

УДК 541.21

UDC 541.21

02.00.00 Химические науки

Chemical sciences

АЛЬТЕРНАТИВНАЯ МОДЕЛЬ РАСЧЕТОВ ЗНАЧЕНИЙ АТОМНЫХ РАДИУСОВ

ALTERNATIVE MODEL OF CALCULATIONS OF VALUES OF ATOMIC RADIUS

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 технологии СО РАН,
Красноярск*

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*

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

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

В статье представлены результаты разработки альтернативной модели расчетов значений атомных радиусов. Была выведена формула для расчетов величин атомных радиусов элементов Периодической системы Д.И.Менделеева. Найдены оптимальные условия расчета по предложенной модели. Показано, что кривая зависимости значения поправочного коэффициента x от атомного номера элемента по форме совпадает с зависимостью энергии ионизации от зарядового числа

The article presents the results of the development of an alternative model for calculating the values of atomic radius. A formula was derived for calculating the atomic radius of the elements of the Periodic System of DI Mendeleev. The optimal calculation conditions for the proposed model are found. It is shown that the curve of the dependence of the value of the correction coefficient x on the atomic number of the element in form coincides with the dependence of the ionization energy on the charge number

Ключевые слова: РАДИУС АТОМА, ТАБЛИЦА МЕНДЕЛЕЕВА, МОДЕЛЬ РАСЧЕТОВ, МАССА АТОМА

Keywords: ATOM RADIUS, MENDELEEV TABLE, CALCULATIONS MODEL, MASS OF THE ATOM

Doi: 10.21515/1990-4665-132-051

В настоящее время существуют различные методы расчета атомных радиусов химических элементов Периодической системы Д.И.Менделеева. Для определения атомных радиусов используют рентгенографический и газокинетический методы [1]. В работе [2] рассматривается определение размеров атомов по их инфракрасным спектрам, излучаемым в газообразном состоянии. Также существуют и теоретические модели определения атомных радиусов [3-9]. В настоящей работе предложен новый метод расчета атомных радиусов.

В настоящей работе предложена альтернативная формула для расчетов величин атомных радиусов элементов Периодической системы Д.И.Менделеева.

$$R = \frac{mc^2}{n} * \frac{10}{e^\pi} \quad (1)$$

где: R – радиус атома, м;

m – масса атома, кг;

c – скорость света в вакууме, м/с;

n – порядковый номер элемента;

e^π – постоянная Гельфонда из [10], в размерности [с²/кг*м].

Проверим применимость данной формулы для 103 элементов Периодической таблицы. Расчет относительной погрешности проводился по методике, описанной в [11]. Данные приведены в таблице 1.

Таблица 1.

Расчет атомных радиусов и оценка применимости модели расчетов

Порядковый номер	Символ элемента	Атомная масса [12], а.е.м	Значения атомного радиуса [4,5,13], 10 ⁻¹² м	Рассчитанные значения атомного радиуса, 10 ⁻¹² м	относительная погрешность, δ, %
1	H	1	53	65	19
2	He	4	31	129	76
3*	Li	7	145	149	3
4	Be	9	112	145	23
5	B	11	98	140	30
6	C	12	77	129	40
7	N	14	92	129	29
8	O	16	60	129	54
9	F	19	73	136	46
10	Ne	20	38	130	71
11	Na	23	190	135	29
12	Mg	24	160	131	18
13*	Al	27	143	134	6
14*	Si	28	132	129	2
15*	P	31	128	133	4
16*	S	32	127	129	2
17	Cl	35	99	135	26

18	Ar	40	71	143	50
19	K	39	235	133	43
20	Ca	40	197	129	34
21	Sc	45	162	138	15
22*	Ti	48	147	140	4
23*	V	51	134	143	6
24*	Cr	52	130	140	7
25*	Mn	55	127	142	10
26*	Fe	56	126	139	9
27*	Co	59	125	134	6
28*	Ni	59	124	136	9
29*	Cu	64	128	131	2
30*	Zn	65	138	137	1
31*	Ga	70	141	136	3
32	Ge	73	123	141	13
33*	As	75	139	142	2
34*	Se	79	140	142	2
35	Br	80	94	146	35
36	Kr	84	88	143	39
37	Rb	85	248	139	44
38	Sr	88	215	142	34
39	Y	89	178	141	21
40*	Zr	91	160	141	12
41*	Nb	93	146	140	4
42*	Mo	96	139	140	1
43*	Tc	99	136	139	2
44*	Ru	101	134	141	5
45*	Rh	103	134	142	6
46*	Pd	106	137	142	3
47*	Ag	108	144	141	2
48*	Cd	112	154	143	7
49	In	115	166	142	14
50*	Sn	119	162	145	10
51*	Sb	122	159	145	9
52*	Te	128	160	147	8
53*	I	127	136	148	8
54	Xe	131	108	153	29
55	Cs	133	267	149	44
56	Ba	137	222	151	32
57	La	139	187	151	20
58	Ce	140	181	153	16
59	Pr	141	182	152	16
60	Nd	144	182	151	17
61	Pm	147	183	149	19
62	Sm	150	181	150	17

63	Eu	152	199	151	24
64	Gd	157	179	152	15
65	Tb	159	180	151	16
66	Dy	163	180	154	15
67	Ho	165	179	153	14
68	Er	167	178	154	13
69	Tm	169	177	154	13
70	Yb	173	194	154	20
71	Lu	175	175	154	12
72*	Hf	178	167	155	7
73*	Ta	181	149	155	4
74*	W	184	141	156	9
75	Re	186	137	156	12
76	Os	190	135	156	14
77	Ir	192	136	156	13
78	Pt	195	139	157	12
79*	Au	197	144	157	8
80*	Hg	201	157	157	0
81*	Tl	204	171	157	8
82*	Pb	207	175	158	10
83*	Bi	209	170	159	6
84*	Po	209	176	159	10
85*	At	210	145	159	9
86	Rn	222	214	157	27
87	Fr	223	307	156	49
88	Ra	226	263	163	38
89	Ac	227	188	162	14
90	Th	232	180	162	10
91*	Pa	231	161	161	0
92	U	238	138	163	15
93	Np	237	130	160	19
94*	Pu	244	162	163	1
95*	Am	243	173	161	7
96	Cm	247	299	164	45
97	Bk	247	297	162	46
98	Cf	251	295	163	45
99	Es	252	292	161	45
100	Fm	257	290	162	44
101	Md	258	287	161	44
102	No	259	285	163	43
103	Lr	266	282	162	43

* - элементы, входящие в область допустимых значений относительной погрешности (10 (± 1)%).

Примем допустимым значение относительной погрешности равным 10 (± 1)%. Тогда из данных, приведенных в таблице, можно наблюдать следующее: в область допустимых значений входят р-элементы III-VI периодов, за исключением 17 и 18 группы, а также d-элементы, исключая Sc, Ge, In, Re, Os, Ir. Их можно отнести к области условно-допустимых значений относительной погрешности (до 15%).

Для f-элементов (лантаноидов) значение относительной погрешности не превышает 20%, за исключением Eu и Yb. Для актиноидов в область допустимых значений входит Th, Pa, Pu, Am, в область условно-допустимых – Ac, U, Np. Элементы с порядковыми номерами 96-103 имеют значения относительной погрешности 42-46%, что является недопустимым. Также показано, что использование формулы 1 для элементов 1, 2, 17, 18 групп не корректно (за исключением Li). В связи с этим становится актуальным подбор оптимальных условий расчета атомных радиусов. Данную задачу попробуем решить обратным методом.

Заменим степень постоянной Гельфонда с π на x и найдем значение x :

$$R = \frac{10 * mc^2}{ne^x} \quad (2)$$

$$e^x = \frac{10 * mc^2}{Rn} \quad (3)$$

$$x = \ln\left(\frac{10 * mc^2}{Rn}\right) \quad (4)$$

Используя формулы 2-4 рассчитаем значения коэффициента x для каждого элемента Периодической системы Д.И. Менделеева. Данные по расчету коэффициента x приведены в таблице 2.

Таблица 2.

Расчет коэффициентов x для элементов Периодической таблицы Д.И.Менделеева

Порядк. номер	Символ элемента	Атомн. масса [12], а.е.м	Атомн. радиус [4,5,13], 10^{-12} м	Значение коэф-та χ	Рассч. знач. атомн. рад., с использ. к-та χ , 10^{-12} м	относит. погрешность
1	H	1	53	3,35	53	0,010
2	He	4	31	4,57	31	0,014
3	Li	7	145	3,17	145	0,010
4	Be	9	112	3,40	112	0,010
5	B	11	98	3,49	98	0,011
6	C	12	77	3,66	77	0,011
7	N	14	92	3,48	92	0,010
8	O	16	60	3,91	60	0,012
9	F	19	73	3,76	73	0,011
10	Ne	20	38	4,37	38	0,013
11	Na	23	190	2,80	190	0,008
12	Mg	24	160	2,94	160	0,009
13	Al	27	143	3,08	143	0,009
14	Si	28	132	3,12	132	0,009
15	P	31	128	3,18	128	0,010
16	S	32	127	3,16	127	0,010
17	Cl	35	99	3,45	99	0,010
18	Ar	40	71	3,84	71	0,012
19	K	39	235	2,57	235	0,008
20	Ca	40	197	2,72	197	0,008
21	Sc	45	162	2,98	162	0,009
22	Ti	48	147	3,09	147	0,009
23	V	51	134	3,21	134	0,010
24	Cr	52	130	3,21	130	0,010
25	Mn	55	127	3,25	127	0,010
26	Fe	56	126	3,24	126	0,010
27	Co	59	125	3,26	125	0,010
28	Ni	59	124	3,23	124	0,010
29	Cu	64	128	3,24	128	0,010
30	Zn	65	138	3,16	138	0,010
31	Ga	70	141	3,17	141	0,010

32	Ge	73	123	3,32	123	0,010
33	As	75	139	3,19	139	0,010
34	Se	79	140	3,21	140	0,010
35	Br	80	94	3,59	94	0,011
36	Kr	84	88	3,68	88	0,011
37	Rb	85	248	2,63	248	0,008
38	Sr	88	215	2,77	215	0,008
39	Y	89	178	2,95	178	0,009
40	Zr	91	160	3,06	160	0,009
41	Nb	93	146	3,14	146	0,009
42	Mo	96	139	3,20	139	0,010
43	Tc	99	136	3,23	136	0,010
44	Ru	101	134	3,24	134	0,010
45	Rh	103	134	3,24	134	0,010
46	Pd	106	137	3,23	137	0,010
47	Ag	108	144	3,17	144	0,010
48	Cd	112	154	3,12	154	0,009
49	In	115	166	3,05	166	0,009
50	Sn	119	162	3,08	162	0,009
51	Sb	122	159	3,11	159	0,009
52	Te	128	160	3,13	160	0,009
53	I	127	136	3,27	136	0,010
54	Xe	131	108	3,51	108	0,011
55	Cs	133	267	2,60	267	0,008
56	Ba	137	222	2,80	222	0,008
57	La	139	187	2,97	187	0,009
58	Ce	140	181	2,99	181	0,009
59	Pr	141	182	2,97	182	0,009
60	Nd	144	182	2,98	182	0,009
61	Pm	147	183	2,98	183	0,009
62	Sm	150	181	3,00	181	0,009
63	Eu	152	199	2,90	199	0,009
64	Gd	157	179	3,02	179	0,009
65	Tb	159	180	3,01	180	0,009
66	Dy	163	180	3,02	180	0,009

67	Ho	165	179	3,02	179	0,009
68	Er	167	178	3,03	178	0,009
69	Tm	169	177	3,03	177	0,009
70	Yb	173	194	2,94	194	0,009
71	Lu	175	175	3,04	175	0,009
72	Hf	178	167	3,10	167	0,009
73	Ta	181	149	3,21	149	0,010
74	W	184	141	3,27	141	0,010
75	Re	186	137	3,30	137	0,010
76	Os	190	135	3,32	135	0,010
77	Ir	192	136	3,31	136	0,010
78	Pt	195	139	3,29	139	0,010
79	Au	197	144	3,25	144	0,010
80	Hg	201	157	3,17	157	0,010
81	Tl	204	171	3,09	171	0,009
82	Pb	207	175	3,07	175	0,009
83	Bi	209	170	3,10	170	0,009
84	Po	209	176	3,05	176	0,009
85	At	210	145	3,24	145	0,010
86	Rn	222	214	2,89	214	0,009
87	Fr	223	307	2,52	307	0,008
88	Ra	226	263	2,68	263	0,008
89	Ac	227	188	3,01	188	0,009
90	Th	232	180	3,06	180	0,009
91	Pa	231	161	3,16	161	0,010
92	U	238	138	3,33	138	0,010
93	Np	237	130	3,38	130	0,010
94	Pu	244	162	3,17	162	0,010
95	Am	243	173	3,09	173	0,009
96	Cm	247	299	2,55	299	0,008
97	Bk	247	297	2,55	297	0,008
98	Cf	251	295	2,56	295	0,008
99	Es	252	292	2,57	292	0,008
100	Fm	257	290	2,58	290	0,008
101	Md	258	287	2,59	287	0,008

102	No	259	285	2,59	285	0,008
103	Lr	266	282	2,61	282	0,008

Таким образом, удалось снизить относительную погрешность расчетов, однако остается неизвестным зависимость коэффициента x и способы его выражения через другие характеристики атома, что требует дополнительных исследований данного вопроса.

Оценим изменение коэффициента x в Периодической таблице Д.И.Менделеева. Для этого построим график зависимости $x=f(n)$. Данные приведены на рисунке 1.



Рисунок 1 – Зависимость значения коэффициента x уравнения 2 от атомного номера элемента.

Зависимость, представленная на рисунке 1, по форме напоминает зависимость энергии ионизации (I) от атомного номера, представленная в работах [14, 15], а также, зависимость R-функции от заряда ядра [16, 17], что, вероятно, связано с тем, что коэффициент x связан с данными характеристиками атома.

Авторы выражают благодарность к.т.н., д.э.н., профессору Луценко Е.В. за ценные рекомендации в ходе работы над публикацией.

Выводы:

Предложен альтернативный метод расчета значений атомных радиусов, учитывающий массу атома и его атомный номер. Найдены оптимальные условия расчета по предложенной модели.

Показано, что кривая зависимости значения поправочного коэффициента x от атомного номера элемента по форме совпадает с зависимостью энергии ионизации от зарядового числа, а также, с зависимостью R-функции от заряда ядра.

Литература:

1. Зефиоров Ю.В., Зоркий П.М. Ван-дер-ваальсовы радиусы и их применение в химии // Успехи химии. 1989. Т.58, вып. 5. С.713-746.
2. Серков А. Т., Радишевский М. Б., Серков А. А. Гипотезы-2 / Москва:НИЦ "Углекимволокно", 2016. 363 с.
3. Нигматов Х., Турсунбаев Б.Х. Методика расчета радиуса атома водорода и других элементов Таблицы Менделеева // Инновации в науке: научный журнал. № 8(69). Новосибирск. Изд. АНС «СибАК», 2017. С. 17-19.
4. Clementi E. Atomic Screening Constants from SCF Functions. II. Atoms with 37 to 86 Electrons // Journal of Chemical Physics, 1967. V.47 (4). P.1300–1307.
5. Bagnall K.W. Recent advances in actinide and lanthanide chemistry, in Fields, PR & Moeller, T, Advances in chemistry, Lanthanide/Actinide chemistry // American Chemical Society, 1967. Vol. 71. P.1–12.
6. 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>
7. Pershina V. Electronic structure and chemical properties of superheavy elements // Russ. Chem. Rev. V.78. P.1153-1171
8. Johnson E., Fricke B., Jacob T., Dong C.Z., Fritzsche S., Pershina V. Ionization potentials and radii of neutral and ionized species of elements 107 bohrium and 108 hassium from extended multiconfiguration Dirac–Fock calculations // Journal of Chemical Physics. V.116. №5. P. 1862-1868.
9. Desclaux J.P. Relativistic Dirac-Fock expectation values for atoms with $Z = 1$ to $Z = 120$ // Atomic data and nuclear data tables. 1973. V. 12, P. 311-406
10. Borwein J.M., Bailey D.H. Mathematics by Experiment: Plausible Reasoning in the 21st Century // Wellesley, MA: AK Peters, 2003. P. 137.
11. Ефимова М.Р. Общая теория статистики // М.: ИНФРА. 1996. 416 с.
12. Wieser M.E. Atomic weights of the elements 2011 (IUPAC Technical Report) // Pure and Applied Chemistry, 2013. V. 85 (5). P. 1047—1078.
13. Slater J.C.. Atomic Radii in Crystals // Journal of Chemical Physics, 1964. V.41 (10). P.3199–3205.
14. Ахметов Н. С. Актуальные вопросы курса неорганической химии // М.:Просвещение, 1991. 224 с.
15. Martin W.C., Musgrove A., Kotochigova S., Sansonetti J.E. (2011), Ground Levels and Ionization Energies for the Neutral Atoms (version 1.3). National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD. [Online] Available: <http://physics.nist.gov/IonEnergy>.
16. Луценко Е.В. Универсальный информационный вариационный принцип развития систем / Е.В. Луценко // Политематический сетевой электронный научный

журнал Кубанского государственного аграрного университета (Научный журнал КубГАУ) [Электронный ресурс]. – Краснодар: КубГАУ, 2008. – №07(041). С. 117 – 193. – Режим доступа: <http://ej.kubagro.ru/2008/07/pdf/10.pdf>.

17. Вяткин В.Б. Информационно-синергетический анализ электронных систем атомов химических элементов. Часть 1. Структурная организация электронных систем в плоскости подболочек / В.Б. Вяткин // Политематический сетевой электронный научный журнал Кубанского государственного аграрного университета (Научный журнал КубГАУ) [Электронный ресурс]. – Краснодар: КубГАУ. 2009. - № 48 (4). С. 1-21. - Режим доступа: <http://ej.kubagro.ru/2009/04/pdf/03.pdf>.

References

1. Zefirov Ju.V., Zorkij P.M. Van-der-vaal'sovy radiusy i ih primeneniye v himii // Uspehi himii. 1989. T.58, vyp. 5. S.713-746.
2. Serkov A. T., Radishevskij M. B., Serkov A. A. Gipotezy-2 / Moskva: NIC "Uglehimvolokno", 2016. 363 s.
3. Nigmatov H., Tursunbaev B.H. Metodika rascheta radiusa atoma vodoroda i drugih jelementov Tablicy Mendeleeva // Innovacii v nauke: nauchnyj zhurnal. № 8(69). Novosibirsk. Izd. ANS «SibAK», 2017. S. 17-19.
4. Clementi E. Atomic Screening Constants from SCF Functions. II. Atoms with 37 to 86 Electrons // Journal of Chemical Physics, 1967. V.47 (4). P.1300–1307.
5. Bagnall K.W. Recent advances in actinide and lanthanide chemistry, in Fields, PR & Moeller, T, Advances in chemistry, Lanthanide/Actinide chemistry // American Chemical Society, 1967. Vol. 71. P.1–12.
6. Kazachenko A.S. Razrabotka novej modeli raschetov znachenij atomnyh radiusov / Kazachenko A.S., Shilov P.N. // Politematicheskij setevoy jelektronnyj nauchnyj zhurnal Kubanskogo gosudarstvennogo agrarnogo universiteta (Nauchnyj zhurnal KubGAU) [Jelektronnyj resurs]. – Краснодар: KubGAU, 2017. – №07(131). – Rezhim dostupa: <http://ej.kubagro.ru/2017/07/pdf/47.pdf>
7. Pershina V. Electronic structure and chemical properties of superheavy elements // Russ. Chem. Rev. V.78. P.1153-1171
8. Johnson E., Fricke B., Jacob T., Dong C.Z., Fritzsche S., Pershina V. Ionization potentials and radii of neutral and ionized species of elements 107 bohrium and 108 hassium from extended multiconfiguration Dirac–Fock calculations // Journal of Chemical Physics. V.116. №5. P. 1862-1868.
9. Desclaux J.P. Relativistic Dirac-Fock expectation values for atoms with $Z = 1$ to $Z = 120$ // Atomic data and nuclear data tables. 1973. V. 12, P. 311-406
10. Borwein J.M., Bailey D.H. Mathematics by Experiment: Plausible Reasoning in the 21st Century // Wellesley, MA: AK Peters, 2003. P. 137.
11. Efimova M.R. Obshhaja teorija statistiki // M.: INFRA. 1996. 416 c.
12. Wieser M.E. Atomic weights of the elements 2011 (IUPAC Technical Report) // Pure and Applied Chemistry, 2013. V. 85 (5). P. 1047—1078.
13. Slater J.C.. Atomic Radii in Crystals // Journal of Chemical Physics, 1964. V.41 (10). P.3199–3205.
14. Ahmetov N. S. Aktual'nye voprosy kursa neorganicheskoy himii // M.:Prosveshhenie, 1991. 224 s.
15. Martin W.C., Musgrove A., Kotochigova S., Sansonetti J.E. (2011), Ground Levels and Ionization Energies for the Neutral Atoms (version 1.3). National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD. [Online] Available: <http://physics.nist.gov/IonEnergy>.

16. Lucenko E.V. Universal'nyj informacionnyj variacionnyj princip razvitija sistem / E.V. Lucenko // Politematicheskij setевой jelektronnyj nauchnyj zhurnal Kubanskogo gosudarstvennogo agrarnogo universiteta (Nauchnyj zhurnal KubGAU) [Jelektronnyj resurs]. – Krasnodar: KubGAU, 2008. – №07(041). S. 117 – 193. – Rezhim dostupa: : <http://ej.kubagro.ru/2008/07/pdf/10.pdf>.

17. Vjatin V.B. Informacionno-sinergeticheskij analiz jelektronnyh sistem atomov himicheskix jelementov. Chast' 1. Strukturnaja organizacija jelektronnyh sistem v ploskosti podobolochek / V.B. Vjatin // Politematicheskij setевой jelektronnyj nauchnyj zhurnal Kubanskogo gosudarstvennogo agrarnogo universiteta (Nauchnyj zhurnal KubGAU) [Jelektronnyj resurs]. – Krasnodar: KubGAU. 2009. - № 48 (4). S. 1-21. - Rezhim dostupa: <http://ej.kubagro.ru/2009/04/pdf/03.pdf>.