

ЭКСТРАПОЛЯЦИОННЫЕ ОЦЕНКИ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК НИХОНИЯ, ТЕННЕССИНА И ОГАНЕСОНА

© 2021 г. Ю. В. Норсеев*

*Объединенный институт ядерных исследований, 141980, Дубна Московской обл., ул. Жолио-Кюри, д. 6
e-mail: norseev@jinr.ru; norseev@yahoo.com

Получена 03.10.2019, после доработки 03.10.2019, принята к публикации 27.12.2019

Метод сравнительного расчета, основанный на корреляции одних свойств с другими в группе элементов-аналогов и неоднократно применявшийся для определения свойств астата, можно использовать для оценки некоторых физико-химических свойств теннессина, оганесона и нихония. В группах этих элементов наблюдается прямолинейная зависимость одних их свойств от других свойств.

Ключевые слова: теннессин, оганесон, нихоний, астат, радон, свойства, метод сравнительного расчета.

DOI: 10.31857/S0033831121030035

Определение физико-химических свойств сверхтяжелых элементов, получаемых в виде одиночных атомов, представляет неоспоримый интерес [1]. Поскольку прямое изучение этих свойств весьма затруднительно, важное значение приобретают методы расчета физико-химических характеристик элементов. Для расчетов привлекаются различные варианты модели Томаса–Ферми [2], макроскопически-микроскопические модели и модели на основе метода Хартри–Фока [3]. Наибольший объем информации о свойствах сверхтяжелых элементов получен с помощью различных релятивистских методов теории функционала электронной плотности [4]. Усилиями многих ученых была создана микроскопическая теория атомных ядер – стройная система физических закономерностей.

Наряду с вышеперечисленными методами определения свойств элементов, получаемых в предельно малом количестве, вероятно, можно использовать методы, основанные на поисках закономерностей в изменении физико-химических свойств в рядах соединений-аналогов. Система методов сравнительного расчета (МСР), предложенная М.Х. Карапетянцем [5], основана на сопоставлении свойств веществ и дает возможность линейно связать одни

физико-химические характеристики элементов-аналогов с другими характеристиками. Впервые метод сравнительных расчетов был описан в книге, вышедшей в 1965 г. [5]. Книга была переиздана в 2014 г. и вновь выпущена в 2019 г. При этом либо строится зависимость величин свойств от параметров, характеризующих индивидуальность элемента (атомный номер, атомная масса, ковалентный или ионный радиус), либо сравниваются физико-химические свойства соединений в гомологических рядах. Этот метод позволяет сделать оценку свойств неизученных веществ. Метод сравнения неоднократно использовался при определении ряда физико-химических свойств астата и его соединений [6]; пример приведен на рис. 1.

В дальнейшем вместо времени удерживания анализируемых астаторганических соединений при их газохроматографическом определении использовались индексы удерживания, предложенные Ковачем [7]. Индексы удерживания не зависят от скорости подачи газа-носителя.

Для всех полученных нами органических соединений астата были определены газохроматографические индексы удерживания на полярных и неполярных жидких фазах [6, 8].

Таблица 1. Экстраполяционная оценка геометрических параметров астата [15, 16]

Параметр	Галогенбензолы		Галогентолуолы		Литературные расчетные оценки [17]
	сквалан	апиезон	сквалан	апиезон	
Ковалентный радиус, Å	1.52	1.52	1.51	1.52	1.46
Ван-дер-ваальсовый радиус, Å	2.38	2.39	2.38	2.39	2.32
Атомный радиус, Å	1.49	1.48	1.48	1.48	1.46
Ионный радиус At ⁻ , Å	2.39	2.39	2.39	2.39	2.3
Атомный объем, м ³ /моль	27.8	27.73	27.66	27.67	—
Межатомное расстояние C–At в астатароматике, Å	2.23	2.24	2.24	2.24	2.24

Поскольку индексы удерживания органических производных были экспериментально найдены не только для астата, но и легких галогенов, эти величины были использованы для определения ряда физико-химических свойств соединений астата методом сравнительного расчета.

Линейная зависимость между логарифмами индексов удерживания различных органических галоидпроизводных с одним и тем же радикалом и их температурами кипения дала возможность экстра-

поляционно определить температуры кипения астаталфатических соединений как нормального, так и разветвленного строения [9, 10], а также астатароматических соединений [8].

Методом сравнительного расчета были определены температуры кипения синтезированных малоустойчивых *o*-, *m*- и *n*-изомеров астатнитробензола: 303, 297 и 303°C соответственно [11], а также астаталлила: $129 \pm 2^\circ\text{C}$ [12].

Для ароматических соединений астата были оценены теплоты испарения [13], рефракция связи углерод–астат [14] и дипольные моменты [14].

Метод сравнительного расчета позволил определить не только некоторые характеристики впервые полученных соединений астата [6], но и оценить ряд параметров элементарного астата (табл. 1).

Данные, полученные на основе экстраполяционных оценок физико-химических свойств астата, мало отличаются от величин, указанных в литературе, найденных другими расчетными методами.

Можно ожидать, что метод сравнительных расчетов позволит оценить ряд свойств труднодоступных сверхтяжелых элементов. Например, для расчета радиуса иона теннессина можно провести сравнение с его ковалентным радиусом (табл. 2):

$$\lg Y = aX + b. \quad (1)$$

По методу наименьших квадратов зависимость $\lg Y$ от X для F, Cl, Br, I, At имеет вид¹ $\lg Y = 0.003X + 1.4556$. Отсюда расчетный радиус иона теннессина равен $X = (2.217 - 1.4556)/0.003 = 254$.

¹ Расчеты проводили по стандартной компьютерной программе «МНК и регрессионный анализ Онлайн+Графики. (Линейная регрессия).»

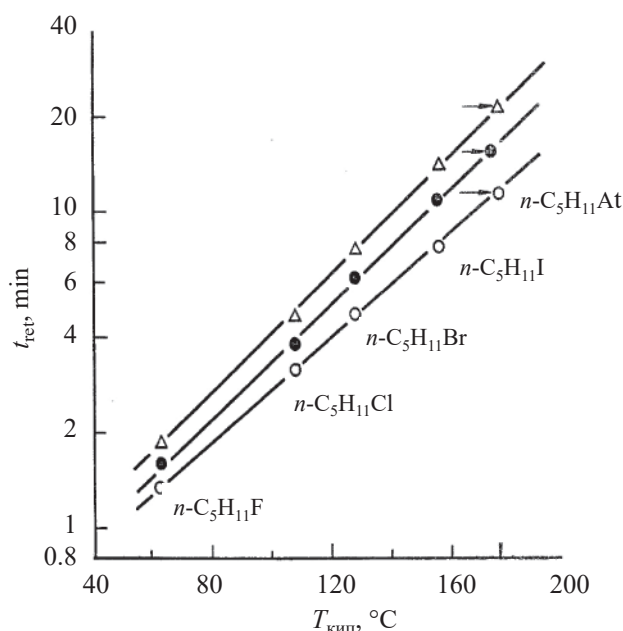


Рис. 1. Зависимость логарифма времени удерживания *n*-пентилгалогенидов от их температур кипения при температурах колонки 140 (треугольники), 150 (черные кружки) и 160°C (светлые кружки). Температура кипения C₅H₁₁At найдена равной 175°C.

Таблица 2. К оценке радиуса иона теннессина

Параметр	Фтор	Хлор	Бром	Иод	Астат	Теннессин (литературные данные)
Радиус иона, пм (X)	133	181	196	220	239	333 [19]
Ковалентный радиус, пм	72	102 ± 4	114	133	152	165 [18]
$\lg Y$	1.857	2.012	2.057	2.124	2.181	2.217

Таблица 3. Свойства фтора, хлора, брома, иода, астата и теннессина

Параметр	Фтор	Хлор	Бром	Иод	Астат	Теннессин	
						литературные данные	МСП
Радиус атома, пм	64; 73	99	114	136	148	176 [18,19]	166 ± 7
Радиус иона, пм	133	181	196	220	239	333 [19]	260 ± 8
Ковалентный радиус, пм	72	102 ± 4	114	133	152	165 [18]	167 ± 8
Энергия ионизации (J_1), эВ	17.41	13.01	11.84	10.45	9.50	7.64 [19]	8.5 ± 0.5
Сродство к электрону, эВ	3.45	3.61	3.37	3.08	2.8	1.45 ± 0.03 [19]	2.5 ± 0.2
Температура плавления, °C	-219.7	-100.95	-7.25	113.5	230, 244	300–500 [20]	400 ± 50
Температура кипения, °C	-183, -188	-34.55	58.6, 59.82	184.35	309, 317	550–610 [20]	550 ± 50
Плотность, г/см ³	1.51	1.57	3.1	4.9	6.3–6.5 [19]	7.1–7.3 [21]	8.5 ± 0.7
Относительная электроотрицательность	4.0	3.0	2.8	2.5	~2/2	~2	1.9 ± 0.1

Графическое сравнение логарифма ковалентных радиусов галогенов с их радиусами ионов представлено на рис. 2.

При сравнении логарифма атомных радиусов галогенов с их ионными радиусами величина ионного радиуса теннессина оказалась равной 256 пм, при сравнении логарифма энергии ионизации – 274 пм и при сравнении логарифма относительной электроотрицательности – 258 пм. Разброс зависит от точности определения свойства предыдущих элементов-аналогов.

В табл. 3 показаны некоторые физико-химические характеристики элементов группы галогенов. Для теннессина приведены как литературные данные, так и данные, найденные методом сравнительных расчетов.

Метод сравнительного расчета был использован и при оценке некоторых свойства оганесона, кото-

рые представлены в табл. 4. Теоретически предполагается, что оганесон будет несколько активнее радона.

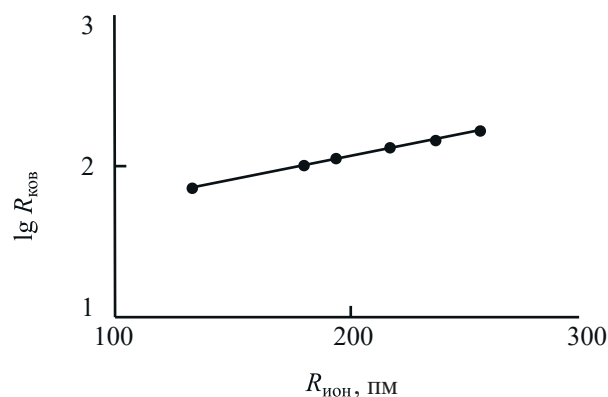
**Рис. 2.** Зависимость логарифма ковалентных радиусов F, Cl, Br, I, At и Ts от их ионных радиусов.

Таблица 4. Свойства гелия, неона, аргона, криптона, ксенона, радона и оганесона

Параметр	Гелий	Неон	Аргон	Криптон	Ксенон	Радон	Оганесон	
							литературные данные	МСП
Атомный радиус, пм	31	38	71	88	108	214, 134	152 [18]	150 ± 5
Ковалентный радиус, пм	28	58	106	116	140	150	230 [22]	177 ± 7
Температура плавления, °C	-272.2	-248.6	-189.35	-156.6	-111.85	-71.15		-45 ± 10
Температура кипения, °C	-268.94	-246.05	-185.85	-153.2	-107.05	-61.75	80 ± 30 [23]	-35 ± 8
Энергия ионизации (J_1), кДж·моль ⁻¹ /эВ	2361.3/ 24.47	2079.4/ 21.56	1519.6/ 15.76	1350/ 13.99	1170/ 12.13	1036.5/ 10.74	839.4 [20]/ 8.7	$837 \pm 5/9.01$
Удельная теплота испарения, кДж/моль	0.0829	1.74	6.45	9.05	12.65	18.1	19.4 [24]	19 ± 1
Плотность, г/л	0.147	1.204	1.7837	2.155	3.52	4.4	4.9–5.1 [21]	5 ± 0.2

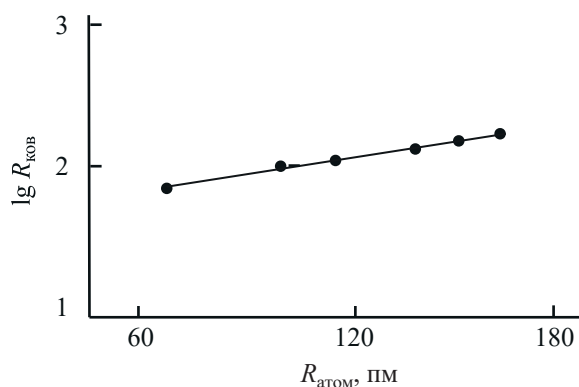


Рис. 3. Зависимость логарифма ковалентных радиусов F, Cl, Br, I, At и Ts от их атомных радиусов.

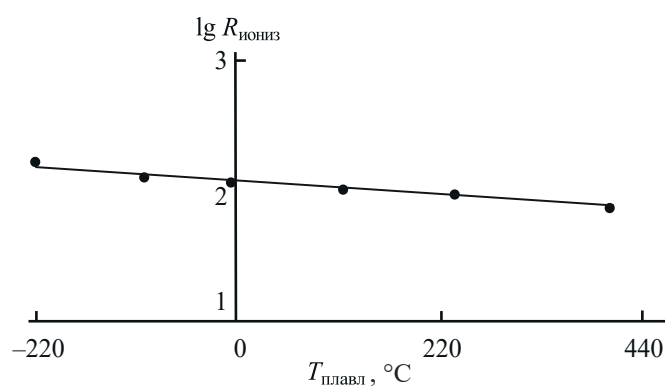


Рис. 4. Зависимость логарифма энергии ионизации F, Cl, Br, I, At и Ts от их температур плавления.

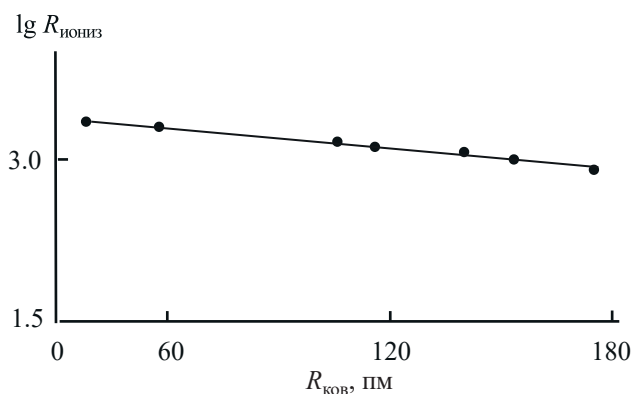


Рис. 5. Зависимость логарифма энергии ионизации He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn и Og от их ковалентных радиусов.

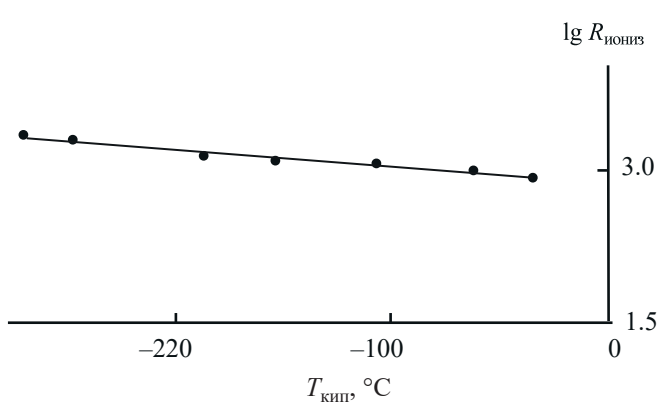


Рис. 6. Зависимость логарифма энергии ионизации He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn и Og от их температур кипения.

Таблица 5. Энтальпии адсорбции Ga, In, Tl, Nh

Параметр	Ga	In	Tl	Nh	
				литературные данные	МСП
Энтальпия адсорбции на кварце, кДж/моль	350 ± 20	227 ± 10 [29]	134 ± 15 [30], 158 ± 3 [32]	57.8 [31], 68.2 ± 13 [33]	75 ± 15
Энтальпия адсорбции на золоте, кДж/моль	450 ± 30	315 ± 10 [29]	270 ± 10 [30]	~ 100 [34], 180 ± 20 [31, 33]	190 ± 30

На рис. 3, 4 показаны прямолинейные зависимости, образующиеся при сравнении одних свойств галогенов с другими свойствами.

Значительные сведения о свойствах сверхтяжелых элементах содержатся в работе [25]. Рисунки 5–7 еще раз иллюстрируют возможность применения метода сравнительного расчета для вычисления свойств труднодоступных элементов.

Следует отметить, что Дубна лидирует не только в синтезе новых сверхтяжелых элементов [26],

но в изучении их свойств. Первые эксперименты по химии нихония были успешно проведены в Дубне [27, 28] непосредственно за мишенью. Газофазные термохроматографические исследования показали его повышенное взаимодействие с поверхностью золота [27].

В ряду галлия, индия, таллия и нихония только для In и Tl были экспериментально найдены значения энтальпии адсорбции на кварце и золоте (табл. 5). С использованием этих данных была экс-

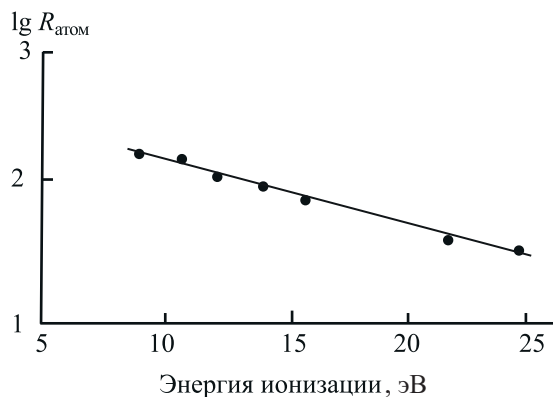
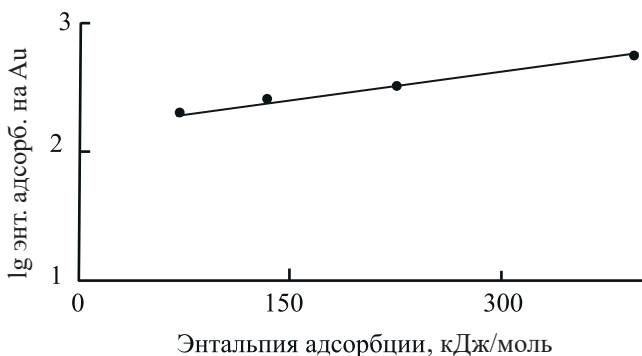
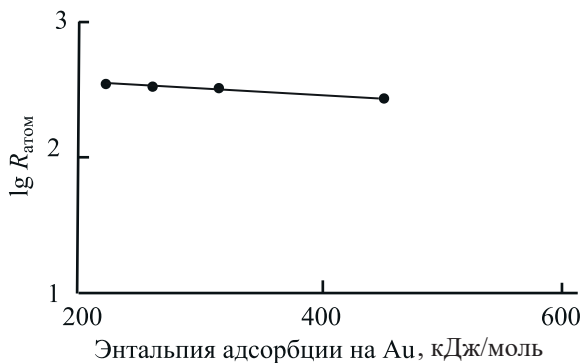
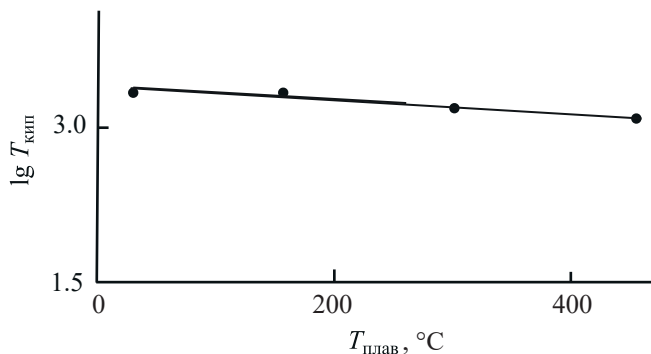
**Рис. 7.** Зависимость логарифма атомного радиуса He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn и Og от их энергии ионизации.**Рис. 8.** Зависимость логарифма энтальпии адсорбции Ga, In, Tl и Nh на золоте от их энтальпии адсорбции на кварце.**Рис. 9.** Зависимость логарифма атомного радиуса Ga, In, Tl, Nh от их энтальпии адсорбции на золоте.**Рис. 10.** Зависимость логарифма температуры кипения Ga, In, Tl и Nh от их температуры плавления.

Таблица 6. Свойства галлия, индия, таллия и нихония

Параметр	Ga	In	Tl	Nh	
				литературные данные	МСП
Атомный радиус, пм	139	166	171	170 [18]	180–200
Ковалентный радиус, пм	126	144	148	172–180[21]	170 ± 10
Ионный радиус M^+ , пм	110	130	147		165 ± 5
Температура плавления, °C	29.8	156.8	303.6	430 [18]	455 ± 10
Температура кипения, °C	2516	2323	1457	1157 [18]	1200 ± 50
Теплота испарения, кДж/моль	255.8	227.8	174.8	130 [22]	130 ± 10
Работа выхода электрона, эВ	3.96	3.80	3.70		3.6 ± 0.1
Энтальпия испарения, кДж/моль	270.3	231.8	166.1	130 [22]	115 ± 10
Плотность, г/см	5.91	7.36	11.85	16–18 [18]	17 ± 2

траполяционно рассчитана энтальпия адсорбции галлия на кварце и золоте (рис. 8), и в дальнейшем эти величины наравне с другими использовали в экстраполяционных расчетах свойств нихония (табл. 5; рис. 9, 10).

Найденные методом сравнительного расчета свойства нихония представлены в табл. 6.

Метод сравнительного расчета еще раз подтверждает прозорливость Д.И. Менделеева при создании им Периодической системы элементов.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Оганесян Ю.Ц., Дмитриев С.Н. // Успехи химии. 2016. Т. 85, вып. 9. С. 901–916.
2. Лундквист С., Марч Н. Теория неоднородного электронного газа. М.: Мир, 1987. 400 с.
3. Moshinsky M. // Am. J. Phys. 1968. Vol. 36. P. 52–53.
4. Dreizler R., Gross E. Density Functional Theory. New York: Plenum, 1995.
5. Каранетьянц М.Х. Методы сравнительного расчета физико-химических свойств. М.: Наука, 1965; М.: ЛЕНАНД, 2014; М.: ЛЕНАНД (УРСС), 2019.
6. Норсеев Ю.В. Изучение химии астата в Объединенном институте ядерных исследований (Дубна). Открытие и исследование свойств новых неорганических и органических соединений астата, синтез терапевтических радиофармпрепаратов: Сообщ. ОИЯИ P12-2013-32. 2013. 65 с.
7. Kovats E. // Helv. Chim. Acta. 1958. Vol. 41. P. 1915–1932.
8. Вашаров Л., Норсеев Ю.В., Халкин В.А. Сообщ. ОИЯИ 12-12188. Дубна, 1979. 14 с.
9. Kolachkovsky A., Norseyev Y.V. // J. Chromatogr. 1973. Vol. 84. P. 175–180.
10. Gesheva M., Kolachkovsky A., Norseyev Y.V. // J. Chromatogr. 1971. Vol. 60, № 3. P. 414–417.
11. Вашаров Л., Норсеев Ю.В., Фоминых В.И., Халкин В.А. // Радиохимия. 1982. Т. 24, № 1. С. 95–99.
12. Норсеев Ю.В., Вашаров Л., Сюч З. // Радиохимия. 1988. Т. 30, № 2. С. 182–185.
13. Вашаров Л., Норсеев Ю.В., Халкин В.А. Сообщ. ОИЯИ P6-80-158. Дубна, 1980. 7 с.
14. Вашаров Л., Норсеев Ю.В., Халкин В.А. Сообщ. ОИЯИ P12-81-511. Дубна, 1981. 6 с.
15. Норсеев Ю.В., Вашаров Л. Сообщ. ОИЯИ P12-93-129. Дубна, 1993. 6 с.
16. Норсеев Ю.В. // Радиохимия. 1995. Т. 37, вып. 3. С. 243–252.
17. Ожигов Е.П. // ЖФХ. 1964. Т. 34, № 10. С. 3519–3519.
18. Hoffman D.C., Lee D.M., Pershina V. // Transactinides and the Future Elements: vol. 3 of The Chemistry of the Actinide and Transactinide Elements / Eds N. Edelstein, J. Fuger. Dordrecht: Springer, 2011. 4th ed.
19. Chang Z., Li J., Dong C. // J. Phys. Chem. A. 2010. Vol. 114. P. 13388–13394.
20. Haire R. // Transactinides and the Future Elements: vol. 3 of The Chemistry of the Actinide and Transactinide Elements / Eds N. Edelstein, J. Fuger. Dordrecht: Springer, 2006. 3rd ed. P. 1724.
21. Bonchev D., Kamenska V. // J. Phys. Chem. 1981. Vol. 85, N 9. P. 1177–1186.

22. *Seaborg G.T.* Transuranium element (chemical element) // Encyclopedia Britannica. Retrieved March 16, 2010.
23. *Fricke B.* Superheavy elements: a prediction of their chemical and physical properties // Structure and Bonding. 1975. Vol. 21: Recent Impact of Physics on Inorganic Chemistry. P. 89–144.
24. *Nash C.S.* // J. Phys. Chem. A. 2005. Vol. 109, N 15. P. 3493–3500.
25. *Eichler R., Eichler B.* // Thermochemical Properties of the Elements Rn, 112, 114, and 118 (PDF). Paul Scherrer Institut. Retrieved Oct. 23, 2010.
26. *Oganessian Yu.Ts.* Discovering Superheavy Elements. Oak Ridge National Laboratory. Retrieved April 21, 2017.
27. *Dmitriev S.N., Aksenov N.V., Alibin Y.V., Bozhikov G.A., Chelnokov M.L., Chepygin V.I., Eichler R., Isaev A.V., Katrasev D.E., Lebedev V.Ya., Malyshev O.N., Petrushkin O.V., Porobanuk L.S., Ryabinin M.A., Sabel'nikov A.V., Sokol E.A., Svirikhin A.V., Starodub G.Ya., Usoltsev I., Vostokin G.K., Yeregin A.V.* // Mendelev Commun. 2014. Vol. 24, N 5. P. 253–256.
28. *Aksenov N.V., Steinegger P., Abdullin F.Sh., Albin Y.V., Bozhikov G.A., Chepigin V.I., Eicher R., Lebedev V.Ya., Madumarov A.Sh., Malyshev O.N., Petrushkin O.V., Polyakov A.N., Popov Y.A., Sabel'nikov A.V., Sagaidak R.N., Shirokovsky I.V., Shumeiko M.V., Starodub G.Ya., Tsyganov Yu.A., Utyonkov V.K., Voinov A.A., Vostokin G.K., Yaremin A.V., Dmitriev S.N.* // Eur. Phys. J. A. 2017. Vol. 53. Article 158.
29. *Serov A., Eichler R., Dressier R., Piguet D., Türler A., Vögele A., Wittwer D., Gägeler H.W.* // Radiochim. Acta. 2011. Vol. 99, N 2. P. 95–101.
30. *Serov A., Eichler R., Dressier R., et al.* // Radiochim. Acta. 2013. Vol. 101. P. 421–426.
31. *Pershina V.* // J. Phys. Chem. C. 2016. Vol. 120. P. 20232–20238.
32. *Steinegger P., Asai M., Dressler R., Eichler R., Kaneya Y., Mitsukai A., Nagame Y., Piguet D., Sato T., Schadel M., Takeda S., Toyoshima A., Tsukada K., Turler A., Vascon A.* // J. Phys. Chem. C. 2016. Vol. 120, N 13. P. 7122–7132.
33. *Eichler B., Rossbach H.* // Radiochim. Acta. 1983. Vol. 33 P. 121–125.
34. *Rusakov A., Demidov Y., Zaitsevskii A.* // Centr. Eur. J. Phys. 2013. Vol. 11. P. 1537–1540.