

Физический смысл порядкового номера Z элемента периодической системы Менделеева был выяснен в ядерной модели атома Резерфорда. *Порядковый номер совпадает с числом протонов – положительных элементарных зарядов в ядре.*

Химические свойства элементов, их оптические и многие другие физические свойства объясняются поведением внешних электронов, называемых валентными или оптическими электронами.

Теория периодической системы основывается на *следующих положениях:*

- *общее число электронов в атоме данного химического элемента равно порядковому номеру Z элемента;*
- *состояние электрона в атоме определяется набором его четырех квантовых чисел: n, l, m, m_s ;*
- *распределение электронов в атоме по энергетическим состояниям удовлетворяет принципу минимума потенциальной энергии:*
с возрастанием числа электронов каждый следующий электрон должен занять возможные энергетические состояния с наименьшей энергией;
- *заполнение электронами энергетических уровней в атоме должно проходить в соответствии с принципом Паули.*

Система электронов, построенная на таких основах, должна иметь структуру и число элементов в одном периоде (длину периода), соответствующие таблице:

n	Электронный слой (оболочка)	количество электронов в состоянии					Максимальное число электронов
		$s(l=0)$	$p(l=1)$	$d(l=2)$	$f(l=3)$	$g(l=4)$	
1	K	2	—	—	—	—	2
2	L	2	6	—	—	—	8
3	M	2	6	10	—	—	18
4	N	2	6	10	14	—	32
5	O	2	6	10	14	18	50

III	11	НАТРИЙ	<i>Na</i>	2	2	6	1						
	12	МАГНИЙ	<i>Mg</i>	2	2	6	2						
	13	АЛЮМИНИЙ	<i>Al</i>	2	2	6	2	1					
	14	КРЕМНИЙ	<i>Si</i>	2	2	6	2	2					
	15	ФОСФОР	<i>P</i>	2	2	6	2	3					
	16	СЕРА	<i>S</i>	2	2	6	2	4					
	17	ХЛОР	<i>Cl</i>	2	2	6	2	5					
	18	АРГОН	<i>Ar</i>	2	2	6	2	6					
				КОНФИГУРАЦИЯ НЕОНА									
	19	КАЛИЙ	<i>K</i>	2	2	6	2	6		1			
	20	КАЛЬЦИЙ	<i>Ca</i>	2	2	6	2	6		2			
	21	СКАНДИЙ	<i>Sc</i>	2	2	6	2	6	1	2			
	22	ТИТАН	<i>Ti</i>	2	2	6	2	6	2	2			
	23	ВАНАДИЙ	<i>V</i>	2	2	6	2	6	3	2			
IV	24	ХРОМ	<i>Cr</i>	2	2	6	2	6	5	1			
	25	МАРГАНЕЦ	<i>Mn</i>	2	2	6	2	6	5	2			
	26	ЖЕЛЕЗО	<i>Fe</i>	2	2	6	2	6	6	2			
	27	КОБАЛЬТ	<i>Co</i>	2	2	6	2	6	7	2			
	28	НИКЕЛЬ	<i>Ni</i>	2	2	6	2	6	8	2			
	29	МЕДЬ	<i>Cu</i>	2	2	6	2	6	10	1			
	30	ЦИНК	<i>Zn</i>	2	2	6	2	6	10	2			
	31	ГАЛЛИЙ	<i>Ga</i>	2	2	6	2	6	10	2	1		
	32	ГЕРМАНИЙ	<i>Ge</i>	2	2	6	2	6	10	2	2		

ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ЭЛЕМЕНТОВ Д.И. МЕНДЕЛЕЕВА

ПЕРИОДЫ	Г Р У П П Ы								Э Л Е М Е Н Т О В								
	I	II		III	IV		V	VI	VII		VIII						
1	H 1 1,008									(H)						2 4,003	He
2	Li 3 6,94	Be 4 9,01	B 5 10,81	C 6 12,01	N 7 14,01	O 8 16,0	F 9 19,0									10 20,18	Ne
3	Na 11 22,99	Mg 12 24,3	Al 13 26,98	Si 14 28,09	P 15 30,97	S 16 32,06	Cl 17 35,45									18 39,95	Ar
4	K 19 39,10	Ca 20 40,1	Sc 21 44,96	Ti 22 47,9	V 23 50,9	Cr 24 52,0	Mn 25 54,94	Fe 26 55,85	Co 27 58,93	Ni 28 58,71							
	Cu 29 63,55	Zn 30 65,4	Ga 31 69,7	Ge 32 72,59	As 33 74,92	Se 34 78,96	Br 35 79,9									36 83,80	Kr
5	Rb 37 85,47	Sr 38 87,6	Y 39 88,9	Zr 40 91,2	Nb 41 92,9	Mo 42 95,94	Tc 43 (99)	Ru 44 101,1	Rh 45 102,9	Pd 46 106,4							
	Ag 47 107,9	Cd 48 112,4	In 49 114,8	Sn 50 118,7	Sb 51 121,75	Te 52 127,6	I 53 126,9									54 131,3	Xe
6	Cs 55 132,9	Ba 56 137,3	* La 57 138,9	Hf 72 178,5	Ta 73 180,9	W 74 183,8	Re 75 186,2	Os 76 190,2	Ir 77 192,2	Pt 78 195,1							
	Au 79 196,9	Hg 80 200,6	Tl 81 204,4	Pb 82 207,2	Bi 83 208,9	Po 84 (210)	At 85 (210)									86 (222)	Rn
7	Fr 87 (223)	Ra 88 (226)	** Ac 89 (227)	Rf 104 (261)	Db 105 (262)	Sg 106 (263)	Bh 107 (264)	Hs 108 (265)	Mt 109 (266)								

* ЛАНТАНОИДЫ

** АКТИНОИДЫ

58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

Z = 1 (водород, H).

Единственный электрон атома водорода находится в состоянии $1s$, характеризуемом квантовыми числами $n = 1$, $l = 0$, $m_s = \pm 1/2$, $m = 0$ (ориентация его спина произвольна).

Z = 2 (гелий, He).

Оба электрона атома гелия находятся в состоянии $1s$, для атома He записывается $1s^2$ (для $1s$ – электрона). На атоме гелия заканчивается заполнение K -оболочки, что соответствует завершению I периода.

Z = 3 (литий, Li).

Третий электрон атома лития, согласно принципу Паули, уже не может разместиться в целиком заполненной *K*-оболочке и занимает наименьшее энергетическое состояние с $n = 2$ (*L*-оболочка), т.е. $2s$ -состояние. Электронная конфигурация для атома лития: $1s^2 2s^1$. Атом лития начинает II период периодической системы элементов.

Z = 4 (бериллий, Be).

Четвертым электроном бериллия заканчивается заполнение подоболочки $2s^2$. У следующих шести элементов от $Z = 5$ (бор, В) до $Z = 10$ (неон, Ne) идет заполнение подоболочки $2p$. II период периодической системы заканчивается неоном – инертным газом, для которого подоболочка $2p$ целиком заполнена.

ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ЭЛЕМЕНТОВ Д.И. МЕНДЕЛЕЕВА

ПЕРИОДЫ	Г Р У П П Ы								Э Л Е М Е Н Т О В							
	I	II		III	IV	V	VI	VII	VIII							
1	H 1 1,008								(H)					2 He 4,003		
2	Li 3 6,94	Be 4 9,01	B 5 10,81	C 6 12,01	N 7 14,01	O 8 16,0	F 9 19,0							10 Ne 20,18		
3	Na 11 22,99	Mg 12 24,3	Al 13 26,98	Si 14 28,09	P 15 30,97	S 16 32,06	Cl 17 35,45							18 Ar 39,95		
4	K 19 39,10	Ca 20 40,1	Sc 21 44,96	Ti 22 47,9	V 23 50,9	Cr 24 52,0	Mn 25 54,94	Fe 26 55,85	Co 27 58,93	Ni 28 58,71						
	Cu 29 63,55	Zn 30 65,4	Ga 31 69,7	Ge 32 72,59	As 33 74,92	Se 34 78,96	Br 35 79,9							36 Kr 83,80		
5	Rb 37 85,47	Sr 38 87,6	Y 39 88,9	Zr 40 91,2	Nb 41 92,9	Mo 42 95,94	Tc 43 (99)	Ru 44 101,1	Rh 45 102,9	Pd 46 106,4						
	Ag 47 107,9	Cd 48 112,4	In 49 114,8	Sn 50 118,7	Sb 51 121,75	Te 52 127,6	I 53 126,9							54 Xe 131,3		
6	Cs 55 132,9	Ba 56 137,3	* La 57 138,9	Hf 72 178,5	Ta 73 180,9	W 74 183,8	Re 75 186,2	Os 76 190,2	Ir 77 192,2	Pt 78 195,1						
	Au 79 196,9	Hg 80 200,6	Tl 81 204,4	Pb 82 207,2	Bi 83 208,9	Po 84 (210)	At 85 (210)							86 Rn (222)		
7	Fr 87 (223)	Ra 88 (226)	** Ac 89 (227)	Rf 104 (261)	Db 105 (262)	Sg 106 (263)	Bh 107 (264)	Hs 108 (265)	Mt 109 (266)							

* ЛАНТАНОИДЫ

** АКТИНОИДЫ

58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

$Z = 11$ (натрий, Na).

Одиннадцатый элемент натрий размещается в M оболочке ($n = 3$), занимая состояние $3s$. Электронная конфигурация имеет вид: $1s^2 2s^2 2p^6 3s$. $3s$ электрон (как и $2s$ электрон лития) является валентным электроном, поэтому оптические свойства подобны свойствам лития.

$Z = 12$ (магний, Mg)

начинается последовательное заполнение M -оболочки. $Z = 18$ (аргон, Ar) является химически инертным и завершает III период периодической системы.

Z = 19 (калий, K).

Калий должен был бы занять $3d$ -состояние в M -оболочке. Однако и в оптическом, и в химическом отношении атом калия схож с атомами лития и натрия, которые имеют $3s$ валентный электрон в s -состоянии. Поэтому единственный валентный электрон калия должен также находиться в s -состоянии, но это может быть только s -состояние новой оболочки (N -оболочки), т.е. заполнение N -оболочки для калия начинается при незаполненной M -оболочке.

III	11	НАТРИЙ	<i>Na</i>	2	2	6	1						
	12	МАГНИЙ	<i>Mg</i>	2	2	6	2						
	13	АЛЮМИНИЙ	<i>Al</i>	2	2	6	2	1					
	14	КРЕМНИЙ	<i>Si</i>	2	2	6	2	2					
	15	ФОСФОР	<i>P</i>	2	2	6	2	3					
	16	СЕРА	<i>S</i>	2	2	6	2	4					
	17	ХЛОР	<i>Cl</i>	2	2	6	2	5					
	18	АРГОН	<i>Ar</i>	2	2	6	2	6					
				КОНФИГУРАЦИЯ НЕОНА									
	19	КАЛИЙ	<i>K</i>	2	2	6	2	6		1			
	20	КАЛЬЦИЙ	<i>Ca</i>	2	2	6	2	6		2			
	21	СКАНДИЙ	<i>Sc</i>	2	2	6	2	6	1	2			
	22	ТИТАН	<i>Ti</i>	2	2	6	2	6	2	2			
	23	ВАНАДИЙ	<i>V</i>	2	2	6	2	6	3	2			
IV	24	ХРОМ	<i>Cr</i>	2	2	6	2	6	5	1			
	25	МАРГАНЕЦ	<i>Mn</i>	2	2	6	2	6	5	2			
	26	ЖЕЛЕЗО	<i>Fe</i>	2	2	6	2	6	6	2			
	27	КОБАЛЬТ	<i>Co</i>	2	2	6	2	6	7	2			
	28	НИКЕЛЬ	<i>Ni</i>	2	2	6	2	6	8	2			
	29	МЕДЬ	<i>Cu</i>	2	2	6	2	6	10	1			
	30	ЦИНК	<i>Zn</i>	2	2	6	2	6	10	2			
	31	ГАЛЛИЙ	<i>Ga</i>	2	2	6	2	6	10	2	1		
	32	ГЕРМАНИЙ	<i>Ge</i>	2	2	6	2	6	10	2	2		

Это означает, что в результате взаимодействия электронов состояние $n = 4, l = 0$ имеет меньшую энергию, чем состояние $n = 3, l = 2$. Спектроскопические и химические свойства $Z = 20$ (кальция, Ca) показывают, что его двадцатый электрон также находится в $4s$ -состоянии N -оболочки. В последующих элементах происходит заполнение M -оболочки (от Sc ($Z = 21$) до Zn ($Z = 30$)). Далее N -оболочка заполняется до Kr ($Z = 36$), у которого опять-таки, как и в случае с Ne и Ar, s - и p -состояния наружной оболочки заполнены полностью. Криптоном заканчивается N -период.

ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ЭЛЕМЕНТОВ Д.И. МЕНДЕЛЕЕВА

ПЕРИОДЫ	Г Р У П П Ы								Э Л Е М Е Н Т О В							
	I	II		III	IV	V	VI	VII	VIII							
1	H 1 1,008								(H)					2 4,003 He		
2	Li 3 6,94	Be 4 9,01	B 5 10,81	C 6 12,01	N 7 14,01	O 8 16,0	F 9 19,0							10 20,18 Ne		
3	Na 11 22,99	Mg 12 24,3	Al 13 26,98	Si 14 28,09	P 15 30,97	S 16 32,06	Cl 17 35,45							18 39,95 Ar		
4	K 19 39,10	Ca 20 40,1	Sc 21 44,96	Ti 22 47,9	V 23 50,9	Cr 24 52,0	Mn 25 54,94	Fe 26 55,85	Co 27 58,93	Ni 28 58,71						
	Cu 29 63,55	Zn 30 65,4	Ga 31 69,7	Ge 32 72,59	As 33 74,92	Se 34 78,96	Br 35 79,9							36 83,80 Kr		
5	Rb 37 85,47	Sr 38 87,6	Y 39 88,9	Zr 40 91,2	Nb 41 92,9	Mo 42 95,94	Tc 43 (99)	Ru 44 101,1	Rh 45 102,9	Pd 46 106,4						
	Ag 47 107,9	Cd 48 112,4	In 49 114,8	Sn 50 118,7	Sb 51 121,75	Te 52 127,6	I 53 126,9							54 131,3 Xe		
6	Cs 55 132,9	Ba 56 137,3	* La 57 138,9	Hf 72 178,5	Ta 73 180,9	W 74 183,8	Re 75 186,2	Os 76 190,2	Ir 77 192,2	Pt 78 195,1						
	Au 79 196,9	Hg 80 200,6	Tl 81 204,4	Pb 82 207,2	Bi 83 208,9	Po 84 (210)	At 85 (210)							86 (222) Rn		
7	Fr 87 (223)	Ra 88 (226)	** Ac 89 (227)	Rf 104 (261)	Db 105 (262)	Sg 106 (263)	Bh 107 (264)	Hs 108 (265)	Mt 109 (266)							

* ЛАНТАНОИДЫ

** АКТИНОИДЫ

58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

Каждую из двух групп элементов – **лантаноиды** ($Z = 57$ (лантан, La) до $Z = 71$ (лютеций, Lu) и **актиноиды** (от $Z = 89$ (актиния, Ac) до $Z = 103$ (лоуренсия, Lr)) – помещают в одну клетку таблицы, т.к. химические свойства элементов в пределах этих групп очень близки.

Это объясняется тем, что для лантаноидов заполнение подоболочки $4f$, которая может содержать 14 электронов, начинается лишь после того, как целиком заполнятся подоболочки $5s, 5p$ и $6s$. Поэтому для этих элементов внешняя p -оболочка ($6s^2$) оказывается одинаковой.

Аналогично, одинаковой для актиноидов является Q -оболочка ($7s^2$).

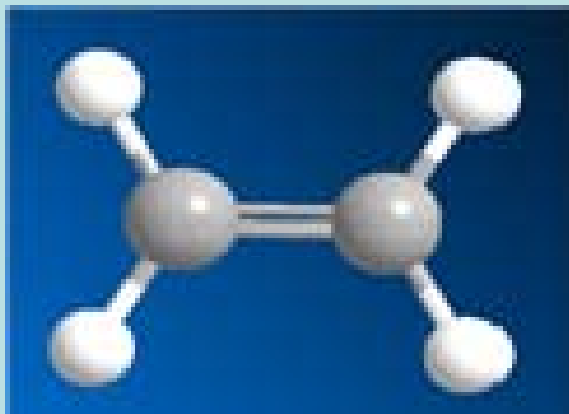
Таким образом, открытая Менделеевым периодичность в химических свойствах элементов объясняется повторяемостью в структуре внешних оболочек у атомов родственных элементов.

Так, инертные газы имеют одинаковые внешние оболочки из восьми элементов (заключенные в s - и p -состояниях); во внешних оболочках щелочных металлов (Li, Na, K, Rb, Cs, Fr) имеется лишь один s -электрон; во внешней оболочке щелочно-земельных металлов (Be, Mg, Ca, Sr, Ba, Ra) имеется $2s$ -электрона; галоиды (F, Cl, Br, I, At) имеют внешние оболочки, в которых недостает одного электрона до оболочки инертного газа и т.д.

В настоящее время открыто 118 элементов.

МОЛЕКУЛЯРНЫЕ СПЕКТРЫ

Молекула — наименьшая частица вещества, состоящая из одинаковых или различных атомов, соединенных между собой химическими связями, и являющаяся носителем его основных химических и физических свойств. Химические связи обусловлены взаимодействием внешних валентных электронов атомов. Наиболее часто в молекулах встречается два типа связи: **ионная (КСl)** и **ковалентная (Н2)**.



ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ЭЛЕМЕНТОВ Д.И. МЕНДЕЛЕЕВА

ПЕРИОДЫ	Г Р У П П Ы								Э Л Е М Е Н Т О В							
	I	II		III	IV	V	VI	VII	VIII							
1	H 1 1,008							(H)						2 4,003 He		
2	Li 3 6,94	Be 4 9,01	B 5 10,81	C 6 12,01	N 7 14,01	O 8 16,0	F 9 19,0							10 20,18 Ne		
3	Na 11 22,99	Mg 12 24,3	Al 13 26,98	Si 14 28,09	P 15 30,97	S 16 32,06	Cl 17 35,45							18 39,95 Ar		
4	K 19 39,10	Ca 20 40,1	Sc 21 44,96	Ti 22 47,9	V 23 50,9	Cr 24 52,0	Mn 25 54,94	Fe 26 55,85	Co 27 58,93	Ni 28 58,71						
	Cu 29 63,55	Zn 30 65,4	Ga 31 69,7	Ge 32 72,59	As 33 74,92	Se 34 78,96	Br 35 79,9							36 83,80 Kr		
5	Rb 37 85,47	Sr 38 87,6	Y 39 88,9	Zr 40 91,2	Nb 41 92,9	Mo 42 95,94	Tc 43 (99)	Ru 44 101,1	Rh 45 102,9	Pd 46 106,4						
	Ag 47 107,9	Cd 48 112,4	In 49 114,8	Sn 50 118,7	Sb 51 121,75	Te 52 127,6	I 53 126,9							54 131,3 Xe		
6	Cs 55 132,9	Ba 56 137,3	* La 57 138,9	Hf 72 178,5	Ta 73 180,9	W 74 183,8	Re 75 186,2	Os 76 190,2	Ir 77 192,2	Pt 78 195,1						
	Au 79 196,9	Hg 80 200,6	Tl 81 204,4	Pb 82 207,2	Bi 83 208,9	Po 84 (210)	At 85 (210)							86 (222) Rn		
7	Fr 87 (223)	Ra 88 (226)	** Ac 89 (227)	Rf 104 (261)	Db 105 (262)	Sg 106 (263)	Bh 107 (264)	Hs 108 (265)	Mt 109 (266)							

* ЛАНТАНОИДЫ

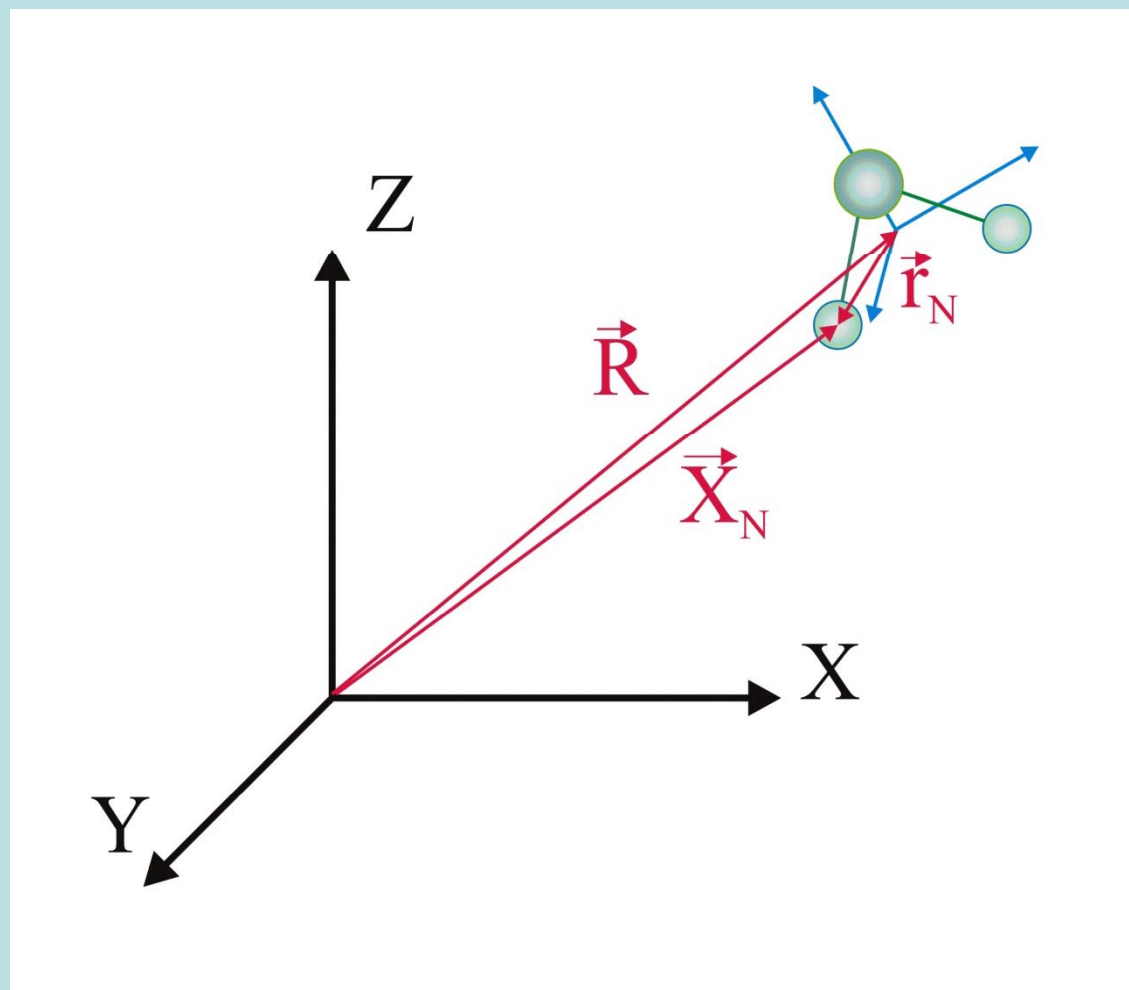
** АКТИНОИДЫ

58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

Молекула является квантовой системой; она описывается уравнением Шредингера, учитывающим движение электронов и ядер в молекуле

$$H = \sum_{i\alpha} \frac{P_{i\alpha}^2}{2m_i} + \sum_{N\alpha} \frac{P_{N\alpha}^2}{2m_N} + \sum_{ij} \frac{e^2}{r_{ij}} + \sum_{NK} \frac{e_N e_K}{r_{NK}} - \sum_{iN} \frac{ee_N}{r_{iN}}$$

Однако, решать такое уравнение Шредингера никто не умеет. Поэтому от такой записи переходят к другой, которая подразумевает наличие электронного движения в молекуле, а движение ядер разбивается на поступательное движение всей молекулы, ее вращение в пространстве, и движение ядер друг относительно друга (колебания)



$$H_{\text{мол.}} = H_{\text{эл.}} + H_{\text{пост.}} + H_{\text{кол.}} + H_{\text{вращ.}}$$

ПРИБЛИЖЕНИЕ БОРНА-ОППЕНГЕЙМЕРА

$$H_{\text{мол.}} = H_{\text{эл.}} + H_{\text{пост.}} + H_{\text{кол.}} + H_{\text{вращ.}}$$



1). Электронная задача:

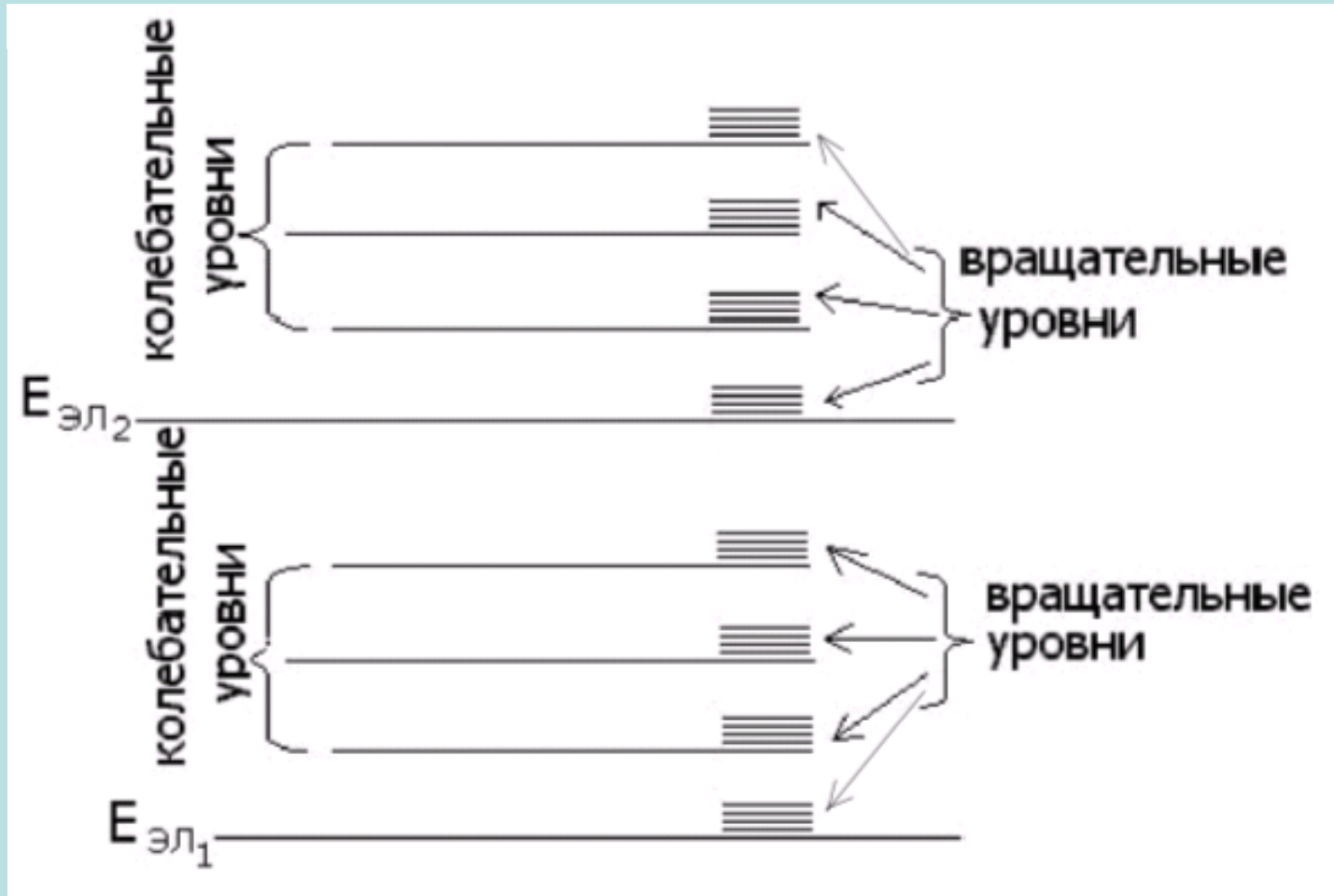
$$H_{\text{эл.}} \psi_{\text{эл.}} = E_{\text{эл.}} \psi_{\text{эл.}}$$



2). Ядерная задача:

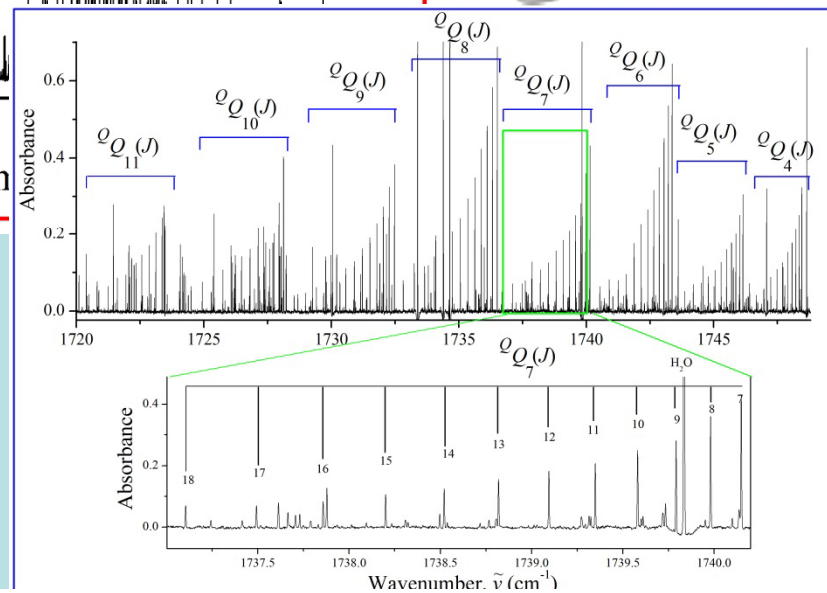
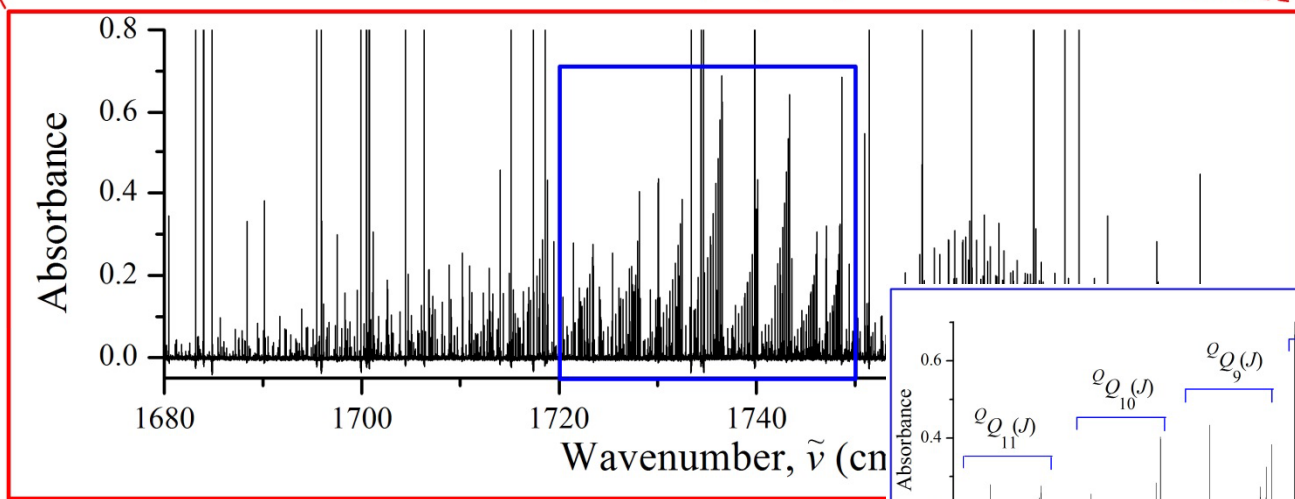
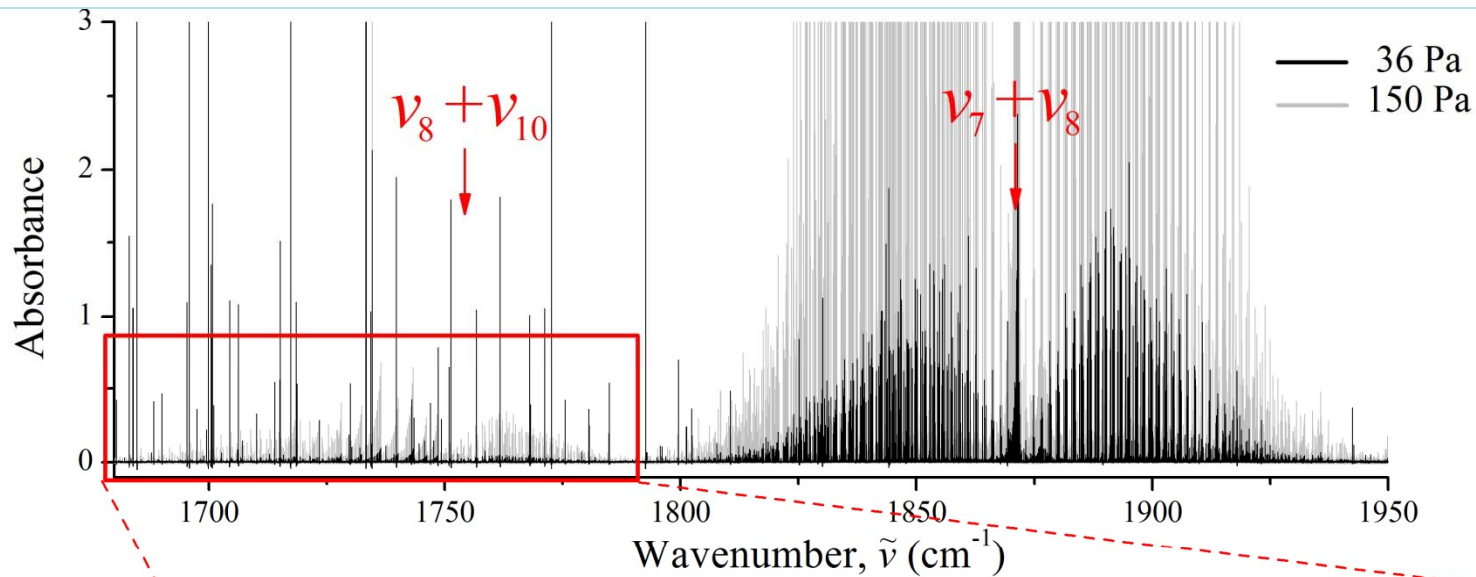
$$(H_{\text{кол.}} + H_{\text{вращ.}}) \psi_{\text{к.-в.}} = E_{\text{к.-в.}} \psi_{\text{к.-в.}}$$

$$E_{\text{мол.}} = E_{\text{эл.}} + E_{\text{кол.}} + E_{\text{вращ.}}$$



Совокупность всех возможных переходов из одного колебательного состояния в другое колебательное состояние называется полосой.

Полоса может насчитывать до нескольких десятков тысяч переходов



<http://www.youtube.com/watch?v=ZhA1esNC8QU>

http://www.youtube.com/watch?v=_SsDX37Vosw