

А.А. Потапов

АТОМ

**Строение и расчет
основных параметров**

Монография

RU
science
RUS-SCIENCE.RU

А.А. Потапов

АТОМ

Строение и расчет основных параметров

Монография

Научная библиотека СФУ



A1451887B

RU
science
RUS-SCIENCE.RU

Москва
2026

УДК 531
ББК 22.21
П64

П64

Потапов, Алексей Алексеевич.

Атом. Строение и расчет основных параметров : монография / А.А. Потапов. — Москва : РУСАЙНС, 2026. — 330 с.

ISBN 978-5-466-11060-9

Настоящая монография посвящена исследованию атома как исходного структурного элемента вещества. Сформулированы основные законы структурообразования атомов. На богатом экспериментальном материале и в логике рационального познания дается обоснование электронного строения атомов. Атомы водорода и гелия выделены как атомы, играющие ключевую роль в понимании устройства атомов. В рамках диполь-оболочечной модели установлены природа и механизм формирования многоэлектронных атомов. Дан расчет основных параметров атомов, таких как константы экранирования, большие и малые полуоси эллиптических орбит и их эксцентриситеты, эффективные радиусы атомов и ионов. Определено место атома в структурной иерархии вещества. Обсуждаются механизмы самоорганизации атомов. Предложена естественно-научная классификация элементов, основанная на понимании электронного строения атомов. Сформулирован закон периодичности элементов, признаком периодичности которого выступают высокосимметричные электронные конфигурации атомов.

Книга рассчитана на специалистов, занимающихся исследованиями электронного строения атомов и вещества в целом.

554444

УДК 531
ББК 22.21



ISBN 978-5-466-11060-9

© Потапов А.А., 2026
© ООО «РУСАЙНС», 2026

Оглавление

Предисловие	4
Введение	7
1. Атом в иерархии уровней вещества	14
1.1. Связь иерархических уровней вещества	14
1.2. Субатомный уровень	16
1.3. Ядерный уровень	24
1.4. Атомный уровень	28
1.5. Молекулярный уровень	30
1.6. Надмолекулярный уровень	31
2. Электронное строение атомов	36
2.1. Атом водорода	36
2.2. Атом гелия	83
2.3. Многоэлектронные атомы	98
3. Оболочечное строение атомов	195
4. Периодическая система элементов	240
4.1. Несостоятельность квантовомеханического описания периодичности элементов таблицы Менделеева	242
4.2. Природа и механизм формирования атомов	255
4.3. Строение таблицы Менделеева в рамках диполь-оболочечной модели атомов	257
4.4. Систематизация атомов по признаку их электронного строения	263
4.5. Закон периодичности элементов	270
5. Обсуждение	276
Заключение	307
Литература	310
Приложения	314

Предисловие

Сегодня в атомной физике создалась парадоксальная ситуация: в ней уживаются принципиально разные теоретические подходы к постижению атома. С одной стороны, логичная, но не завершенная теория Бора, а с другой – не имеющая достаточного обоснования квантово-волновая теория. К сожалению, первая оказалась на правах маргинальной теории, а вторая стала основой квантовой физики и квантовой химии (!?).

Атом оказался узлом концептуальных противоречий и болевой точкой естествознания. Анализ динамики становления науки о веществе показывает, что логичная и последовательная линия ее развития претерпела сбой на этапе «неэмпирическое описание» атомов, когда физическое осмысление явлений и процессов материального мира было подменено математическими абстракциями типа волновых функций. Но волновая функция вовсе не является искомой величиной. Она не имеет физического содержания, и все последующие построения на ее основе носят абстрактный умозрительный характер. Надо полагать, что волновая функция вообще является избыточным параметром, поскольку энергия связи и геометрия атома обеспечивают исчерпывающее описание атома – его энергетическое состояние и его строение. Произошла подмена понятий.

Примером несостоятельности квантовомеханической методологии может служить попытка дать описание молекул и плотных веществ с помощью комбинации несуществующих в природе атомных орбиталей. Так что, все недостатки, присущие квантовомеханическому методу описания отдельных атомов, переносятся на молекулы и плотные вещества. Ничего нового в понимание строения атомов квантовая механика за прошедшие 100 лет своего существования не привнесла. Она дискредитировала себя своим бессилием и беспомощностью. Поспешное квантовомеханическое новаторство в начале 20-го века стало причиной того, что атомная физика впала в глубокий анабиоз и по настоящее время пребывает в нем.

Сегодня дискуссия о концептуальных основаниях атомной физики приобрела особую значимость в связи с практической потребностью в теоретическом обеспечении высоких технологий, основанных на атомно-молекулярной сборке. Интерес к основаниям квантовой механики также резко возрос в связи с интенсивными исследованиями в области создания квантовых компьютеров, крип-

тографии и телепортации. Данное обстоятельство предполагает очередной виток дискуссии основ квантовой механики на принципиально ином уровне, отличающемся своей практической направленностью. И хотя объект исследования при этом зачастую выходит за пределы, ограничиваемые рамками атомной физики, можно с большой вероятностью ожидать, что в результате данной дискуссии, наконец, будет разрешена проблема теоретических основ вещества.

Настоящая монография является продолжением исследований электронного строения атомов, начатых в моих предшествующих монографиях "Электронное строение атомов" (2009г.) и "Ренессанс классического атома" (2011г.). Главная задача монографии, как и прежде, заключается в том, чтобы показать основополагающую роль атома в понимании мироустройства и формировании материалистического мировоззрения.

Материал монографии претерпел существенные изменения, но логика изложения материала и концепция электронного строения классического атома сохранились. Атом является отправным и ключевым звеном в процессах структурообразования вещества. Это означает, что, не решив главную проблему, \square проблему строения атома, бессмысленно обращаться к вопросам строения вещества, его природы и механизмов образования. Не разобравшись в причинах, нельзя судить о следствиях. Очевидно, что необходимо вернуться к исходным позициям доквантового периода науки о веществе и восстановить прерванную логику научных исследований в области электронного строения вещества.

Общие принципы формирования атомов просты и подчиняются классическим законам. Источником информации о внутриатомном строении являются электрические свойства, которые проявляются как результат взаимодействия между электрическими зарядами ядра и электронов. Количественной мерой этих взаимодействий выступает энергия связи как результат совместного действия сил кулоновского притяжения между ядром и электронами и сил кулоновского отталкивания между электронами. Единственным возможным способом сосуществования этих противоположностей является динамическое состояние электронов в центральном поле ядра. В результате возникающего противостояния электрических сил притяжения, с одной стороны, и сил центробежного отталкивания, с

другой стороны, достигается устойчивое динамическое состояние между ядром и электронами. А благодаря действию закона минимума потенциальной энергии электроны принимают правильные высокосимметричные конфигурации.

Лежащая в основе теоретического описания диполь-оболочечная модель атома прошла всестороннее обоснование и апробацию на огромном экспериментальном материале. Согласно данной модели атомы имеют оболочечное строение, а каждая из оболочек представляет правильную геометрическую фигуру, образованную из электронов. Механизм формирования атомов предельно прост для восприятия и понимания, что делает атом доступным для обсуждения и его совершенствования. Описание модели осуществляется в рамках классических законов электростатики и электродинамики.

Основополагающие положения электронного строения атомов, изложенные в настоящей монографии, подтверждены новыми исследованиями и доведены до уровня количественного описания атомов и ионов. Уточнен ряд предшествующих моделей электронных конфигураций атомов. Рассчитаны основные параметры атомов, такие как эффективные радиусы атомов и ионов, константы экранирования, большие и малые полуоси эллиптических орбит и их эксцентриситеты. Обсуждаются механизмы формирования атомов. Предложена таблица периодичности элементов, основанная на периодичности электронных конфигураций атомов. Сформулирован закон периодичности элементов на основе понимания электронного строения атомов.

Автор надеется, что настоящая монография станет катализатором к всестороннему и конструктивному обсуждению проблемы оснований атомной физики. Пришло время решительных действий по возвращению атомной физики на путь рационального пути познания природы.

Замечания и отзывы на монографию прошу направлять по адресу: aleksey.potapov.icc@gmail.com *А. А. Попанов*

Введение

В историческом становлении атомной физики можно выделить ряд наиболее важных этапов: 1) умозрительная атомистика древних; 2) экспериментальное подтверждение существования атома, ставшее возможным благодаря введению в научную практику весового (массового) метода измерений; 3) накопление сведений о многообразии элементов и их систематизация, завершившаяся созданием таблицы Менделеева; 4) открытие сложного электрон-протон-нейтронного строения атома; 5) квантовомеханическое учение, которое, с одной стороны, провозглашает идею принципиальной непознаваемости атомов, и вместе с этим, выдвигает модель эфемерных оболочкообразных электронов на основании концепции вероятностного распределения электронной плотности; 6) и, наконец, сегодняшний этап драматичных поисков и обсуждения приемлемых моделей внутриатомного строения.

Триумф квантовомеханического описания атома водорода (начало XX столетия) предопределил характер последующего этапа становления атомной физики. Долгое время считалось, что достигнутая непостижимо высокая точность описания атома водорода рано или поздно будет реализована и перенесена на другие атомы. К сожалению, за прошедшие почти 100 лет с момента создания квантовой механики эту идею претворить в жизнь так и не удалось. В современной атомной физике продолжает утверждаться вывод так называемой копенгагенской школы о полноте и завершенности квантовой механики: «Физика достигла конца своего пути и дальнейшие прорывы невозможны». Данная идеология остается господствующей в ортодоксальной науке и по настоящее время. Такое положение вещей далеко не способствует проведению всесторонних и не ангажированных исследований в атомной физике.

По своей сути квантовомеханический этап атомной физики характеризует себя как финалистский. Следуя этому определению, развитие атомной физики завершено в силу принципиальных ограничений, возникающих в процессе познания сущности (электронного строения) атома. Эти ограничения сформулированы в виде принципа неопределенности Гейзенберга, который в конечном итоге сводится к тому, что положение электрона в атоме определить невозможно и что на атомном уровне вступают в силу новые законы, отличные от классических законов макроскопических объектов.

Данная парадигма легла в основу построения Копенгагенской доктрины, разработанной в 20-х годах XX столетия Н. Бором, В. Гейзенбергом, М. Борном, П. Дираком, В. Паули, Дж. Фон Нейманом. Согласно данной доктрине свойства микрообъектов являются специфически квантовомеханическими (неклассическими); с другой стороны, утверждается, что эти свойства характеризуют скорее лабораторные операции (но не частицы материи), которые можно описать только классическим способом. Налицо явное противоречие: квантовомеханические символы имеют отношение к не-квантовым (= классическим) фактам.

Источником данного противоречия выступает утверждение, что физическая теория не дает приемлемого описания реальной действительности; она лишь описывает человеческий опыт. Согласно копенгагенской доктрине: "Не существует автономных квантовых событий, а только зависящие от наблюдателя квантовые элементы; то, что существует в том или ином квантовом состоянии, порождается наблюдением". Именно это утверждение не согласуется с повседневной практикой. Все, что нас окружает – это в конечном итоге атомно-молекулярные системы и для их существования и функционирования нет необходимости в стороннем наблюдателе. Да и сам наблюдатель – это атомно-молекулярный объект и его существование не требует непрерывного наблюдения за состоянием атомов и молекул, его составляющих.

Нельзя создать физическую теорию, исходя из нефизических предпосылок, таких, как постулат о невозможности существования автономных (независимых от наблюдателя) структур. Фактически ортодоксальная интерпретация квантовой механики отрицает собственно физику, подчиняя ее психофизиологии человека-наблюдателя.

Сегодня официальная наука, к сожалению, продолжает активно поддерживать квантовомеханический подход описания многоэлектронных атомов. В его основании лежит уравнение Шредингера, для которого, как принято считать, известно точное решение атома водорода. Его решением выступают волновые функции, которые используются для конструирования волновых функций многоэлектронных атомов. В качестве «обоснования» данного весьма спорного переноса в свое время была принята гипотеза Паули, которая заключается в том, что так называемые электронные орбитали

многоэлектронных атомов подобны орбиталиям атома водорода. Это предположение (не имеющее ни теоретического, ни экспериментального обоснования) затем переросло в так называемый принцип заполнения (ауфбау-принцип), согласно которому строение многоэлектронных атомов уподобляется строению атома водорода. Так что волновые функции молекул и химических соединений находятся путем конструирования из гипотетических "элементарных" волновых функций атома водорода, являющихся решением не имеющего физического смысла уравнения Шредингера.

По сути это означает, что конфигурация того или иного атома в его основном состоянии отождествляется с электронной конфигурацией атома водорода в возбужденном состоянии. Такая процедура отождествления электронных конфигураций позволяет орбитали ψ_{nlm} многоэлектронных атомов выразить через посредство орбиталей атома водорода ψ_{nlm} , где n, l, m — квантовые числа. В свою очередь корни n, l, m задают ряд "стандартных" конфигураций s -, p -, d -, f -орбиталей, которые отождествляются с действительными электронными конфигурациями атомов в виде сферических конфигураций (s -элементы), в виде гантелеобразных конфигураций (p -элементы), конфигураций в виде 4-х лепестковых розеток и т.д. Чтобы согласовать полученные таким образом электронные конфигурации атомов пришлось в надуманную систему построений дополнительно ввести гипотезу гибридизации орбиталей. Ни теоретического, ни экспериментального обоснования «явлению» гибридизации квантовомеханическая теория не дает, хотя в условиях сильных кулоновских внутриатомных взаимодействий перестройки типа гибридизации должны легко обнаруживаться в эксперименте. Чтобы свести концы с концами, в процедуру переноса волновых функций ψ_{nlm} атома водорода на многоэлектронные атомы пришлось ввести так называемые слэтеровские функции, которые с целью согласования квантовомеханических расчетов с экспериментом включают в себя подгоночные параметры типа эффективных зарядов и/или эффективных квантовых чисел.

Таким образом, здание теоретической химии построено на вере в то, что вся информация о свойствах и структуре веществ содержится в волновых функциях атомов и молекул, составляющих вещество. Но смысл волновой функции так же, как гипотеза волновой природы микрочастиц, остаются совершенно неопределенны-

ми, не имеющими ни теоретического, ни экспериментального обоснования. Волновая функция – это абстрактное математическое понятие и все теоретические построения на ее основе в принципе не могут приблизить к пониманию электронного строения вещества. Ложное начало не может привести к верному решению.

В этом отношении совершенно бездоказательным представляется еще одно громогласное утверждение, также имеющее широкое хождение не только в популярных изданиях, но и в научной и учебной литературе. Согласно официальной версии квантовая механика стала якобы тем необходимым условием, которое обеспечило становление и развитие ведущих областей знания – химии, электроники, оптики, материаловедения. Даже создание атомной бомбы, оказывается, не обошлось без участия квантовой механики. Но квантовая механика как метод теоретического описания вещества здесь совершенно не причем. Термин «квантовый» относится исключительно к объекту исследования, характерной особенностью которого действительно выступает признак дискретности: атомная дискретность, дискретность энергетических состояний атомов. Что касается "квантовой" теории как способа описания вещества, то, как показывает анализ, она представляется сегодня не более чем «математика ради математики», не несущей собой физического смысла. Все, что приписывается квантовой механике со ссылкой на практические результаты и достижения – это не более чем иллюзорные достижения, когда желаемое выдается за действительное.

Это звучит диссонансом по отношению к широко распространяемому в учебной и монографической литературе утверждению о том, что выводы квантовой механики имеют «превосходное» экспериментальное подтверждение. Детальный анализ данного вопроса опровергает данное утверждение и показывает, что достигнутое согласование представляется скорее подгонкой под известный результат, полученный Н. Бором еще в 1913 г., а уравнение Шредингера как теоретическая основа квантовомеханического описания атома водорода оказывается неверным.

Показательно, что основоположники квантовой механики – А. Эйнштейн, Луи-де-Бройль, Э Шредингер, М. Планк были противниками вероятностной интерпретации микропроцессов. Для Эйнштейна квантовая механика была сугубо статистической теорией, а волновая функция имела смысл описания вероятностных