

Układ okresowy pierwiastków dla faz skondensowanych

Andrzej Zięba

*Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej, Akademia Górniczo-Hutnicza,
Al. Mickiewicza 30, 30-059 Kraków*

Wyjaśnienie genezy układu Mendelejewa jest jednym z najważniejszych osiągnięć mechaniki kwantowej. Powtarzanie się podobnych własności fizycznych i chemicznych pierwiastków wynika z zapelniania kolejnych podpowłok atomu. Tutaj przedstawiona zostanie analiza okresowości przejawiającej się w strukturze elektronowej i własnościach fizycznych pierwiastków występujących nie w formie pojedynczych atomów, lecz z atomami zestalonymi w ciało stałe. Analiza wykorzystuje opublikowane rezultaty obliczeń struktury elektronowej, zwykle typu *ab initio*, będące numeryczną implementacją teorii pasmowej. Układ okresowy dla faz skondensowanych różni się nieco od klasycznego układu Mendelejewa, opartego o właściwości chemiczne pierwiastków. Klasyfikuje metale na proste, przejściowe, półmetale, oraz metale ziem rzadkich i aktynowców. Kolumna miedziowców (Cu, Ag i Au) należy do kategorii metali prostych (a nie przejściowych). Właściwości struktury elektronowej berylu Be i magnezu Mg wskazują, w zgodzie z właściwościami fizycznymi, że metale te winny znajdować się w kolumnie 2B, razem z Zn, Cd i Hg.