

Уточнение связи между эффективными радиусами и энергиями ионизации атомов щелочных металлов

© Яковлев^{1*} Виктор Михайлович, Гаркушин² Иван Кириллович
и Бурчаков²⁺ Александр Владимирович

¹ Самарский государственный университет путей сообщения.
ул. Свободы, 2В. г. Самара, 443066. Россия.

² Самарский государственный технический университет. ул. Молодогвардейская, 244.
г. Самара, 443100. Россия. E-mail: turnik27@yandex.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: эффективный атомный радиус, орбитальный радиус, уточнение значений, энергия ионизации, эффективное главное квантовое число, щелочные металлы, аналитическая зависимость.

Аннотация

Одно из ключевых объяснений особенностей изменения первых энергий ионизации ($E_{и1}$) элементов периодической системы основано на постулировании однозначной связи $E_{и1}$ с атомными радиусами ($r_{ат}$). Из-за определённой условности параметров $r_{ат}$, они не относятся к категории атрибутивных атомных характеристик. Обычно их находят либо путем реализации различного рода теоретических или полуэмпирических схем расчёта, либо при использовании опытных данных по $E_{и1}$ для соответствующих аппроксимаций. Как следует из литературных данных, известные значения $r_{ат}$, даже в случае «квазиводородоподобных» щелочных металлов (ЩМ), – сравнительно простых многоэлектронных систем – характеризуются, как правило, значительным разбросом. К тому же, канонические аналитические формулы, описывающие $r_{ат}$ в рамках водородоподобной модели с двумя эффективными параметрами взаимодействия (по Слейтеру), в этой совокупности элементов не приводят, в конечном итоге, к адекватным результатам.

В данной работе для корректировки связи $r_{ат} = f(E_{и1})$, относящейся к свойствам совокупности щелочных элементов, привлечены публикации значений как эффективных радиусов Слейтера ($r_{эфф}$) и орбитальных радиусов Уэбера-Кромера ($r_{орб}$), так и некоторые результаты более поздних данных по $r_{ат}$. На базе величин $E_{и1}$ оценены эффективные главные квантовые числа n^* , как имманентные каждому ЩМ дескрипторы (кроме Li , для которого принято, что $n^*=n=2$). Дальнейший шаг, посредством введения n^* , позволил задействовать критерий оптимизации величины эффективного радиуса r^* и скорректировать формулу, определяющую его взаимосвязь с $E_{и1}$, в виде простой степенной функции. При этом уточнены в сторону некоторого занижения, сравнительно с $r_{орб}$, радиусы Li , Na и Fr . Приведены аргументы в пользу достоверности предложенного подхода.

Показано, что полученные оценки r^* лучше коррелируют с амплитудами решения волнового уравнения, охватывающими все ЩМ, чем известные отвечающие им значения $r_{орб}$ и $r_{эфф}$.