

ӘОЖ 544.38
ГТАМР 31.17.15

АТОМДАР, ИОНДАРДЫҢ РАДИУСТАРЫНЫҢ МӘНДЕРІ ЖӘНЕ ОЛАРДЫҢ ӨЗГЕРУ ЗАҢДЫЛЫҚТАРЫ ТУРАЛЫ

У. БЕСТЕРЕКОВ¹, С.Р. ЕРМЕКОВ¹

(¹М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан мемлекеттік университеті,
Шымкент, Қазақстан Республикасы)
E-mail: sajat_78@mail.ru

Химиялық технология саласында сулы-тұзды жүйелер арқылы өнімдер өндіріледі. Сулы-тұзды жүйелерде минералды заттардың зарядтық бөлшектері иондар түрінде болады. Ғылыми-ілімдік химия саласында қазіргі кезде қол жеткен нәтижелерді талдаулар көрсеткендей, осындай иондық бөлшектердің және олардың материалдық негізі болып табылатын атомдардың радиустары туралы шынайылығы жоғары, толықтама ғылыми дәйектелген мәліметтер жоқ. Мақалада атомдар мен иондардың шынайы радиустары туралы мәліметтер келтірілген. Зерттеу жұмыстарын жүргізу барысында белгілі мәліметтерге жақын және де соңғылардың периодтық жүйе шеңберінде өзгеру заңдылықтарын сақтайтын, бірақ өзіндік сандық нәтижелері бар мәндер алынды.

Негізгі сөздер: ион, атом, радиус, периодтық жүйе, бөлшектер, заряд, электрон, физика-химиялық қасиеті.

О ЗНАЧЕНИЯХ РАДИУСОВ АТОМОВ, ИОНОВ И ЗАКОНОМЕРНОСТЯХ ИХ ИЗМЕНЕНИЯ

У. БЕСТЕРЕКОВ¹, С.Р. ЕРМЕКОВ¹

(¹Южно-Казахстанский государственный университет им. М. Ауэзова, Шымкент, Республика Казахстан)
E-mail: sajat_78@mail.ru

В области химической технологии продукция производится с помощью влажно-солевых систем. В водно-солевых системах частицы заряда минерала образуются в форме ионов. Анализ современных результатов в области научной и химической химии показал, что нет достоверных научно обоснованных данных о радиусах таких ионных частиц и их материальной основе. В статье приведены сведения об истинном радиусе атомов и ионов. В ходе исследования получены значения, близкие к известным данным и соответствующие закономерностям изменений в последней периодической системе, но с их собственными численными результатами.

Ключевые слова: ион, атом, радиус, периодическая система, частицы, заряд, электрон, физико-химические свойства.

ON THE VALUES OF RADII OF ATOMS, IONS AND THE REGULARITIES OF THEIR CHANGE

U. BESTEREKOV¹, S.R. ERMEKOV¹

(¹South Kazakhstan State University M. Auezov, Shymkent, Republic of Kazakhstan)
E-mail: sajat_78@mail.ru

In the field of chemical technology, products are produced using wet-salt systems. In water-salt systems, particles of a charge of a mineral are formed in the form of ions. Analysis of current results

in the field of scientific and chemical chemistry showed that there is no reliable scientifically based data on the radii of such ionic particles and their material basis. The article provides information about the true radius of atoms and ions. The study obtained values close to the known data and corresponding to the laws of changes in the last periodic system, but with their own numerical results.

Key words: ion, atom, radius, periodic system, particles. charge, electron, physical and chemical properties.

Kipicne

Химиялық технологияның көптеген салаларында сулы-тұзды жүйелерде орын алатын үрдістер қолданыс табады. Осы кезде бастапқы шикізат ретінде пайдаланылатын минералдық заттар үрдістік жағдайларда элементтік зарядтық бөлшектер – иондар түрінде болып, қажетті өнімдерді қалыптастыруда шешуші роль атқарады. Ғылыми-ілімдік химия саласында қазіргі кезде қол жеткен нәтижелерді [1-5] талдау нәтижесі көрсеткендей, осындай иондық бөлшектердің және олардың материалдық негізі болып табылатын атомдардың радиустары туралы шынайылығы жоғары, толықтама

ғылыми дәйектелген мәліметтер жоқ. Жалпылама белгілі Д. Менделеевтің химиялық элементтердің периодтық жүйесі кестесі шеңберінде радиустары есептік немесе сан алуан физика-химиялық жолдармен анықталған мәліметтерде әр атом әр ион үшін 30 жуық шкалалық мәндер келтіріледі [6-11]. Аталған жағдайға нақты мысал ретінде бүгінде оқу-ғылыми іс-тәжірибелерде кең қолданыста жүрген анықтамалық [12] құрамында иондық және атомдық бөлшектер радиустары туралы Мелвин-Хьюз (МХ), Гольдшмидт (Г), Полинг (П), Ингольд (И), Боки (Б) ізденістері нәтижелерін келтіруге болады (1 кесте).

Кесте1 -Атомдар мен иондардың радиустары

Элементтер	Атом радиусы, $r_a \cdot 10, \text{ нм}$				Ион заряды	Ион радиусы, $r_i \cdot 10, \text{ нм}$				
	М.Х	Г	П	Б		М.Х	Г	П	И	Б
Ag	1,445	1,44	1,53	1,44	+1	1,014	1,13	1,26	1,26	1,13
Al	1,432	1,43	1,26	1,43	+3	0,55	0,57	0,50	0,72	0,57
As	1,248	1,22	1,18	1,48	+5	-	0,46	-	0,71	(0,47)
Au	1,442	1,44	1,50	1,44	+1	-	1,37	-	1,37	(1,37)
B	(0,795)	0,91	0,89	0,91	+3	(0,20)	0,23	0,20	0,35	(0,20)
Ba	2,174	2,17	-	2,21	+2	1,395	1,34	1,35	1,53	1,38
Be	1,113	1,11	1,07	1,13	+2	0,314	0,35	0,31	0,44	0,34
Bi	1,548	1,55	1,46	1,82	+5	-	0,74	-	0,98	(0,74)
Br	1,1415	1,14	1,14	-	+7	-	-	-	0,62	(0,39)
C	0,771	0,77	0,77	0,77	+4	0,195	0,16	0,15	0,29	0,2
Ca	1,974	1,37	-	1,97	+2	1,051	0,99	0,99	0,99	1,04
Cd	1,490	1,48	1,48	1,56	+2	0,99	0,97	-	1,14	0,99
Cl	0,994	0,99	0,99	-	+7	-	-	-	0,49	(0,26)
Co	1,253	1,25	1,25	1,25	+3	0,65	0,63	-	-	0,64
Cr	1,249	1,25	1,25	1,27	+6	-	0,52	-	0,81	0,35
Cs	2,655	2,62	-	2,68	+1	1,678	1,67	1,69	1,69	1,65
Cu	1,278	1,27	1,35	1,28	+2	0,47	0,72	-	0,96	0,80
F	0,709	0,64	0,64	-	+7	-	-	-	0,10	-
Fe	1,241	1,26	-	1,26	+3	0,67	0,64	-	-	0,07
H	0,3707	0,36	0,30	0,46	-1	-	1,53	-	2,08	1,36
Hg	1,503	1,50	1,48	1,60	+2	0,66	1,10	-	1,25	1,12
I	1,333	2,20	1,28	-	+7	-	0,50	-	0,77	(0,50)
K	2,272	2,36	-	2,36	+1	1,341	1,33	1,33	1,33	1,33
La	1,870	1,86	-	1,87	+3	1,14	1,14	1,15	1,39	1,04
Li	1,520	1,55	1,34	1,55	+1	0,758	0,68	0,60	0,60	0,68

Зерттеудің нысандары мен әдістері

1-кестеден көрінгендей, кез келген элемент үшін олардың атомдық және иондық радиустары мәндерінде ескерусіз қалдыруға болмайтын үлкен сандық айырмашылықтар бар. Ғылыми жұмыста осындай кемшіліктерді жою мақсатында жүргізілген тың ізденістер нәтижелері келтіріліп отыр. Зерттеу негізінде зарядталған элементтік бөлшектер арасында пайда болатын белгілі тартылу

$$\frac{Zne^2}{4\pi\epsilon_0(R_{\text{алдыңғы элемент атомы}}+X)^2} = \frac{K \cdot m \cdot v^2}{(R_{\text{алдыңғы элемент атомы}}+X)}; \quad (1)$$

1-ші формуладан X-ты табамыз.

$$X = \frac{Zne^2 - K4\pi\epsilon_0 m v^2 \cdot R_{\text{алдыңғы элемент атомы}}}{K4\pi\epsilon_0 m v^2}; \quad (2)$$

Ары қарай элементтің атомы немесе ионы радиусын төмендегідей табамыз:

$$R_{\text{атом}} = R_{\text{алдыңғы элемент атомы}} + X; \quad (3)$$

2-ші нұсқада (3-6) формулалар периодтық жүйедегі әр периодтағы 1-ші және 8-ші топтағы элементтер үшін. Қатар саны өсуімен элементтердің атомы мен

және тебу заңдылықтары және атом құрылысы туралы жалпылама мойындаған заманауи ғылыми мәліметтер пайданылылды. Осы кезде элементтердің атомдары мен иондары радиустарын есептеуде екі түрлі теңдеулер қолданылады. 1-ші нұсқада (1-3) формулалары бойынша элементтер периодтық жүйеде периодтан периодқа көшкендегі элементтер үшін. Олар литий, натрий, калий, рубидий, цезий, франций.

$$\frac{Zne^2}{4\pi\epsilon_0(R_{\text{алдыңғы элемент атомы}}-X)^2} = \frac{K \cdot m \cdot v^2}{(R_{\text{алдыңғы элемент атомы}}-X)}; \quad (4)$$

4-ші формуладан X-ты табамыз.

$$X = \frac{K4\pi\epsilon_0 m v^2 R_{\text{алдыңғы элемент атомы}} - Zne^2}{K4\pi\epsilon_0 m v^2}; \quad (5)$$

Ары қарай элементтің атомы немесе ионы радиусын төмендегідей табамыз:

$$R_{\text{атом}} = R_{\text{алдыңғы элемент атомы}} - X; \quad (6)$$

бұл жерде; ϵ_0 —вакуумның диэлектрлік өткізгіштігі, Ф/м;

e – электрон заряды, Кл;

m – электрон массасы, кг;

z – протон саны;

R – зарядталған бөлшектер арасындағы арақашықтық, Å;

v – радиус орбиталында айналатын электрон жылдамдығы, м/с;

K – элементтердің электрондарының ұяшықтарға орналасу тәртібіне қатысты анықталатын тұрақты шама.

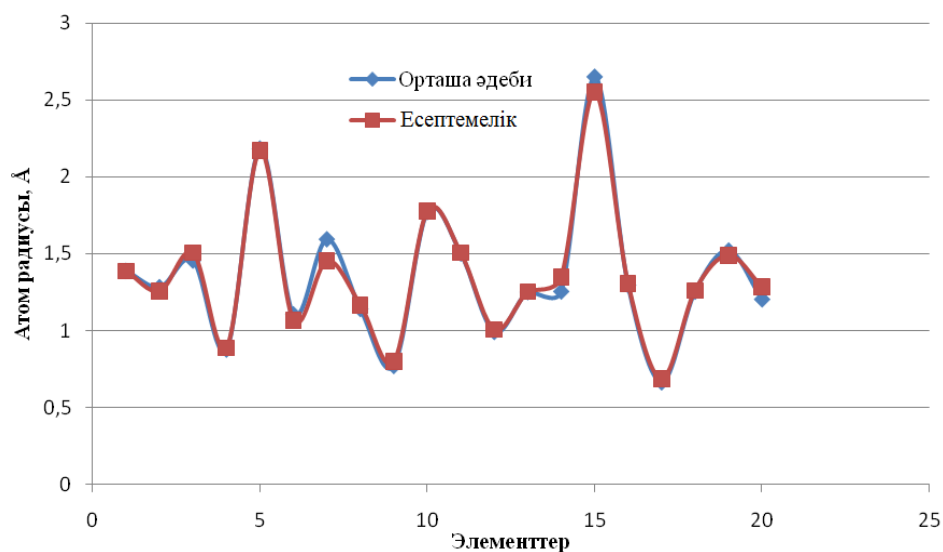
Нәтижелері мен оларды талқылау

Жоғарыда 1 кестеде қарастырылған элементтерге қатысты алынған жаңа есептеулік нәтижелері белгілі мәліметтермен салыстырмалы түрде 2-кестеде, 1,2-суреттерде келтірілген.

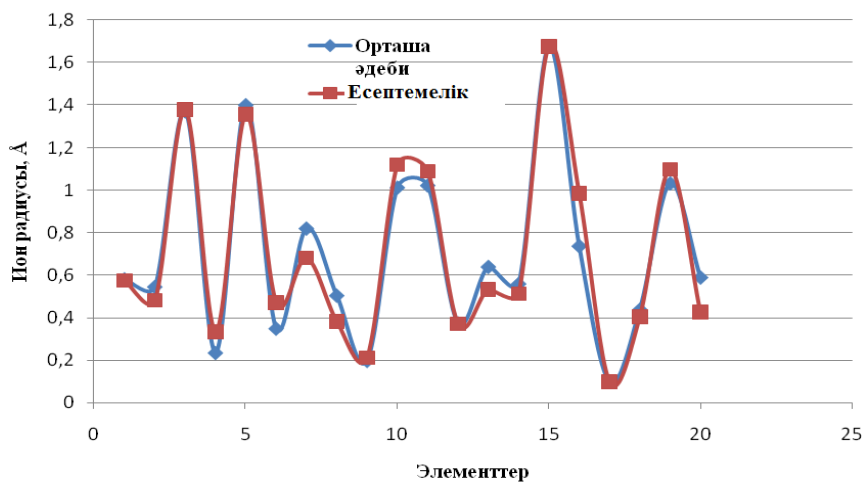
Кесте 2- Атомдар мен иондардың радиустары

Элементтер	Атом радиусы, $r_a \cdot 10, \text{ нм}$						Ион заряды	Ион радиусы, $r_i \cdot 10, \text{ нм}$						
	М.Х	Г	П	Б	Орташа әдеби	Есептемілік		М.Х	Г	П	Ин	Б	Орташа әдеби	Есептемілік
Al	1,432	1,43	1,26	1,43	1,388	1,383	3	0,55	0,57	0,5	0,72	0,57	0,582	0,575
As	1,248	1,22	1,18	1,48	1,282	1,256	5	-	0,46	-	0,71	0,47	0,546	0,482
Au	1,442	1,44	1,5	1,44	1,455	1,503	1	-	1,37	-	1,37	1,37	1,37	1,377
B	0,795	0,91	0,89	0,91	0,876	0,888	3	0,2	0,23	0,2	0,35	0,2	0,236	0,333
Ba	2,174	2,17	-	2,21	2,184	2,171	2	1,395	1,34	1,35	1,53	1,38	1,399	1,357
Be	1,113	1,11	1,07	1,13	1,105	1,063	2	0,314	0,35	0,31	0,44	0,34	0,350	0,472
Bi	1,548	1,55	1,46	1,82	1,594	1,453	5	-	0,74	-	0,98	0,74	0,82	0,681
Br	1,141	1,14	1,14	-	1,140	1,166	7	-	-	-	0,62	0,39	0,505	0,383
C	0,771	0,77	0,77	0,77	0,770	0,799	4	0,195	0,16	0,15	0,29	0,2	0,199	0,213
Ca	1,974	1,37	-	1,97	1,771	1,777	2	1,051	0,99	0,99	0,99	1,04	1,012	1,119

Cd	1,49	1,48	1,48	1,56	1,502	1,505	2	0,99	0,97	-	1,14	0,99	1,022	1,989
Cl	0,994	0,99	0,99	-	0,991	1,007	7	-	-	-	0,49	0,26	0,375	0,372
Co	1,253	1,25	1,25	1,25	1,250	1,251	3	0,65	0,63	-	-	0,64	0,64	0,333
Cr	1,249	1,25	1,25	1,27	1,254	1,278	6	-	0,52	-	0,81	0,35	0,56	0,514
Cs	2,655	2,62	-	2,68	2,651	2,665	1	1,678	1,67	1,69	1,69	1,65	1,675	1,675
Cu	1,278	1,27	1,35	1,28	1,294	1,405	2	0,47	0,72	-	0,96	0,8	0,737	0,985
F	0,709	0,64	0,64	-	0,663	0,684	7	-	-	-	0,1	-	0,1	0,099
Fe	1,241	1,26	-	1,26	1,253	1,259	3	0,67	0,64	-	-	0,07	0,439	0,404
Hg	1,503	1,5	1,48	1,6	1,520	1,488	2	0,66	1,1	-	1,25	1,12	1,032	1,097
I	1,333	2,2	1,28	-	1,203	1,283	7	-	0,5	-	0,77	0,5	0,59	0,426



Сурет 1-Атом радиустарының орташа әдеби және есептемелік мәндері өзгерістері заңдылықтары



Сурет 2- Ион радиустарының орташа әдеби және есептемелік мәндері өзгерістері заңдылықтары

Қорытынды

2 кестеден және 1,2 суреттерден көрінетіндей, зерттеу нәтижелері бойынша белгілі мәліметтерге жақын және де соңғылардың периодтық жүйе шеңберінде өзгеру заңдылықтарын сақтайтын, бірақ өзіндік сандық нәтижелері бар мәндер алын-

ды. Олардың жоғары дәрежелі дәйектілігі мен шынайылығына көз жеткізу мақсатында кез-келген элементтің атомы мен ионы радиустарын сол элементтің периодтық жүйе тобында оның алдында және одан кейін, бір периодта оның үстінде және астында орналасқан элементтердің белгілі мәндік

көрсеткіштерін пайдалана отырып есептеулер жүргізілді. Осы кезде барлық төрт түрлі есептеулік жағдайларда да, қарастырып отырған элементтің атомы мен ионы радиустарының бір-біріне толықтама сәйкес бірдей мәндері алынды. Бұл нәтиже жүргізілген ізденістердің жаңалығы мен қатар жоғары ілімдік ғылыми құндылығы мен маңыздылығы дәлелі бола алады.

Сонымен, жүргізілген зерттеулер нәтижелерін ғылыми химиясаласында иондық бөлшектердің және олардың материалдық негізі болып табылатын атомдардың радиустарының шынайылығы жоғары мәндерін есептік жолмен анықтауға болатын жаңа шешім деп қарастыруға болады.

Жұмыста қолданылған әдістеме Д. Менделеевтың периодтық жүйесіндегі барлық химиялық элементтердің атомдары және иондары радиустарының мәндерін есептеп анықтауға мүмкіншілік береді.

ӘДЕБИЕТТЕР ТІЗІМІ

1. Киселев А.П., Крашенинников А.А. Основы общей химии: учебник. - Л.: 2012. -340с.
2. Угай Я.А. Общая и неорганическая химия: учебник.-М.: Высшая школа 2000. – 529с.
3. Чупахин А.П. Общая химия. Химическая связь и строение вещества: учеб.пос.-Новосибирск. 2003. – 166с.

4. Тиноко И., Зауэр К., Вэнг Дж., Паглиси Дж. Физическая химия. Принципы и применение в биологических науках– М.: Техносфера, 2005.-744с.

5. Сережкин В.Н., Пушкин Д.В. Кристаллохимические радиусы и координационные числа атомов- Самара: Издательство «Универс групп», 2005. -64с.

6. Пат. 2359248 РФ. Способ измерения радиуса и энергии связи атомов и ионов // А.А. Потапов; опубл. 2009, бюл. № 17. – стр. 14.

7. Балданова Д.М., Танганов Б.Б. Плазменно-гидродинамическая концепция состояния ионов в растворах электролитов в оценке некоторых свойств- Л.:2012.-450с.

8. Пат. 2273058 РФ. Способ оценки радиусов атомов химических элементов в различном энергетическом состоянии /М.Б. Родченко, Б.Л. Александров; опубл. 2006, бюл. № 9. – стр. 19.

9. Балданов М.М., Балданов Д.М. и др. Константа экранирования Слейтора-Зинера и радиусы одноатомных ионов // Известия вузов-Физика, 2006.-Т.49, №3.-С. 59-67.

10. Балданов М.М., Балданова Д.М. и др. К проблеме радиусов гидратированных ионов //Доклады АН ВШ РФ.-2006.- №2 (7).-С.32-38.

11. Балданов М.М., Танганов Б.Б. Дисперсионное уравнение Власова и радиусы сольватированных ионов в метаноле //Журнал общей химии.-2004-Т.64., №1.- С.32-34.

12. Равдель А., Пономарева А.М. Краткий справочник физико-химических величин. Издание 8-е- Л.: Химия, 1983 – 232с.

УДК 519.67
МРНТИ 19.31

ПОСТРОЕНИЕ ГЕОЭКОЛОГИЧЕСКОЙ КАРТЫ ПЕРЕНОСА ПРИМЕСЕЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МОДЕЛИ АТМОСФЕРЫ С НЕЗАКРЕПЛЕННОЙ ВЕРХНЕЙ ГРАНИЦЕЙ ВОЗДУШНОЙ МАССЫ

А. АЙДОСОВ¹, Н.С. ЗАУРБЕКОВ¹, Н.Д. ЗАУРБЕКОВА², Ж.Т. АППАКОВ¹, А.А. АППАКОВА¹

(¹Алматинский технологический университет, Алматы, Казахстан

(²Казахский государственный женский педагогический университет, Алматы, Казахстан)

E-mail: agu_nurgali@mail.ru

При математическом моделировании переноса и распространения вредных примесей в атмосфере важную роль играет возможность воспроизведения метеополей. Предлагаемая нами гидродинамическая модель позволяет воспроизводить суточный режим метеополей и соответственно с ним рассчитать распределение концентраций вредных примесей. Рассмотрено несколько вариантов расчета, проведенных по гидродинамической модели рассеивания примесей в приземно-пограничном слое атмосферы. Во всех проведенных вариантах расчетов предполагалось, что примесь является однокомпонентной и пассивной. Расчеты были проведены для наиболее аномальных метеоситуаций.