

Ермеков С.Р.,

докторант PhD

докторант кафедры Химическая технология неорганических веществ

Южно-Казахстанский государственный университет им. М. Ауэзова

Казахстан, г. Шымкент

Бестереков У.,

доктор технических наук, профессор

профессор кафедры Химическая технология неорганических веществ

Южно-Казахстанский государственный университет им. М. Ауэзова

Казахстан, г. Шымкент

Петропавловский И.А.,

доктор технических наук, профессор

профессор кафедры Технология неорганических веществ и

электрохимических процессов

Российский химико-технологический университет им. Д. Менделеева

Россия, г. Москва

НОВЫЕ СВЕДЕНИЯ О РАДИУСАХ ИОНОВ ХИМИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ

Аннотация: На сегодня известно достаточно большой набор фактологических сведений о радиусах ионов химических элементов. В силу того, что они представляют собой результаты исследований, выполненных с использованием отличающихся по физико-химической сущности методов и методологий, по принципу работы измерительные технические средства, включая наиболее современные, для одних и тех ионов зачастую не совпадают численно, что в принципе не допустимо.

В результате проведенных вычислительных исследований получены новейшие сведения о радиусах ионов практически всех химических элементов периодической системы.

Ключевые слова: *радиус, иона, электрон, электронная структура,*

Abstract: *Today, a fairly large set of factual information about the radii of the ions of chemical elements is known. Due to the fact that they represent the results of studies performed using methods and methodologies differing in the physico-chemical nature, the measuring technical means, including the most modern, for the same ions often do not coincide numerically, which is in principle not acceptabl.*

As a result of computational research, the latest information on the radii of ions of almost all chemical elements of the periodic system has been obtained.

Keywords: *radius, ion, electron, electronic structure.*

На сегодня накоплено достаточно большое множество фактологических результатов о диаметрах ионов отдельных элементов. Эти результаты, полученные с использованием разных подходов и методологий, по численным значениям для отдельных ионов существенно отличаются. Вместе с тем, в силу отсутствия на сегодня надежных унифицированных способов их переоценки и отбора наиболее достоверных значений, в мировой практике они все еще продолжают находить применение в качестве базовых справочных данных [1-4]. Анализ современных литературных сведений об элементарных материальных частицах - ионах [5-12] свидетельствует о том, что для оценки и определения радиусов ионов элементов используется весьма большое количество измерительных, физико-химических и иных способов определения их радиусов [13-17]. Сравнительно мало проведено теоретических исследований, позволяющих надёжно и с достаточной достоверностью определять ионные радиусы. [18,19].

На наш взгляд, наиболее достоверные и в достаточной степени точные данные по радиусам ионов могут быть получены предлагаемым в настоящей

работе вычислительным способом. Этот способ полностью исключает необходимость использования измерительных технических средств – рефрактометров, ионизаторов, спектрометров, рентгенометров, волномеров, поляризаторов и других [13-17], которые, независимо от степени их совершенства, в экспериментальных условиях в той или иной степени выводят ионы исследуемых объектов из стабильного состояния, что приводит к искажениям и существенному разбросу значений измеряемых ионных радиусов.

Принципиальное отличие проведенных вычислительных экспериментов от известных на сегодня приемов и методов оценки радиусов ионов заключается в том, что новый подход позволяет вычислять радиусы ионов, относящиеся к их стабильным состояниям. Концептуальные методологические основы вычислительных теоретических исследований разработаны на основе современных постулатов квантовой механики и атомно – молекулярной физики полагающих, что главными типами взаимодействий между электронами и ядром в ионе химического элемента являются электростатические и центробежные [20-22]. При этом если допустить, что в стабильном состоянии любого иона, электростатическая сила притяжения электрона к ядру иона равна сумме силы отталкивания электронов друг от друга и центробежной силы, создаваемой в результате кулоновской силы взаимодействия электрона и ядра иона, открывается принципиально новая возможность получения достоверной информации о размерах ионов на основе их электронных структур.

На основе анализа известных данных об электронной структуре элементов периодической системы, а также с учетом чисел протонов и электронов в ионе элемента, радиус которого вычисляется, выявлены закономерности изменений значений ионных коэффициентов K_1 и K_2 для ионов всех химических элементов периодической системы, установлены их численные значения (таблица 1)

Таблица 1– Значения ионных коэффициентов ионов химических элементов

№	Химический элемент	Электронная структура химического элемента	Значения коэффициента K_1	Значения коэффициента K_2
1.	Водород	$1S^1$	0,375	
2.	Гелий	$1S^2$	3	
3.	Литий	$1S^2,2S^1$	2,5	
4.	Бериллий	$1S^2,2S^2$	2	1,33
5.	Бор	$1S^2,2S^2,2P^1$	3	1,25
6.	Углерод	$1S^2,2S^2,2P^2$	4	1,2
7.	Азот	$1S^2,2S^2,2P^3$	5	1,16
8.	Кислород	$1S^2,2S^2,2P^4$	3	1,285
9.	Фтор	$1S^2,2S^2,2P^5$	3	1,11
10.	Неон	$1S^2,2S^2,2P^6$	8	
11.	Натрий	$1S^2,2S^2,2P^6,3S^1$	5,5	
12.	Магний	$1S^2,2S^2,2P^6,3S^2$	1	1,2
13.	Алюминий	$1S^2,2S^2,2P^6,3S^2,3P^1$	1,25	1,3
14.	Кремний	$1S^2,2S^2,2P^6,3S^2,3P^2$	1,5	1,4
15.	Фосфор	$1S^2,2S^2,2P^6,3S^2,3P^3$	1,75	1,5
16.	Сера	$1S^2,2S^2,2P^6,3S^2,3P^4$	5	1,125
17.	Хлор	$1S^2,2S^2,2P^6,3S^2,3P^5$	9	1,062
18.	Аргон	$1S^2,2S^2,2P^6,3S^2,3P^6$	10	1,05
19.	Калий	$1S^2,2S^2,2P^6,3S^2,3P^6,4S^1$	7,5	
20.	Кальций	$1S^2,2S^2,2P^6,3S^2,3P^6,4S^2$	6	1,05
21.	Скандий	$1S^2,2S^2,2P^6,3S^2,3P^6,3d^1,4S^2$	7	1,05
22.	Титан	$1S^2,2S^2,2P^6,3S^2,3P^6,3d^2,4S^2$	8	1,047
23.	Ванадий	$1S^2,2S^2,2P^6,3S^2,3P^6,3d^3,4S^2$	9	1,045
24.	Хром	$1S^2,2S^2,2P^6,3S^2,3P^6,3d^4,4S^2$	10	1,043
25.	Марганец	$1S^2,2S^2,2P^6,3S^2,3P^6,3d^5,4S^2$	11	1,041
26.	Железо	$1S^2,2S^2,2P^6,3S^2,3P^6,3d^6,4S^2$	12	1,04
27.	Кобальт	$1S^2,2S^2,2P^6,3S^2,3P^6,3d^7,4S^2$	13	1,038
28.	Никель	$1S^2,2S^2,2P^6,3S^2,3P^6,3d^8,4S^2$	14	1,037
29.	Медь	$1S^2,2S^2,2P^6,3S^2,3P^6,3d^{10},4S^1$	11,5	1,035
30.	Цинк	$1S^2,2S^2,2P^6,3S^2,3P^6,3d^{10},4S^2$	12	1,034
31.	Галлий	$1S^2,2S^2,2P^6,3S^2,3P^6,3d^{10},4S^2,4P^1$	13	1,033
32.	Германий	$1S^2,2S^2,2P^6,3S^2,3P^6,3d^{10},4S^2,4P^2$	14	1,032
33.	Мышьяк	$1S^2,2S^2,2P^6,3S^2,3P^6,3d^{10},4S^2,4P^3$	15	1,031
34.	Селен	$1S^2,2S^2,2P^6,3S^2,3P^6,3d^{10},4S^2,4P^4$	16	1,03
35.	Бром	$1S^2,2S^2,2P^6,3S^2,3P^6,3d^{10},4S^2,4P^5$	17	1,029
36.	Криптон	$1S^2,2S^2,2P^6,3S^2,3P^6,3d^{10},4S^2,4P^6$	18	1,028
37.	Рубидий	$1S^2,2S^2,2P^6,3S^2,3P^6,3d^{10},4S^2,4P^6,5S^1$	13,5	
38.	Стронций	$1S^2,2S^2,2P^6,3S^2,3P^6,3d^{10},4S^2,4P^6,5S^2$	9	1,027
39.	Иттрий	$1S^2,2S^2,2P^6,3S^2,3P^6,3d^{10},4S^2,4P^6,4d^1,5S^2$	10	1,026

40.	Цирконий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^2, 5S^2$	11	1,025
41.	Ниобий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^4, 5S^1$	12,5	1,025
42.	Молибден	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^5, 5S^1$	1,04	1,024
43.	Технеций	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^5, 5S^2$	1,185	1,023
44.	Рутений	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^7, 5S^1$	1,33	1,023
45.	Родий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^8, 5S^1$	1,475	1,022
46.	Палладий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}$	1,62	1,022
47.	Серебро	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^1$	0,5	1,021
48.	Кадмий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^2$	0,55	1,021
49.	Индий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^2, 5P^1$	0,695	1,02
50.	Олово	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^2, 5P^2$	0,84	1,02
51.	Сурьма	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^2, 5P^3$	0,985	1,02
52.	Теллур	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^2, 5P^4$	1,13	1,02
53.	Йод	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^2, 5P^5$	1,275	1,019
54.	Ксенон	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^2, 5P^6$	1,42	1,018
55.	Цезий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^2, 5P^6, 6S^1$	17,5	
56.	Барий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	0,4	1,018
57.	Лантан	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 5S^2, 5P^6, 5d^1, 6S^2$	0,5	1,017
58.	Церий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^2, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	0,6	1,017
59.	Празеодим	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^3, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	0,7	1,017
60.	Неодим	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^4, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	0,8	1,016
61.	Прометий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^5, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	0,9	1,016
62.	Самарий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^6, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	1	1,016
63.	Европий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^7, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	1,1	1,016
64.	Гадолиний	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^7, 5S^2, 5P^6, 5d^1, 6S^2$	1,2	1,015
65.	Тербий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^9, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	1,3	1,015
66.	Диспрозий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{10}, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	1,4	1,015
67.	Гольмий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{11}, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	1,5	1,015
68.	Эрбий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{12}, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	1,6	1,014
69.	Тулий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{13}, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	1,7	1,014
70.	Иттербий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 6S^2$	1,8	1,014
71.	Лютеций	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^1, 6S^2$	1,9	1,014
72.	Гафний	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^2, 6S^2$	2	1,014
73.	Тантал	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^3, 6S^2$	2,1	1,0138
74.	Вольфрам	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^4, 6S^2$	2,2	1,0136
75.	Рений	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^5, 6S^2$	2,3	1,0135
76.	Осмий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^6, 6S^2$	2,4	1,0135
77.	Иридий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^7, 6S^2$	2,5	1,0135
78.	Платина	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^9, 6S^1$	2,6	1,0129
79.	Золото	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 6S^1$	0,392	1,0128
80.	Ртуть	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 6S^2$	0,492	1,0126
81.	Талий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 6S^2, 6P^1$	0,592	1,0125
82.	Свинец	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 6S^2, 6P^2$	0,692	1,0123
83.	Висмут	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 6S^2, 6P^3$	0,792	1,0121

84.	Полоний	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 6S^2, 6P^4$	0,892	1,012
85.	Астат	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 6S^2, 6P^5$	0,992	1,011
86.	Радон	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 6S^2, 6P^6$	1,092	1,0117
87.	Франций	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 6S^2, 6P^6, 7S^1$	21,5	
88.	Радий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 6S^2, 6P^6, 7S^2$	0,3125	1,035
89.	Актиний	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 6S^2, 6P^6, 6d^1, 7S^2$	0,4375	0,966
90.	Торий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 6S^2, 6P^6, 6d^2, 7S^2$	0,5	1,0107
91.	Протактиний	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 5f^2, 6S^2, 6P^6, 6d^1, 7S^2$	0,5625	1,034
92.	Уран	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 5f^3, 6S^2, 6P^6, 6d^1, 7S^2$	0,6875	1,033
93.	Нептуний	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 5f^4, 6S^2, 6P^6, 6d^1, 7S^2$	0,75	1,033
94.	Плутоний	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 5f^5, 6S^2, 6P^6, 7S^2$	0,8125	1,032
95.	Америции	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 5f^6, 6S^2, 6P^6, 7S^2$	0,875	1,031
96.	Кюрий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 5f^7, 6S^2, 6P^6, 6d^1, 7S^2$	0,9375	1,03
97.	Берклий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 5f^8, 6S^2, 6P^6, 7S^2$	1	1,029
98.	Калифорний	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 5f^9, 6S^2, 6P^6, 7S^2$	1,0625	1,028
99.	Эйнштейний	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 5f^{10}, 6S^2, 6P^6, 7S^2$	1,125	1,027
100.	Фермий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 5f^{11}, 6S^2, 6P^6, 7S^2$	1,1875	1,026
101.	Менделевий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 5f^{12}, 6S^2, 6P^6, 7S^2$	1,25	1,025
102.	Нобелий	$1S^2, 2S^2, 2P^6, 3S^2, 3P^6, 3d^{10}, 4S^2, 4P^6, 4d^{10}, 4f^{14}, 5S^2, 5P^6, 5d^{10}, 5f^{13}, 6S^2, 6P^6, 7S^2$	1,3125	1,024

Радиус иона $R_{и}$ первого элемента периодической системы химических элементов - водорода определялся по выражениям 1-2:

$$R_{и} = R_{п} + X; \quad (1)$$

$$X = \frac{Zne^2 - K_1 4\pi\epsilon_0 m v^2 \cdot R \text{ протона}}{K_1 4\pi\epsilon_0 m v^2} \quad (2)$$

где: $R_{п}$ – радиус протона водорода = 0,8768 Фм = 0,000008768 Å.

Z – число заряда;

e – заряд электрона, Кл

ϵ_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума, Ф/м

m – масса электрона, кг

n – число протона;

v – скорость вращения электрона по орбите с радиусом R , которая определяется по формуле: $v = \alpha \cdot z \cdot c$;

α – 1/137 – относительная скорость вращения электрона вокруг ядра;

z – число протонов;

c – скорость света, м/с.

K_1 - коэффициент, определяется с учетом характерных особенностей электронных структур химических элементов.

В дальнейшем, в зависимости от того больше или меньше искомое значение ионного радиуса химического элемента по сравнению с радиусом иона предыдущего элемента, вычисления были выполнены с использованием расчетных равенств видов 3,4:

$$R_{\text{иона}} = R_{\text{иона предыдущего элемента}} + X \quad (3)$$

$$R_{\text{иона}} = R_{\text{иона предыдущего элемента}} - X \quad (4)$$

где X - поправочный коэффициент, представляющий собой линейную разность радиусов ионов искомого и предыдущего элемента химической системы, значения которого, соответственно, были вычислены по выражениям 5,6:

$$X = \frac{Zne^2 - K_1 4\pi\epsilon_0 m v^2 \cdot R_{\text{иона предыдущего элемента}}}{K_1 4\pi\epsilon_0 m v^2} \quad (5)$$

$$X = \frac{K_1 4\pi\epsilon_0 m v^2 R_{\text{иона предыдущего элемента}} - K_2 e^2}{K_1 4\pi\epsilon_0 m v^2} \quad (6)$$

где K_2 – коэффициент, определяется с учетом чисел протонов и электронов в ионе химического элемента.

Результаты вычислений радиусов ионов 102 химических элементов периодической системы приведены в таблице 2, из которой видно, что найденные расчетные значения радиусов ионов для большей части химических элементов, укладываются в рамки известных данных об их радиусах, установленных различными методами ранее.

Таблица 2– Значения радиусов ионов химических элементов

№	Химический элемент	Заряд иона	Расчетный радиус иона, Å	Пределы изменений радиусов ионов, Å [литературный источник]
1.	Водород	H ⁺¹	1,445	1,36÷1,55[4]
2.	Гелий	He ⁺⁸	0,035	
3.	Литий	Li ⁺¹	0,799	0,6÷0,75[4,23]
4.	Бериллий	Be ⁺²	0,473	0,31÷0,59[4,24]
5.	Бор	B ⁺³	0,333	0,15÷0,41[4,24]
6.	Углерод	C ⁺⁴	0,213	0,06÷0,3[4,24]
7.	Азот	N ⁺³	0,154	0,3[24]
	Азот	N ⁻³	1,493	1,32÷1,485[4,24]
8.	Кислород	O ⁺⁶	0,121	0,1÷0,22[4]
	Кислород	O ⁻²	1,706	1,36÷1,76[4]
9.	Фтор	F ⁺⁷	0,099	0,19÷0,22[4,24]
	Фтор	F ⁻¹	1,279	1,14÷1,36[4,23,24]
10.	Неон	Ne ⁺⁸	0,084	
11.	Натрий	Na ⁺¹	1,036	0,95÷1,53[4,23,24]
12.	Магний	Mg ⁺²	0,818	0,65÷1,1 [4,23,24]
13.	Алюминий	Al ⁺³	0,575	0,5÷0,72[4,24]
14.	Кремний	Si ⁺⁴	0,445	0,4÷1,36[4,24]
15.	Фосфор	P ⁺⁵	0,381	0,3÷0,66[4]
16.	Сера	S ⁺⁶	0,316	0,26÷0,43[24]
	Сера	S ⁻²	1,89	1,70÷2,19[4,24]
17.	Хлор	Cl ⁺⁷	0,272	0,22÷0,49[4,24]
	Хлор	Cl ⁻¹	1,797	1,67÷1,81[4,23,24]
18.	Аргон	Ar ⁺⁸	0,236	
19.	Калий	K ⁺¹	1,369	1,33÷1,78[4,23,24]
20.	Кальций	Ca ⁺²	1,119	0,99÷1,48[4,23,24]
21.	Скандий	Sc ⁺³	0,868	0,88÷1,01[24]
22.	Титан	Ti ⁺⁴	0,707	0,56÷0,83[4,24]
23.	Ванадий	V ⁺⁵	0,596	0,49÷0,68[24]
24.	Хром	Cr ⁺⁶	0,515	0,41÷0,81[4,24]
25.	Марганец	Mn ⁺⁷	0,453	0,39÷0,75[4,24]
26.	Железо	Fe ⁺³	0,405	0,63÷0,92[4,24]
27.	Кобальт	Co ⁺⁶	0,365	0,35÷1,04[4,24]
28.	Никель	Ni ⁺²	0,334	0,69÷0,83[4,24]

29.	Медь	Cu ⁺¹	0,985	0,47÷0,98[4,24]
30.	Цинк	Zn ⁺²	0,782	0,56÷1,10[4,24]
31.	Галлий	Ga ⁺³	0,648	0,6÷0,71[24]
32.	Германий	Ge ⁺⁴	0,553	0,53÷0,67[24]
33.	Мышьяк	As ⁺⁵	0,482	0,46÷0,72[4,24]
34.	Селен	Se ⁺³	0,420	1,15÷1,4[24]
35.	Бром	Br ⁺⁷	0,383	0,39÷0,62[4,24]
	Бром	Br ⁻¹	1,847	1,82÷1,97[4,23,24]
36.	Криптон	Kr ⁺⁸	0,348	
37.	Рубидий	Rb ⁺¹	1,483	1,47÷1,97[4,24]
38.	Стронций	Sr ⁺²	1,190	1,32÷1,58[24]
39.	Иттрий	Y ⁺³	0,904	1,04[24]
40.	Цирконий	Zr ⁺⁴	0,729	0,73÷1,03[24]
41.	Ниобий	Nb ⁺⁵	0,610	0,62÷0,82[24]
42.	Молибден	Mo ⁺⁶	0,525	0,55÷0,93[4,24]
43.	Технеций	Tc ⁺⁷	0,460	0,51÷0,7[24]
44.	Рутений	Ru ⁺⁸	0,410	0,5[24]
45.	Родий	Rh ⁺⁵	0,369	0,46[24]
46.	Палладий	Pd ⁺⁴	0,336	0,64÷0,65[4]
47.	Серебро	Ag ⁺¹	1,088	1,01÷1,26[4,24]
48.	Кадмий	Cd ⁺²	0,989	0,97÷1,24[4,24]
49.	Индий	In ⁺³	0,783	0,76÷1,06[24]
50.	Олово	Sn ⁺⁴	0,647	0,65÷0,96[4,24]
51.	Сурьма	Sb ⁺⁵	0,552	0,26÷0,89[4,24]
52.	Теллур	Te ⁺⁶	0,481	0,57÷1,18[24]
53.	Йод	I ⁺⁷	0,426	0,5÷0,77[4,24]
	Йод	I ⁻¹	2,091	2,06÷2,23[4,24]
54.	Ксенон	Xe ⁺⁸	0,382	0,54÷0,62[24]
55.	Цезий	Cs ⁺¹	1,675	1,65÷2,02[4,24]
56.	Барий	Ba ⁺²	1,357	1,34÷1,75[4,24]
57.	Лантан	La ⁺³	1,084	1,04÷1,51[4,24]
58.	Церий	Ce ⁺³	0,905	1,15÷1,48[24]
59.	Празеодим	Pr ⁺³	0,775	1,13÷1,31[24]
60.	Неодим	Nd ⁺³	0,677	1,12÷1,30[24]
61.	Прометий	Pm ⁺³	0,602	1,11÷1,28[24]
62.	Самарий	Sm ⁺³	0,542	1,09÷1,38[24]

63.	Европий	Eu ⁺²	0,492	1,03÷1,49[24]
64.	Гадолиний	Gd ⁺³	0,451	1,07÷1,24[24]
65.	Тербий	Tb ⁺³	0,416	1,06÷1,23[24]
66.	Диспрозий	Dy ⁺¹	0,386	0,03÷1,33[24]
67.	Гольмий	Ho ⁺³	0,361	1,04÷1,26[24]
68.	Эрбий	Er ⁺³	0,338	1,03÷1,14[24]
69.	Тулий	Tm ⁺³	0,318	1,02÷1,19[24]
70.	Иттербий	Yb ⁺³	0,300	1,00[24]
71.	Лютеций	Lu ⁺³	0,284	1,00÷1,17[24]
72.	Гафний	Hf ⁺⁴	0,270	0,72÷0,97[24]
73.	Тантал	Ta ⁺⁵	0,257	0,78÷0,88[24]
74.	Вольфрам	W ⁺⁶	0,245	0,56÷0,74[24]
75.	Рений	Re ⁺⁷	0,235	0,52÷0,67[24]
76.	Осмий	Os ⁺⁸	0,225	0,53[24]
77.	Иридий	Ir ⁺⁵	0,216	0,71÷0,82[24]
78.	Платина	Pt ⁺⁴	0,207	0,55÷1,1[4,24]
79.	Золото	Au ⁺¹	1,378	0,71÷1,51[4,24]
80.	Ртуть	Hg ⁺²	1,097	0,66÷1,28[4,24]
81.	Талий	Tl ⁺³	0,912	0,89÷1,12[24]
82.	Свинец	Pb ⁺⁴	0,780	0,7÷0,86[4]
83.	Висмут	Bi ⁺⁵	0,681	0,74÷1,31[4,24]
84.	Полоний	Po ⁺⁶	0,605	0,61[24]
85.	Астат	At ⁺⁷	0,543	0,76[24]
86.	Радон	Rn ⁺⁸	0,494	
87.	Франций	Fr ⁺¹	2,157	1,94[24]
88.	Радий	Ra ⁺²	1,766	1,62÷1,84[24]
89.	Актиний	Ac ⁺³	1,177	0,126[24]
90.	Торий	Th ⁺⁴	1,077	1,08÷1,35[24]
91.	Протактиний	Pa ⁺⁵	0,980	0,92÷1,09[24]
92.	Уран	U ⁺⁶	0,801	0,59÷1,00[24]
93.	Нептуний	Np ⁺⁵	0,734	0,89[24]
94.	Плутоний	Pu ⁺³	0,677	1,14[24]
95.	Америции	Am ⁺³	0,628	0,99÷1,4 [24]
96.	Кюрий	Cm ⁺³	0,586	0,99÷1,1[24]
97.	Берклий	Bk ⁺³	0,548	0,9÷1,1[24]
98.	Калифорний	Cf ⁺⁴	0,516	0,96 [24]

99.	Эйнштейний	Es ⁺³	0,486	
100.	Фермий	Fm ⁺³	0,460	
101.	Менделевий	Md ⁺³	0,437	
102.	Нобелий	No ⁺³	0,416	

Наблюдаемые же для ряда химических элементов в той или иной мере заметные отличия в расчетных значениях радиусов их ионов от известных данных в основном в меньшую сторону следует, вероятно, отнести к разнообразию и погрешности применявшихся методик в ранних цитируемых исследованиях. Это, в частности, относится к радиусам ионов таких элементов: азот (N⁺³), мышьяк, селен, родий, палладий; далее от цезия до иридия; полоний, аstat, актиний и от нептуния до калифорния, в ряду которых общеизвестная закономерность последовательного снижения радиусов ионов в пределах отдельных групп элементов, к сожалению, не соблюдается. Более того, известные сведения о радиусах указанных элементов, приведенные лишь в единичных источниках, не могут считаться достоверными из-за значительно завышенных радиусов ионов этих элементов. Для некоторых элементов литературных даны не обнаружено.

Таким образом, настоящая работа предлагает принципиально новую возможность получения достоверной информации о размерах ионов на основе их электронных структур. Получены оригинальные данные по радиусам ионов практически всех известных химических элементов, в основном укладывающиеся в рамки известных сведений об их радиусах. При этом, важно отметить, что новые расчетные значения ионных радиусов возрастают или убывают от элемента к элементу как в пределах всех групп, подгрупп, так и каждого периода и ряда периодической системы химических элементов, вполне соответствуя общепризнанным на сегодня теоретическим принципам современной химической науки.

ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ ИСТОЧНИКИ

1. Гороновский И.Т., Назаренко Ю.П., Некряч Е.Ф. Краткий справочник по химии. Пятое издание.- Киев: Наукова Думка, 1987.-831с.
2. Волков А.И., Жарский И.М. Большой химический справочник. – Минск: Современная школа, 2005.-608с.
3. Физические величины. Справочник. Под редакцией Григорьева И.С., Мейлихова Е.З. – М.: Энергоатомиздат,1991.-1232с.
4. Краткий справочник физико-химических величин. Под редакцией Равделя А.А., Пономаревой А.М. – Л.: Химия, 1983.-232с
5. Дикерсон Р., Грей Г., Хейт Дж. Основные законы химии. В 2-х томах. Пер. с англ. – М.: Мир, 1982.-652с.
6. Карапетьянц М.Х., Дракин С.И. Общая и неорганическая химия. – М.: Химия, 2015.-592с.
7. Горбунов А.М., Гуров А.А., Филиппов Г.Г., Шаповал В.Н. Теоретические основы общей химии. – М.: Изд-во МГУ, 2001.-720с.
8. Гельфман М.И., Юстратов В.П. Химия.- СПб.: Лань, 2000.-480с.
9. Павлов Н.Н. Общая и неорганическая химия.- М.: Дрофа, 2002.-490с.
10. Сурнин С.П. Структура атома. – М., 2005. – 88 с.
11. Хаусрофт К.Е., Современный курс общей химии. – М.: Мир, 2002.-540с.
12. Чупахин А.П. Общая химия. Химическая связь и строение вещества: Учебное пособие/ Новосибирский гос.у-т. - Новосибирск, 2003.-168с.
13. Полинг Л., Полинг П. Химия. – М.: Мир, 1978.-686с.
14. Угай Я.А. Общая и неорганическая химия. – М.: Высшая школа, 2000.-524с.
15. Бацанов С.С. Структурная химия. – М.: Мир, 2000.-292с.
16. Потапов А.А. Деформационная поляризация. – Новосибирск: Наука,2004.-511с.
17. Иоффе Б.В. Рефрактометрические методы химии. – Л.: Химия, 1983.-382с.
18. Потапов А.А. (RU) Способ измерения радиуса и энергии связи атомов и ионов. Заявка № 2007107014/28, 26.02.2007.

19. Родченко М.Б., Александров Б.Л. (RU) Способ оценки радиусов атомов химических элементов в различном энергетическом состоянии. Патент № 2273058
20. Физическая химия. Под редакцией Краснова К.С. – М.: Высшая школа, 2001.- 512с.
21. Грибов Л.А., Муштакова С.П. Квантовая химия. – М.: Гардарики, 1999.-392с
22. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория поля.- М.: Наука, 1988.-509с.
23. К. Дей, Д. Селбин Теоретическая неорганическая химия. - М.: Химия, 1976.- 568с.
24. Дж. Хьюи, Неорганическая химия. - М.: Химия, 1987.-696с.