

УДК 541.21

UDC 541.21

02.00.00 Химические науки

Chemical sciences

ПРИМЕНЕНИЕ МАССОВО-РАДИАЛЬНОЙ МОДЕЛИ РАСЧЕТА АТОМНЫХ РАДИУСОВ ДЛЯ ИЗОТОПОВ ХИМИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ**APPLICATION OF THE MASS-RADIAL MODEL OF CALCULATION OF ATOMIC RADIUMS FOR ISOTOPES OF CHEMICAL ELEMENTS**

Казаченко Александр Сергеевич
к.х.н., Младший научный сотрудник
ORCID: 0000-0002-3121-1666
*Федеральный исследовательский центр
"Красноярский научный центр Сибирского
отделения Российской академии наук», Институт
химии и химических технологий СО РАН,
Красноярск, Россия*

Kazachenko Alexander Sergeevich
Cand.Chem.Sci., Junior Researcher
ORCID: 0000-0002-3121-1666
*Federal Research Center "Krasnoyarsk Scientific
Center of the Siberian Branch of the Russian Academy
of Sciences, Institute of Chemistry and Chemical
Technology SB RAS», Krasnoyarsk, Russia*

Шилов Павел Николаевич
Технолог
ORCID: 0000-0003-0824-1338
*АО «Ачинский нефтеперерабатывающий завод
Восточной нефтяной компании», Ачинск, Россия*

Shilov Pavel Nikolaevich
Technologist
ORCID: 0000-0003-0824-1338
*JSC Achinsk Oil Refinery East Oil Company, Achinsk,
Russia*

С помощью массово-радиальной модели расчетов были получены значения атомных радиусов для изотопов основных химических элементов. Показано, что радиус атома разных изотопов одного элемента отличен и зависит от массы и радиуса ядра. С целью исследования изменений значений ΔR_{av} в группах и периодах Периодической таблицы химических элементов построены зависимости ΔR_{av} от номера периода и номера группы. Обнаружено, что значения зависимости ΔR_{av} от номера периода/группы для d-элементов лежат в области низких значений ΔR_{av} , для s-элементов – в области высоких значений ΔR_{av} , а p-элементов – в области средних значений ΔR_{av} . Показано, что при увеличении атомного ядра на 1 нейтрон, радиус атома увеличивается от 0,01 до 4,76 пм, что обусловлено физическим эффектом внутри атома

The article presents the results of studies of changes in the atomic radii of isotopes of the elements of the periodic table. With using the mass-radial model of calculations, the values of atomic radii for isotopes of chemical elements were obtained. It is shown that the atomic radius of different isotopes of one element is different and depends on the mass and radius of the nucleus. To study the changes in ΔR_{av} values in the groups and periods of the Periodic Table of Chemical Elements, the ΔR_{av} dependences on the period number and group number are constructed. It is found that the values depending on the number ΔR_{av} period / group for the d-elements lie in the low ΔR_{av} values for s-elements - in high ΔR_{av} values, and p-elements - in average values ΔR_{av} . It is shown that when the atomic nucleus is increased by 1 neutron, the atomic radius increases from 0.01 to 4.76 pm, which is due to the physical effect inside the atom

Ключевые слова: ИЗОТОП, РАДИУС АТОМА, МОДЕЛЬ РАСЧЕТОВ, ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА

Keywords: ISOTOPE, ATOMIC RADIUS, MODEL OF CALCULATION, THE PERIODIC SYSTEM

Doi: 10.21515/1990-4665-131-072

I. Введение

Изотопы являются вариантами определенного химического элемента, отличающиеся числом нейтронов [1]. У всех изотопов конкретного элемента имеется одинаковое число протонов в атоме [2].

Значение числа протонов в атомном ядре (атомный номер) равно значению числа электронов в нейтральном атоме. Атом конкретного элемента имеет множество вариантов количества нейтронов. Число нуклонов в ядре - массовое число, которое различно для каждого изотопа для определенного элемента [3, 4].

Большое значение имеют процессы получения изотопов углерода в верхних слоях атмосферы под действием космических излучений [5]. Эти изотопы распространены в атмосфере, гидросфере планеты, вовлечены в оборот углерода живыми организмами [6].

Согласно общепринятой космологической теории, в процессе Большого взрыва были получены только изотопы водорода и гелия, и следы нескольких изотопов лития, бериллия и, возможно, бора, а все остальные изотопы были созданы позже, в звездах и сверхновых [7]. Обилие изотопов на Земле связано с этими процессами, их распространением через Галактику и скоростью распада для неустойчивых изотопов [8].

Цель работы – расчет радиусов атомов наиболее распространенных изотопов химических элементов массово-радиальным методом.

II. Расчет радиусов атомов для изотопов химических элементов

Ранее авторами [9] была предложена модель экспресс-расчетов атомных радиусов и приведены основные условия для их проведения, также получены значения для элементов с порядковым номером 104-120. В настоящей работе показаны результаты применения вышеописанной модели для расчетов атомных радиусов изотопов химических элементов.

Исследовано изменение значений атомных радиусов от их масс для наиболее распространенных изотопов химических элементов Периодической таблицы Д.И. Менделеева. Данные приведены в таблице 1.

Рассчитано изменение радиуса атома для каждого элемента таблицы по формуле:

$$\Delta R = R_n - R_{n-1} , \tag{1}$$

где ΔR – изменение значения радиуса атома изотопа одного химического элемента, R_n – радиус атома изотопа с большей массой, R_{n-1} – радиус атома изотопа с меньшей массой.

Таблица 1.

Рассчитанное значение атомного радиуса элементов Периодической системы*

Элемент	M*, а.е.м. [10]	Рассчитанное значение атомного радиуса, пм	ΔR , пм	Элемент	M**, а.е.м. [10]	Рассчитанное значение атомного радиуса, пм	ΔR , пм	
Li	6	144,8		Ru	95	131,0		
	8	153,7	4,2371		97	131,2	0,0760	
	9	120,6	3,5321		100	131,4	0,0738	
B	10	104,9			104	131,7	0,0711	
	11	106,6	1,7657		105	131,8	0,0705	
	12	108,3	1,6379		106	131,8	0,0698	
	13	109,8	1,5289		107	131,9	0,0692	
C	10	82,2			Rh	102	131,3	
	11	84,3	2,0366			103	131,3	0,0903
	12	86,2	1,9033			104	131,4	0,0895
	13	88,0	1,7888	105		131,5	0,0887	
N	13	97,0		103		132,7	0,1229	
	14	98,5	1,5468	104		132,8	0,1218	
O	15	72,7		107		133,2	0,1187	
	16	74,4	1,7621	108		133,3	0,1177	
	17	76,1	1,6942	109		133,4	0,1167	
F	18	74,1		112		133,7	0,1139	
	19	75,2	1,0903	Ag	103	137,4		
	20	76,2	1,0492		104	137,6	0,1358	
Ne	19	41,7			105	137,7	0,1346	
	20	42,8	1,0728		106	137,8	0,1335	
	21	43,9	1,0460		107	138,0	0,1323	
Na	21	188,1			110	138,4	0,1291	
	22	190,0	1,8409		111	138,5	0,1280	
	24	193,5	1,7158		Cd	107	148,5	
Mg	23	152,9				109	148,8	0,1553
	24	154,5	1,6502			110	148,9	0,1540
	25	156,1	1,5995	111		149,1	0,1528	

Элемент	M*, а.е.м. [10]	Рассчитанное значение атомного радиуса, пм	ΔR , пм	Элемент	M**, а.е.м. [10]	Рассчитанное значение атомного радиуса, пм	ΔR , пм	
Al	27	124,8		In	114	149,5	0,1492	
	28	125,6	0,7977		115	149,7	0,1480	
	29	126,4	0,7745		116	149,8	0,1469	
Si	28	107,1			117	150,0	0,1458	
	29	108,1	0,9691	Sn	110	159,6		
	30	109,0	0,9446		111	159,9	0,2533	
P	29	115,1			113	160,4	0,2495	
	30	115,9	0,8362		114	160,6	0,2477	
	31	116,8	0,8146		115	160,9	0,2459	
S	31	95,2		117	161,3	0,2425		
	32	96,3	1,1280	Sb	112	152,9		
	33	97,4	1,1061		113	153,2	0,3492	
	34	98,5	1,0852		114	153,6	0,3469	
Cl	33	87,3			117	154,6	0,3403	
	35	88,7	0,6918		119	155,3	0,3360	
	36	89,4	0,6775		120	155,6	0,3339	
	37	90,0	0,6639		121	155,9	0,3318	
Ar	35	56,5			123	156,6	0,3278	
	38	58,8	0,7709		Te	116	154,8	
	39	59,6	0,7607			117	155,0	0,2839
	40	60,3	0,7509	118		155,3	0,2820	
K	38	213,0		120		155,9	0,2783	
	39	214,2	1,1612	121		156,2	0,2764	
	40	215,3	1,1379	122		156,4	0,2747	
	41	216,4	1,1156	123		156,7	0,2729	
	42	217,5	1,0943	124		157,0	0,2711	
Ca	39	174,6		127		157,8	0,2661	
	40	175,8	1,1191	128		158,0	0,2644	
	41	176,9	1,0984	129	158,3	0,2628		
	42	177,9	1,0785	130	158,6	0,2612		
	45	181,1	1,0237	120	157,3			
	46	182,1	1,0068	121	157,7	0,4852		
Sc	41	149,0		124	159,2	0,4778		
	42	150,0	0,9114	125	159,7	0,4753		
	43	150,8	0,8954	126	160,1	0,4730		
Ti	45	147,2		133	163,4	0,4571		
	46	147,5	0,3146	134	163,8	0,4549		
	47	147,9	0,3084	135	164,3	0,4528		

Элемент	M*, а.е.м. [10]	Рассчитанное значение атомного радиуса, пм	ΔR , пм	Элемент	M**, а.е.м. [10]	Рассчитанное значение атомного радиуса, пм	ΔR , пм	
	48	148,2	0,3026	J	124	124,8		
	49	148,5	0,2969		125	125,1	0,2712	
V	47	134,8			129	126,1	0,2650	
	48	135,0	0,2351		130	126,4	0,2635	
	49	135,2	0,2307		131	126,7	0,2620	
	50	135,5	0,2264		132	126,9	0,2605	
Cr	49	130,7			135	127,7	0,2563	
	50	130,9	0,1686		136	128,0	0,2549	
	51	131,0	0,1655		Xe	124	105,6	
52	131,2	0,1625	125			106,0	0,4204	
Mn	51	127,9		129		107,7	0,4137	
	52	128,0	0,1523	130		108,1	0,4121	
	53	128,2	0,1496	131		108,5	0,4105	
	54	128,3	0,1469	132		108,9	0,4089	
Fe	53	126,8		135		110,1	0,4043	
	54	126,9	0,1326	136		110,5	0,4028	
	55	127,1	0,1303	137		110,9	0,4013	
	56	127,2	0,1281	138		111,3	0,3998	
Co	55	125,7		134	277,3	0,4344		
	56	125,8	0,1597	135	277,7	0,4319		
	57	126,0	0,1571	136	278,2	0,4293		
Ni	57	125,4		140	279,9	0,4196		
	58	125,6	0,2074	Ba	130	236,6		
	59	125,8	0,2042		131	237,1	0,4579	
	60	126,0	0,2011		132	237,5	0,4553	
Cu	58	129,6			137	239,8	0,4428	
	60	130,1	0,4498		138	240,2	0,4404	
	61	130,3	0,2199		139	240,7	0,4380	
	62	130,5	0,2167		140	241,1	0,4356	
	63	130,7	0,2136		Hf	174	167,9	
Zn	63	139,8				178	168,3	0,0920
	64	140,1	0,2497			179	168,4	0,0916
	65	140,3	0,2463	180		168,4	0,0911	
	69	141,3	0,2335	182		150,7	0,0688	
	70	141,5	0,2305	183		150,8	0,0684	
Ga	64	145,2		184		150,9	0,0681	
	65	145,6	0,3948	185		150,9	0,0677	
	66	145,9	0,3899	186		151,0	0,0674	

Элемент	М*, а.е.м. [10]	Рассчитанное значение атомного радиуса, пм	ΔR , пм	Элемент	М**, а.е.м. [10]	Рассчитанное значение атомного радиуса, пм	ΔR , пм
	67	146,3	0,3850	W	180	142,0	
	68	146,7	0,3803		181	142,1	0,0502
	69	147,1	0,3757		182	142,1	0,0500
Ge	69	135,0			187	142,4	0,0487
	70	135,5	0,4996	Re	179	138,1	
	71	136,0	0,4943		180	138,1	0,0472
	72	136,5	0,4891		181	138,2	0,0469
	73	137,0	0,4841		182	138,2	0,0467
As	72	139,8			187	138,5	0,0455
	73	140,2	0,4122	188	138,5	0,0453	
	74	140,6	0,4078	Os	184	136,0	
	75	141,0	0,4035		185	136,0	0,0412
Se	74	131,4			188	136,1	0,0406
	75	132,1	0,6565		189	136,2	0,0404
	76	132,7	0,6510		190	136,2	0,0402
	79	134,7	0,6353	193	136,3	0,0396	
	80	135,3	0,6302	Ir	191	137,2	
Br	78	110,1			195	137,4	0,0498
	79	110,5	0,3797		196	137,4	0,0496
	80	110,9	0,3762		197	137,5	0,0493
	81	111,2	0,3728		198	137,5	0,0491
	82	111,6	0,3694		199	137,6	0,0489
	83	112,0	0,3661	Pt	192	140,8	
	84	112,3	0,3629		193	140,8	0,0695
Kr	78	83,9		197	141,1	0,0682	
	79	84,5	0,5307	Au	196	146,8	
	80	85,0	0,5273		197	146,9	0,0764
	81	85,5	0,5240		198	146,9	0,0760
	85	87,6	0,5113		202	147,2	0,0747
	86	88,1	0,5083	Hg	196	159,0	
Rb	82	250,2			201	159,5	0,0901
	83	250,9	0,6356		202	159,5	0,0897
	84	251,5	0,6296		203	159,6	0,0893
	85	252,1	0,6237		204	159,7	0,0889
	86	252,7	0,6179		205	159,8	0,0885
	87	253,3	0,6122	Tl	200	177,2	
Sr	84	211,9			204	177,8	0,1531
	85	212,6	0,6338		205	178,0	0,1524

Элемент	M*, а.е.м. [10]	Рассчитанное значение атомного радиуса, пм	Δ R, пм	Элемент	M**, а.е.м. [10]	Рассчитанное значение атомного радиуса, пм	Δ R, пм
	86	213,2	0,6282		206	178,2	0,1518
	87	213,8	0,6228		207	178,3	0,1512
	91	216,3	0,6021		Pb	203	178,1
Y	87	180,3		204		178,3	0,2248
	88	180,8	0,5221	205		178,5	0,2240
	89	181,3	0,5176	206		178,8	0,2232
Zr	89	157,3		209		179,4	0,2208
	90	157,5	0,1708	210		179,6	0,2200
	91	157,7	0,1691	211		179,9	0,2192
	95	158,3	0,1626	Bi	207	175,1	
Nb	81	141,0			210	175,7	0,1789
	82	141,1	0,1433		211	175,8	0,1783
	83	141,3	0,1417		212	176,0	0,1776
	84	141,4	0,1401		213	176,2	0,1769
	85	141,5	0,1386		214	176,4	0,1763
	86	141,7	0,1371	Po	210	193,6	
	87	141,8	0,1357		211	193,9	0,3416
	88	141,9	0,1343		212	194,3	0,3406
Mo	95	142,8	0,1251	At	211	144,1	
	92	136,1			212	144,3	0,1842
	93	136,2	0,0939		213	144,4	0,1836
	94	136,3	0,0929		214	144,6	0,1829
	95	136,4	0,0920		215	144,8	0,1823
Tc	99	136,7	0,0885	Rn	221	140,5	
	92	132,6			224	141,5	0,3128
	93	132,7	0,0879		225	141,8	0,3121
	94	132,8	0,0870		226	142,1	0,3114
	95	132,8	0,0861	Fr	221	307,9	
	99	133,2	0,0829		225	309,1	0,2880
	100	133,3	0,0821		226	309,4	0,2870
	102	133,4	0,0806	Ra	225	271,7	
	103	133,5	0,0798		226	272,1	0,3042
106	133,7	0,0777	229		273,0	0,3012	

* - приведен сокращенный вариант таблицы

** - M-масса атома.

Как видно из таблицы 1, при увеличении радиуса ядра атома на значение радиуса нейтрона, значение радиуса атома увеличивается от

0,001 до 4,746 пм. Данное явление, вероятно, связано с некоторым физическим эффектом внутри атома, который можно сформулировать следующим образом:

При изменении радиуса ядра атома на значение радиуса одного нейтрона, радиус атома изменяется в среднем на величину ΔR_{av} . То есть, ΔR_{av} – величина, на которую изменится радиус атома при изменении его ядра на 1 нейтрон. Данное явление требует дополнительных исследований.

Для оценки изменения данной характеристики было рассчитано среднее значение изменения радиуса атома (ΔR_{av}) для изотопов химических элементов по стандартной методике [11].

III. Исследование изменений значений ΔR_{av} по Периодической системе Д.И. Менделеева

С целью исследования изменений значений ΔR_{av} в группах и периодах Периодической таблицы химических элементов построены зависимости ΔR_{av} от номера периода и номера группы. Данные представлены на рисунках 1-4.

Изучено изменение ΔR_{av} в II и III периодах Периодической системы Д.И. Менделеева (рисунок 1).

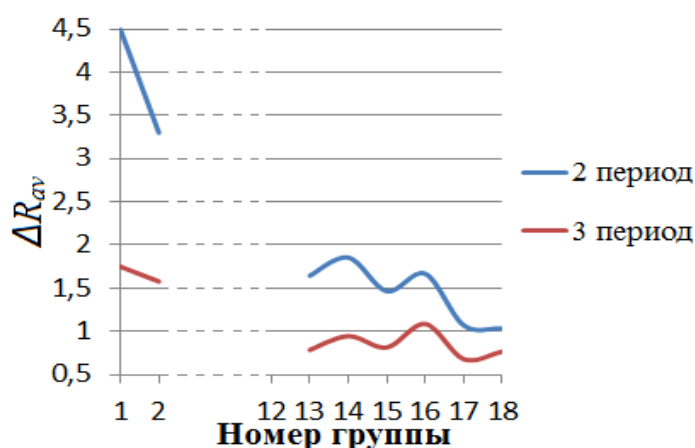


Рисунок 1 - Изменение ΔR_{av} в II и III периодах Периодической системы Д.И. Менделеева

Как показано на рисунке 1, значение ΔR_{av} уменьшается от 1 к 2 группе, в области 13 – 18 группы имеются 2 пика для 14 и 16 групп. Однако, в случае III периода пик, относящийся к 14 группе, имеет менее выраженный характер.

Данные по изучению зависимости $\Delta R_{av} = f(n)$ (где n – номер группы Периодической системы химических элементов) представлены на рисунке 2.

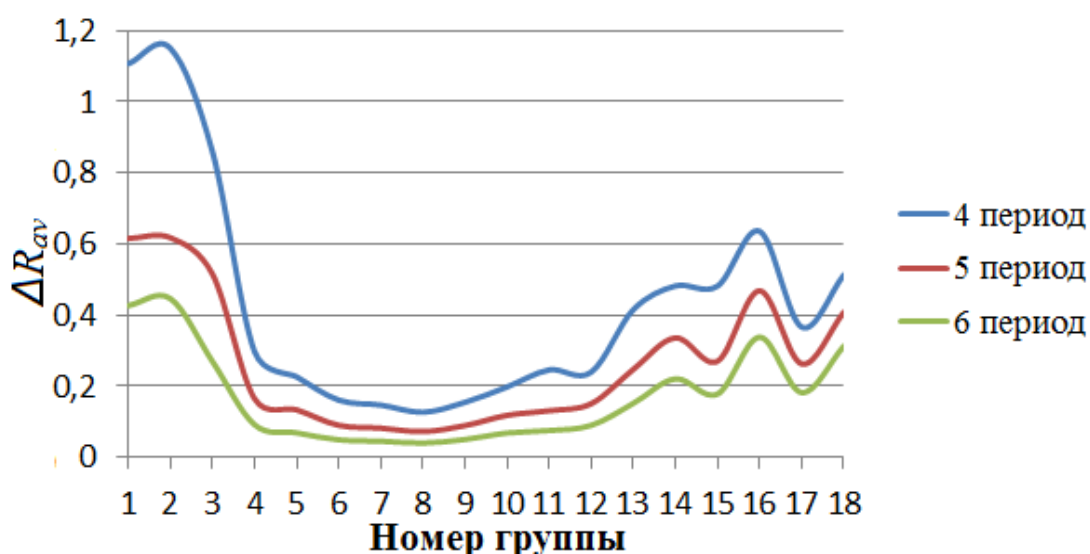


Рисунок 2 - Изменение ΔR_{av} в IV и VI периодах Периодической системы Д.И. Менделеева

Из рисунка 2 следует, что форма кривых для IV, V, VI периодов аналогична, имеется область низких значений для всех периодов с 3 по 12 группу, которые относятся к d-элементам. В области 13-18 групп наблюдаются пики при 14, 16, 18 группах. Для кривой, относящейся к IV периоду, наблюдается сглаживание пика для 14 группы. Наличие на данном рисунке области низких значений, вероятно, связано с особенностью строения атома и распределения электронов для d-элементов.

Данные исследования зависимости $\Delta R_{av} = f(n)$ (где n – номер периода Периодической системы химических элементов) для 1,2, 13-18 групп представлены на рисунке 3.

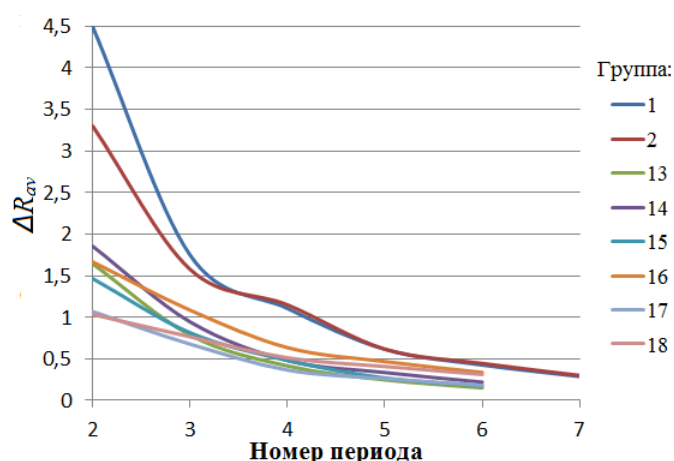


Рисунок 3 - Изменение ΔR_{av} в 1,2, 13-18 группах Периодической системы Д.И. Менделеева

Как показано на рисунке 3, кривые зависимости $\Delta R_{av} = f(n)$ (где n – номер периода Периодической системы химических элементов) для 1, 2 групп имеют форму отличную от кривых, описывающих данную зависимость в 13-18 группах, и лежат в области более высоких значений ΔR_{av} . Кривые, относящиеся к 13-18 группам, имеют схожую форму и лежат в интервале значений ΔR_{av} от 0,1 до 1,9 пм.

Исследована зависимость $\Delta R_{av} = f(n)$ (где n – номер периода Периодической системы химических элементов) для 3-12 групп. Полученные результаты представлены на рисунке 4.

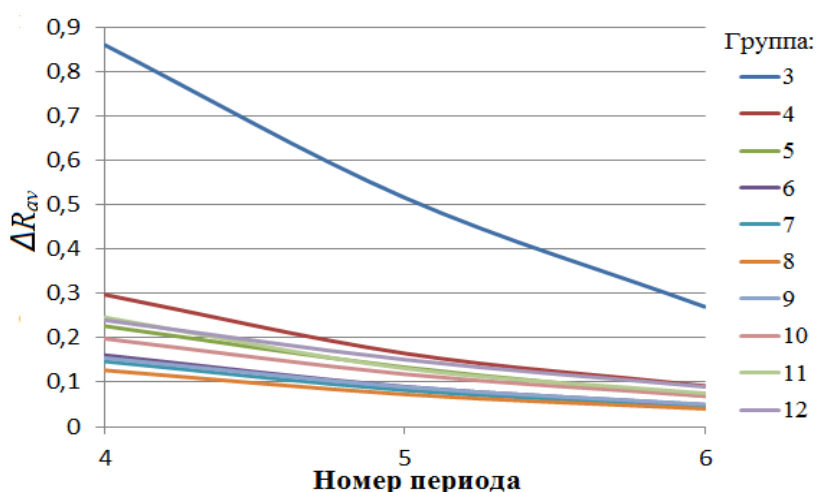


Рисунок 4 - Изменение ΔR_{av} в 3-12 группах Периодической системы Д.И. Менделеева

Из рисунка 4 следует, что значения ΔR_{av} равномерно убывают от IV периода к VI. Данная зависимость носит практически линейный характер. Формы кривых зависимости $\Delta R_{av} = f(n)$ (где n – номер периода Периодической системы химических элементов) аналогичны. Кривая, описывающая данную зависимость для 3 группы, лежит выше остальных кривых (для 4-12 групп) на 0,2 – 0,5 пм. Кривые, относящиеся к 4-12 группам, лежат в области значений ΔR_{av} 0,01 – 0,31 пм.

Таким образом, значения зависимости ΔR_{av} от номера периода/группы для d-элементов лежат в области низких значений ΔR_{av} , для s-элементов – в области высоких значений ΔR_{av} , а p-элементов – в области средних значений ΔR_{av} . Наличие вышеописанного эффекта требует дополнительных исследований.

IV. Расчет значений атомных радиусов для f-элементов

f-элементы обычно не рассматриваются как часть любой группы Периодической таблицы [12]. Они часто называются внутренними переходными металлами, поскольку они обеспечивают переход между s- и d-элементами в 6 и 7 периоде [13].

Все f-элементы являются металлами. Поскольку f-орбитальные электроны менее активны, их химические свойства в основном определяются внешними s-орбитальными электронами. Следовательно, у f-элементов гораздо меньше химической изменчивости, чем у s-, p- или d-элементов [14, 15].

Методом массово-радиальной модели были посчитаны значения атомных радиусов для f-элементов Периодической таблицы химических элементов.

Поскольку, согласно работе [9], кривые зависимостей $R=f(M)$ для f-элементов нелинейны, становится актуальным подбор оптимальных условий расчета атомных радиусов.

Для расчетов значений атомных радиусов лантаноидов была использована модель, описанная в работе [9], однако, из кривой, для придания линейности данной зависимости, были вынесены точки, относящиеся к Eu и Yb. Полученные коэффициенты были использованы для расчетов атомных радиусов. Расчеты для Eu и Yb проводились отдельно, логарифмированием и построением зависимостей.

Для расчетов значений атомных радиусов актиноидов использовали модель [9], разделив данные на 3 группы, построив по ним зависимости. Таким образом, были получены значения коэффициентов k и b уравнения:

$$R = e^{k \cdot \ln M} + b \tag{1}$$

Данные представлены в таблице 2.

Таблица 2.

Значения атомных радиусов f-элементов, рассчитанные по стандартной модели [9]

Эл-т	Масса атома, а.е.м.	Используемые коэффициенты		Рассчитанное значение атомного радиуса, пм	Эл-т	Масса атома, а.е.м.	Используемые коэффициенты		Рассчитанное значение атомного радиуса, пм
		k	bk				k	bk	
La	139	-4,2528	27,131	466,7	Ac	227	-0,1102	6,0087	223,8
Ce	140	-4,2528	27,131	452,7	Th	232	-0,1102	6,0087	223,3
Pr	141	-4,2528	27,131	439,2	Pa	231	-0,1102	6,0087	223,4
Nd	144	-4,2528	27,131	401,6	U	238	0,1035	4,9643	252,3
Pm	145	-4,2528	27,131	389,9	Np	237	0,1035	4,9643	252,2
Sm	150	-4,2528	27,131	337,6	Pu	244	0,1035	4,9643	253,0
Eu	152	0,4252	3,017	173,0	Am	243	0,1035	4,9643	252,9
Gd	157	-4,2528	27,131	278,0	Cm	247	-1,2182	12,45	310,6
Tb	159	-4,2528	27,131	263,5	Bk	247	-1,2182	12,45	310,6
Dy	163	-4,2528	27,131	237,1	Cf	251	-1,2182	12,45	304,6
Ho	165	-4,2528	27,131	225,1	Es	252	-1,2182	12,45	303,1
Er	167	-4,2528	27,131	213,8	Fm	257	-1,2182	12,45	295,9
Tm	169	-4,2528	27,131	203,3	Md	258	-1,2182	12,45	294,5
Yb	173	0,4252	3,017	182,8	No	259	-1,2182	12,45	293,1
Lu	175	-4,2528	27,131	175,2	Lr	262	-1,2182	12,45	289,1

Как показано в таблице 2, значения атомных радиусов значительно отличаются от литературных данных.

Для оценки применимости данных расчетов была посчитана относительная погрешность (δ %) по методике [11]. Данные представлены на рисунке 5.

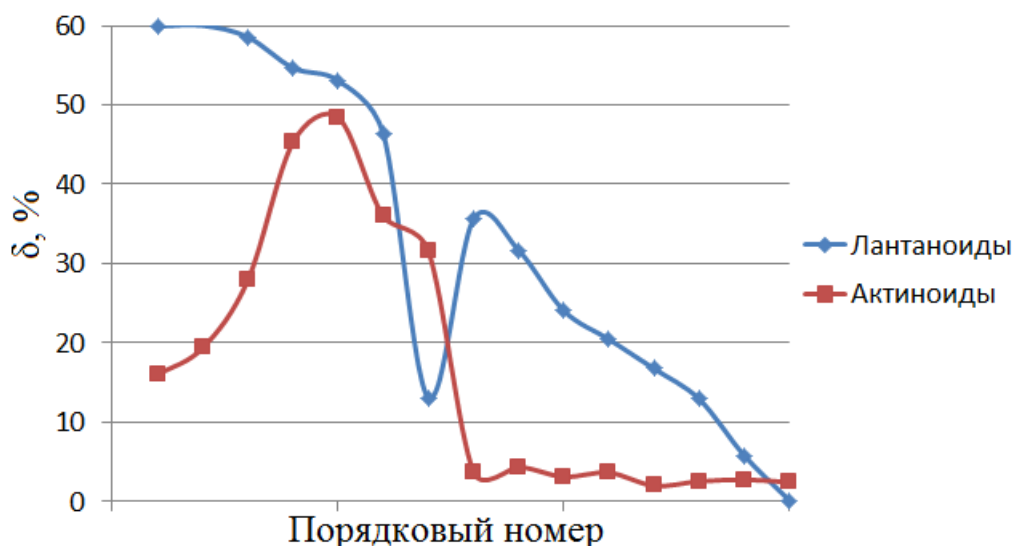


Рисунок 5 – Оценка применимости полученных данных

Согласно рисунку 5, данная модель применима только к некоторым элементам, относящимся к актиноидам (от Cm до Lr), так значения относительной погрешности составляет порядка 2-3%, при допустимой для данных систем 10%. Значение относительной погрешности для лантаноидов снижается при переходе от La к Lu, но в данной модели достаточно велико (10-70%). Таким образом необходим поиск оптимальных условий для расчета массово-радиальным методом.

V. Оптимизация расчетов в массово-радиальной модели

С целью уменьшения относительной погрешности эксперимента был проведен подбор оптимальных условий расчета в массово-радиальной модели. Посчитано полученное значение ΔR_{av} и относительной погрешности для каждого элемента. Данные приведены в таблице 3.

Таблица 3.

Оптимизированные значения k , δ , ΔR_{av} полученные для f-элементов*

Элемент	k	δ , %	ΔR_{av}	Элемент	k	δ , %	ΔR_{av}
La	-4,4381	0,0203	7,0	Ac	-1,3297	0,0002	1,1
Ce	-4,4383	0,0011	6,2	Th	-1,3324	0,0190	1,0
Pr	-4,4308	0,0028	5,7	Pa	-1,3539	0,0106	1,0
Nd	-4,412	0,0177	5,5	U	-1,3747	0,0016	0,8
Pm	-4,4048	0,0003	4,8	Np	-1,3866	0,0453	0,8
Sm	-4,3772	0,0050	6,0	Pu	-1,3393	0,0046	0,9
Eu	-4,3468	0,0109	5,9	Am	-1,3284	0,0274	1,0
Gd	-4,3399	0,0013	5,5	Cm	-1,2251	0,0005	1,5
Tb	-4,328	0,0174	5,0	Bk	-1,2263	0,0105	1,5
Dy	-4,3069	0,0230	5,5	Cf	-1,224	0,0130	1,5
Ho	-4,2977	0,0208	5,1	Es	-1,2249	0,0248	1,4
Er	-4,2886	0,0188	4,8	Fm	-1,2218	0,0258	1,4
Tm	-4,2798	0,0090	4,6	Md	-1,2229	0,0196	1,4
Yb	-4,2426	0,0213	5,0	No	-1,2233	0,0157	1,3
Lu	-4,2531	0,0137	4,5	Lr	-1,2226	0,0235	1,3

* - значение коэффициента b для лантаноидов составило 27,131, а для актиноидов 12,45

Таким образом, удалось снизить относительную погрешность до 0,01-0,02%.

VI. Выводы

С помощью массово-радиальной модели расчетов были получены значения атомных радиусов для изотопов основных химических элементов.

Показано, что радиус атома разных изотопов одного элемента отличен и зависит от массы и радиуса ядра.

Обнаружено, что значения зависимости ΔR_{av} от номера периода/группы для d-элементов лежат в области низких значений ΔR_{av} , для s-элементов – в области высоких значений ΔR_{av} , а p-элементов – в области средних значений ΔR_{av} .

Показано, что при увеличении атомного ядра на 1 нейтрон, радиус атома увеличивается от 0,01 до 4,5 пм, что обусловлено некоторым физическим эффектом внутри атома.

Проведен подбор оптимальных условий расчета в массово-радиальной модели для f-элементов, благодаря чему удалось снизить относительную погрешность до 0,01-0,02%.

Литература:

1. Thoennessen M. The Discovery of Isotopes // Springer. 2016. 415 p.
2. Audi G. The Nubase 2016 evaluation of nuclear properties // Chinese Physics C. 2017. V.41(3). P. 1-138.
3. Soddy F. Intra-atomic charge // Nature. V. 92. 1913. P. 399–401.
4. Баранова В.Ю. Изотопы: свойства, получение, применение. Т. 1 // М.: ФИЗМАТЛИТ, 2005. 600 с.
5. Dalrymple B. The Age of the Earth // Stanford University Press. 1991. 474 p.
6. Кулькова М.А. Радиоуглерод и тритий в водной системе Санкт-Петербургского региона // Известия российского государственного педагогического университета им. А.И. Герцена. 2014. №165. с. 93-98.
7. Budzikiewicz H. Mass spectrometry and isotopes: a century of research and discussion // Mass spectrometry reviews. 2006. V. 25 P. 146-157.
8. Treiman A.H. The SNC meteorites are from Mars // Planet. Space Sci. 2000. V.48 P. 12–17.
9. Казаченко А.С. Разработка новой модели расчетов значений атомных радиусов / Казаченко А.С., Шилов П.Н. // Политематический сетевой электронный научный журнал Кубанского государственного аграрного университета (Научный журнал КубГАУ) [Электронный ресурс]. – Краснодар: КубГАУ, 2017. – №07(131). – Режим доступа: <http://ej.kubagro.ru/2017/07/pdf/47.pdf>
10. Wieser M.E. Atomic weights of the elements 2011 (IUPAC Technical Report) // Pure and Applied Chemistry, 2013. V. 85 (5). P. 1047—1078.
11. Ефимова М.Р. Общая теория статистики // М.: ИНФРА. 1996. 416 с.
12. Greenwood, N. N. Chemistry of the Elements. - Oxford: Butterworth-Heinemann. 1997. 1344 p.
13. Gray T. The Elements: A Visual Exploration of Every Known Atom in the Universe // New York: Black Dog & Leventhal Publishers. 2009. p. 240.
14. Neil G. Elements. Nomenclature of Inorganic Chemistry // London: Royal Society of Chemistry. 2005. p. 52.
15. Grenthe I. Uranium. The Chemistry of the Actinide and Transactinide Elements // Springer. 2006. 700p.

References

1. Thoennessen M. The Discovery of Isotopes // Springer. 2016. 415 p.
2. Audi G. The Nubase 2016 evaluation of nuclear properties // Chinese Physics C. 2017. V.41(3). P. 1-138.
3. Soddy F. Intra-atomic charge // Nature. V. 92. 1913. P. 399–401.

4. Baranova V.Ju. Izotopy: svojstva, poluchenie, primenenie. T. 1 //- M.: FIZMATLIT, 2005. 600 s.
5. Dalrymple B. The Age of the Earth // Stanford University Press. 1991. 474 p.
6. Kul'kova M.A. Radiouglerod i tritij v vodnoj sisteme Sankt-Peterburgskogo regiona // Izvestija rossijskogo gosudarstvennogo pedagogicheskogo universiteta im. A.I. Gercena. 2014. №165. s. 93-98.
7. Budzikiewicz H. Mass spectrometry and isotopes: a century of research and discussion // Mass spectrometry reviews. 2006. V. 25 P. 146-157.
8. Treiman A.H. The SNC meteorites are from Mars // Planet. Space Sci. 2000. V.48 P. 12–17.
9. Kazachenko A.S. Razrabotka novej modeli raschetov znachenij atomnyh radiusov / Kazachenko A.S., Shilov P.N. // Politematicheskij setevoj jelektronnyj nauchnyj zhurnal Kubanskogo gosudarstvennogo agrarnogo universiteta (Nauchnyj zhurnal KubGAU) [Jelektronnyj resurs]. – Krasnodar: KubGAU, 2017. – №07(131). – Rezhim dostupa: <http://ej.kubagro.ru/2017/07/pdf/47.pdf>
10. Wieser M.E. Atomic weights of the elements 2011 (IUPAC Technical Report) // Pure and Applied Chemistry, 2013. V. 85 (5). P. 1047—1078.
11. Efimova M.R. Obshhaja teorija statistiki // M.: INFRA. 1996. 416 c.
12. Greenwood, N. N. Chemistry of the Elements. - Oxford: Butterworth-Heinemann. 1997. 1344 p.
13. Gray T. The Elements: A Visual Exploration of Every Known Atom in the Universe. New York: Black Dog & Leventhal Publishers. 2009. p. 240.
14. Neil G. Elements. Nomenclature of Inorganic Chemistry. London: Royal Society of Chemistry. 2005. p. 52.
15. Grenthe I. Uranium. The Chemistry of the Actinide and Transactinide Elements // Springer. 2006. 700p.