

Ю. В. Норсеев<sup>1</sup>

**ЭКСТРАПОЛЯЦИОННЫЕ ОЦЕНКИ  
ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК  
НИХОНИЯ, ТЕННЕССИНА И ОГАНЕСОНА**

Направлено в журнал «Радиохимия»

---

<sup>1</sup> E-mail: [norseev@jinr.ru](mailto:norseev@jinr.ru), [norseev@yahoo.com](mailto:norseev@yahoo.com)

Норсеев Ю. В.

P6-2019-48

Экстраполяционные оценки физико-химических характеристик  
нихония, теннессина и оганессона

Существует корреляционная зависимость, связывающая в каждой группе элементов-аналогов одни их свойства с другими, — метод сравнительного расчета. Линейная зависимость между логарифмами индексов удерживания различных органических галоидпроизводных с одним и тем же радикалом и их различными физико-химическими характеристиками позволила экстраполяционно определить для полученных астаторганических соединений температуры кипения и плавления, теплоту испарения, рефракцию и энергию связи углерод–астат и дипольные моменты. Были определены некоторые параметры элементарного астата. Метод сравнительного расчета можно использовать и для оценки некоторых физико-химических свойств теннессина, оганессона и нихония. На рисунках показано, что в группах этих элементов наблюдается прямолинейная зависимость одних их свойств от других. В таблицах для Ts, Og и Nh даются усредненные значения их физико-химических свойств, полученные в результате построения не менее трех зависимостей.

Работа выполнена в Лаборатории ядерных реакций им. Г. Н. Флерова ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2019

Norseev Yu. V.

P6-2019-48

Extrapolational Estimations of Physical-Chemical Properties  
of Nihonium, Tennessine and Oganesson

The method of comparing calculations is a correlational relation, connecting some properties with other ones in every group of analogical elements. Linear relation between logarithms of retention indexes of organic haloderivatives with one and the same substitutes and their different physical-chemical properties allowed determining extrapolationally boiling and melting point temperatures, heats of vaporization, refraction, carbon-astatine binding energy and dipole moments. Some properties of elemental astatine were determined. The method of comparing calculations can be used for estimating some physical-chemical properties of nihonium, tennessine and oganesson. It is shown in the figures that linear dependence of some properties on other ones is observed in groups of these elements. Averaged values of their physical-chemical properties obtained because of building more than three relations are given in the tables for these elements.

The investigation has been performed at Flerov Laboratory of Nuclear Reactions, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2019

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 расчетные методы 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, используются методы, основанные на поисках закономерностей в изменении физико-химических свойств в рядах соединений-аналогов. Система методов сравнительного расчета (МСР), предложенная М. Х. Карапетьянцем [5], основана на сопоставлении свойств веществ и дает возможность связать одни физико-химические характеристики элементов-аналогов с другими. Впервые метод сравнительных расчетов был описан в книге, вышедшей в 1965 г. [5а]. Книга была переиздана в 2014 г. [5б] и вновь выпущена в 2019 г. [5в]. При этом либо строится зависимость величин свойств соединений элемента 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 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.

Поскольку индексы удерживания органических производных были экспериментально найдены не только для астата, но и для 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 температурой кипения дала возможность экстраполяционно определить температуру кипения астаталифатических соединений как нормального строения, так и имеющих разветвленное строение [9, 10], а также астатароматических соединений [8].

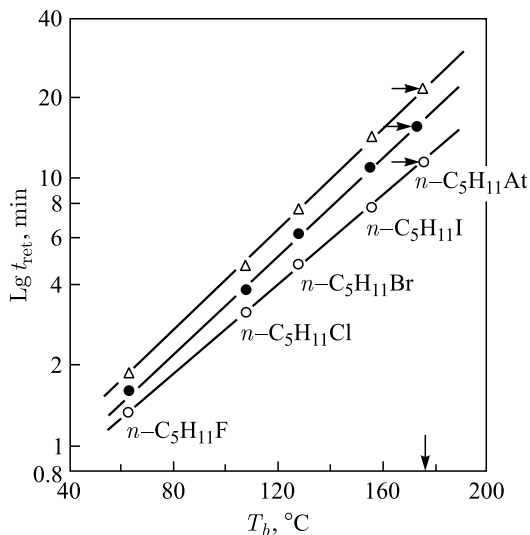


Рис. 1. Зависимость логарифма времени удерживания н-пентагалогенидов от их температуры кипения при трех значениях температуры колонки: 140 ( $\Delta$ ), 150 ( $\bullet$ ) и 160  $^{\circ}\text{C}$  ( $\circ$ ). Температура кипения  $\text{C}_5\text{H}_{11}\text{At}$  найдена равной 175  $^{\circ}\text{C}$

Методом сравнительного расчета была определена температура кипения синтезированных малоустойчивых о-, м- и п-изомеров астатнитробензола: 303, 297 и 303  $^{\circ}\text{C}$  соответственно [11], а также астаталлила,  $(129 \pm 2)$   $^{\circ}\text{C}$  [12].

Для ароматических соединений астата были оценены теплота 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.

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

Параметр	Галогенбензолы		Галогентолуолы		Литературные расчетные оценки [17]
	Сквалан	Апиезон	Сквалан	Апиезон	
Ковалентный радиус, $\text{Å}$	1,52	1,52	1,51	1,52	1,46
Ван-дер-ваальсовый радиус, $\text{Å}$	2,38	2,39	2,38	2,39	2,32
Атомный радиус, $\text{Å}$	1,49	1,48	1,48	1,48	1,46
Ионный радиус $\text{At}^-$ , $\text{Å}$	2,39	2,39	2,39	2,39	2,3
Атомный объем, $\text{м}^3/\text{моль}$	27,8	27,73	27,66	27,67	—
Межатомное расстояние C–At в астатароматике, $\text{Å}$	2,23	2,24	2,24	2,24	2,24

Можно ожидать, что метод сравнительных расчетов позволит оценить ряд свойств труднодоступных сверхтяжелых элементов.

**Пример.** Для расчета радиуса иона теннессина можно провести сравнение с его ковалентным радиусом (табл. 2):

$$\text{Lg } Y = aX + B. \quad (1)$$

Таблица 2

Параметр	Фтор	Хлор	Бром	Йод	Астат	Теннессин (лит.)
Радиус иона, пм ( $X$ )	133	181	196	220	239	333 [19]
Ковалентный радиус, пм	72	102 ± 4	114	133	152	165 [18]
Lg $Y$	<b>1,857</b>	<b>2,012</b>	<b>2,057</b>	<b>2,124</b>	<b>2,181</b>	<b>2,217</b>

По методу наименьших квадратов зависимость  $Y$  от  $X$  для F, Cl, Br, I, At имеет вид\*

$$\text{Lg } Y = 0,003X + 1,4556.$$

Отсюда расчетный радиус иона теннессина равен

$$X = (2,217 - 1,4556)/0,003 = 254.$$

Графическое сравнение 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, полученные методом сравнительного расчета.

В табл. 3, 4, 6 даются усредненные значения физико-химических свойств Ts, Og, Nh, полученные в результате построения не менее трех зависимостей.

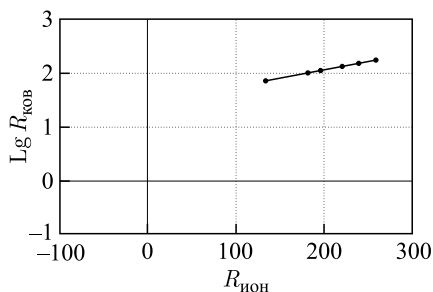


Рис. 2. Зависимость логарифма ковалентных радиусов F, Cl, Br, I, At и Ts от их ионных радиусов

\*Расчеты проводились по стандартной компьютерной программе «МНК и регрессионный анализ онлайн + графики (Линейная регрессия)».

**Таблица 3. Свойства фтора, хлора, брома, йода, астага и теннессина**

Параметр	Фтор	Хлор	Бром	Йод	Астат	Теннессин	
						Лит.	МСП
Радиус атома, пм	64 73	99	114	136	148	176 [18, 19]	166 ± 7
Ковалентный радиус, пм	72	102 ± 4	114	133	152	165 [18]	167 ± 8
Радиус иона, пм	133	181	196	220	239	333 [19]	260 ± 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, °С	-219,7	-100,95	-7,25	113,5	230; 244	300– 500 [20]	400 ± 50
Температура кипения, °С	-183; -188	-34,55	58,6; 59,82	184,35	309; 317	550– 610 [21]	550 ± 50
Плотность, г/см	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

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

Метод сравнительного расчета был использован и при оценке некоторых свойств оганесона, которые представлены в табл. 4. Теоретически предполагается, что оганесон будет несколько активнее радона.

Значительные сведения о свойствах сверхтяжелых элементов содержатся в работе [25].

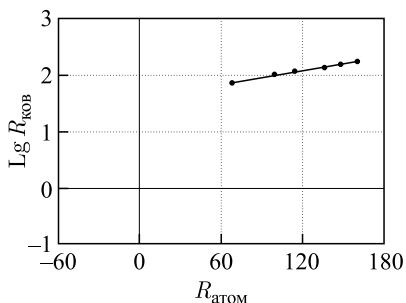


Рис. 3. Зависимость логарифма ковалентных радиусов F, Cl, Br, I, At и Ts от их атомных радиусов

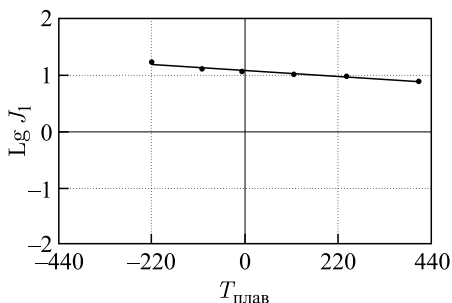


Рис. 4. Зависимость логарифма энергии ионизации F, Cl, Br, I, At и Ts от их температуры плавления

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

Параметр	Гелий	Неон	Аргон	Криптон	Ксенон	Радон	Оганесон	
							Лит.	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, °С	-272,2	-248,6	-189,35	-156,6	-111,85	-71,15		-45 ± 10
Температура кипения, °С	-268,94	-246,05	-185,85	-153,2	-107,05	-61,75	80 ± 30 [23]	-35 ± 8
Энергия ионизации ( $J_1$ ), кДж · моль <sup>-1</sup> 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 ± 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. 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 и в изучении их свойств. Первые эксперименты по химии нихония были успешно проведены в Дубне [27] непосредственно за мишенью. Последующие газофазные термохроматографические исследования показали его повышенное взаимодействие с поверхностью золота [28].

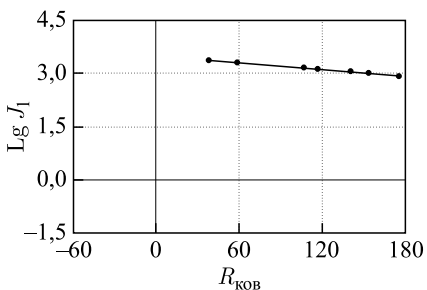


Рис. 5. Зависимость логарифма энергии ионизации He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn и Og от величины их ковалентных радиусов

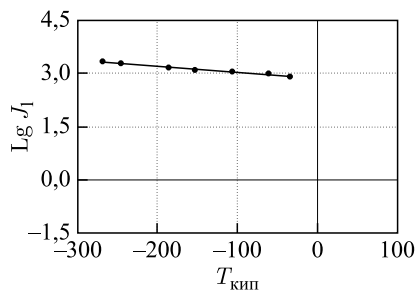


Рис. 6. Зависимость логарифма энергии ионизации He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn и Og от их температуры кипения

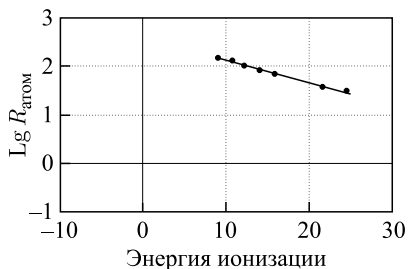


Рис. 7. Зависимость логарифма атомного радиуса He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn и Og от их энергии ионизации

В ряду галлия, индия, таллия и ниохния только для In и Tl были экспериментально найдены значения энтальпии адсорбции на кварце и золоте (табл. 5). С использованием этих данных была экстраполяционно рассчитана величина энтальпии адсорбции галлия на кварце и золоте (рис. 8), и в дальнейшем эти величины наравне с другими использовались в экстраполяционных расчетах свойств ниохния (рис. 9, 10).

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

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

Таблица 5

Энтальпия адсорбции	Галлий	Индий	Таллий	Ниохний	
				Лит.	МСП
На кварце, кДж/моль	$350 \pm 20$	$227 \pm 10$ [29]	$134 \pm 15$ [30] $158 \pm 3$ [32]	57,8 [31] $68,2 \pm 13$ [33]	$75 \pm 15$
На золоте, кДж/моль	$450 \pm 30$	$315 \pm 10$ [29]	$270 \pm 103$ [30]	$\sim 100$ [34] $180 \pm 20$ [31, 33]	$190 \pm 30$

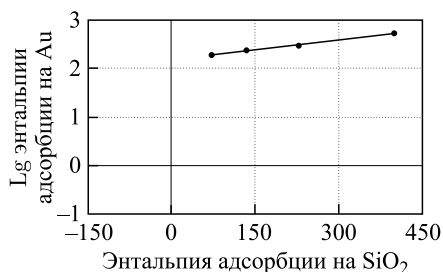


Рис. 8. Зависимость логарифма энтальпии адсорбции Ga, In, Tl и Nh на золоте от их энтальпии адсорбции на кварце

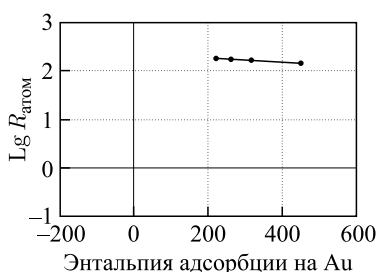


Рис. 9. Зависимость логарифма атомного радиуса Ga, In, Tl, Nh от их энтальпии адсорбции на золоте



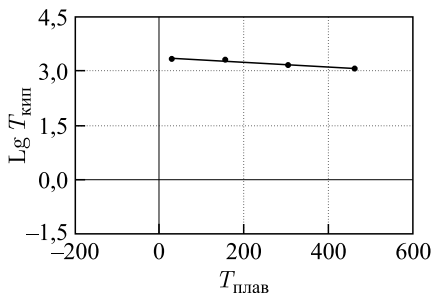


Рис. 10. Зависимость логарифма температуры кипения Ga, In, Tl и Nh от их температуры плавления

Таблица 6. Свойства галлия, индия, таллия и ниохния

Параметр	Галлий	Индий	Таллий	Ниохний	
				Лит.	МСП
Атомный радиус, пм	139	166	171	170 [18]	180–200
Ковалентный радиус, пм	126	144	148	172–180 [22]	170 ± 10
Ионный радиус $M^+$ , пм	110	130	147		165 ± 5
Температура плавления, °С	29,8	156,8	303,6	430 [18]	455 ± 10
Температура кипения, °С	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 <sup>3</sup>	5,91	7,36	11,85	16–18 [18]	17 ± 2

## ЛИТЕРАТУРА

1. Оганесян Ю. Ц., Дмитриев С. Н. // Успехи химии. 2016. Т. 85, вып. 9. С. 901–916.
2. Лундквист С., Марч Н. Теория неоднородного электродного газа. М.: Мир, 1987. 400 с.
3. Moshinsky M. How Good Is the Hartree–Fock Approximation // Am. J. Phys. 1968. V. 36. P. 52–53.
4. Dreizler R., Gross E. Density Functional Theory. New York: Plenum Press, 1995.
5. Карапетьянц М. Х. Методы сравнительного расчета физико-химических свойств. а) М.: Наука, 1965; б) М.: Ленанд, 2014; в) М.: Ленанд, 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. Препринт ОИЯИ P12-2013-32. Дубна, 2013.
7. Kovats E. // Helv. Chim. Acta. 1958. V. 41. P. 1915–1932.
8. Вашарош Л., Норсеев Ю. В., Халкин В. А. Сообщ. ОИЯИ 12-12188. Дубна, 1979. 14 с.
9. Kolachkovsky A., Norseseyev Y. V. // J. Chromatogr. 1973. V. 84. P. 175–180.

10. *Gesheva M., Kolachkovsky A., Norseyev Y. V.* // J. Chromatogr. 1971. V.60, No.3. P.414–417.
11. *Вашиарош Л., Норсеев Ю. В., Фоминых В. И., Халкин В. А.* // Радиохимия. 1982. Т. 24, №1. С. 95–99.
12. *Норсеев Ю. В., Вашиарош Л., Сюч З.* // Радиохимия. 1988. Т. 30, №2. С. 182–185.
13. *Вашиарош Л., Норсеев Ю. В., Халкин В. А.* Сообщ. ОИЯИ Р6-80-158. Дубна, 1980. 7 с.
14. *Вашиарош Л., Норсеев Ю. В., Халкин В. А.* Сообщ. ОИЯИ Р12-81-511. Дубна, 1981. 6 с.
15. *Норсеев Ю. В., Вашиарош Л.* Сообщ. ОИЯИ Р12-93-129. Дубна, 1993. 6 с.
16. *Норсеев Ю. В.* // Радиохимия. 1995. Т. 37, вып. 3. С. 243–252.
17. *Ожигов Е. П.* // Журн. физ. химии. 1964. Т. 34, № 10. С. 3519–3520.
18. *Hoffman D. C., Lee D. M., Pershina V.* Transactinides and the Future Elements // The Chemistry of the Actinide and Transactinide Elements / Ed. by N. Edelstein, J. Fuger. 4th ed. Dordrecht, The Netherlands: Springer Science + Business Media, 2011. V. 3.
19. *Chang Zhiwei, Li Jiguang, Dong Chenzhong* // J. Phys. Chem. A. 2010. V.114. P.13388–94.
20. *Haire Richard.* Transactinides and the Future Elements // The Chemistry of the Actinide and Transactinide Elements. 3rd ed. Dordrecht, The Netherlands: Springer Science + Business Media, 2006. P. 1724.
21. *Bonchev D., Kamenska V.* // J. Phys. Chem. Am. Chem. Soc. 1981. V. 85, No.9. P. 1177–1186.
22. *Seaborg Glenn T.* Transuranium Element (Chemical Element) // Encyclopedia Britannica. Retrieved 16 March 2010.
23. *Fricke Burkhard.* Superheavy Elements: A Prediction of Their Chemical and Physical Properties // Recent Impact of Physics on Inorganic Chemistry. 1975. V. 21. P. 89–144.
24. *Nash Clinton S.* // J. Phys. Chem. A. 2005. V. 109, No. 15. P. 3493–3500.
25. *Eichler R., Eichler B.* Thermochemical Properties of the Elements Rn, 112, 114, and 118 (PDF), Paul Scherrer Institut. Retrieved 23 Oct. 2010.
26. *Oganessian Yu. Ts.* Discovering Superheavy Element. Oak Ridge National Laboratory. Retrieved 21 April 2017.
27. *Dmitriev S. N., Aksenov N. V., Alibin Y. V. et al.* // Mendeleev Commun. 2014. V. 24, No. 5. P. 253–256.
28. *Aksenov N. V., Steinegger P. et al.* // Eur. Phys. J. A. 2017. V. 53. P. 158–162.
29. *Serov A., Eichler R., Dressier R. et al.* // Radiochim. Acta. 2011. V. 99, No.2. P. 95-101.
30. *Serov A., Eichler R., Dressier R. et al.* // Radiochim. Acta. 2013. V. 101. P. 421–426.
31. *Pershina V.* // J. Phys. Chem. C. 2016. V. 120. P. 20232–20238.
32. *Steinegger P., Asai M., Dressler R., Eichler R., Kaneya Y., Mitsukai A., Nagame Y., Piguat D., Sato T. K., Schadel M., Takeda S., Toyoshima A., Tsukada K., Turler A., Vascon A.* // J. Phys. Chem. C. 2016. V. 120, No. 13. P. 7122–7132.
33. *Eichler B., Rossbach H.* // Radiochim. Acta. 1983. V. 33. P. 121–125.
34. *Rusakov A., Demidov Y., Zaitsevskii A.* // Central Eur. J. Phys. 2013. V. 11. P. 1537–1540.

Получено 1 октября 2019 г.

Редактор *Е. В. Сабеева*

Подписано в печать 11.10.2019.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 0,88. Уч.-изд. л. 1,05. Тираж 170 экз. Заказ № 59784.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований

141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.

E-mail: [publish@jinr.ru](mailto:publish@jinr.ru)

[www.jinr.ru/publish/](http://www.jinr.ru/publish/)