

О свойствах франция в атомарном и конденсированном состояниях в трактовке и оценках

© Яковлев^{1*} Виктор Михайлович 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: щелочные металлы, франций, атомарные свойства, потенциал ионизации, дескриптор, эффективный параметр взаимодействия.

Аннотация

Начиная с классического исследования Слейтера (1930 г), атомные и когезионные характеристики металлов изучаются в зависимости от электронных свойств, таких как эффективный заряд ядра атома. Последний относительно плохо определен в справочных источниках, где наблюдается его значительный разброс. В данной работе мы не прибегаем к его использованию.

В статье анализируются особенности, выделяющие сравнительно мало изученный химический элемент – франций – из числа других щелочных металлов (ЩМ). Представлен подход, позволяющий учесть известные примеры нарушения периодичности свойств ${}_{87}\text{Fr}$ в совокупности ЩМ в зависимости от порядкового номера этого элемента. С целью аналитического описания указанных свойств (атомарных и предполагаемого компактного вещества) и для получения достоверных оценок их величин, привлечён, в качестве дескриптора, эффективный параметр взаимодействия формирующего электрона с остовом, нормируемый потенциалом ионизации атома ЩМ. В отличие от известных рецептов первых энергий ионизации, предлагаемая расчётная процедура, в своей основе, не опирается на традиционное упрощённое представление о водородоподобности кулоновской составляющей потенциальной энергии.

Показано, что все рассмотренные характеристики могут быть выражены эмпирически простой степенной функцией от этого, имманентного для химического элемента, параметра. В числе таких характеристик – амплитуда решения волнового уравнения, статическая дипольная поляризуемость, сродство к электрону и ширина щели в атомном спектре. На основе развитого подхода применительно к Fr уточнены значения электроотрицательности и эффективного атомного радиуса, а также даны оценки работы выхода электрона, теплоты сублимации, энергии связи и радиуса сферической ячейки Вигнера – Зейтца, выражающей валентную электронную плотность и среднее межэлектронное расстояние в конденсированной фазе металла. Приведены доводы, позволяющие полагать результат определения радиуса нейтрального атома франция оптимальным.