

ISSN 1999-4125 (Print)

ISSN 2949-0642 (Online)

Научная статья

УДК 621.9:538.9:548.7

DOI: 10.26730/1999-4125-2026-2-101-114

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПЛОТНОСТИ МЕТАЛЛОВ И ДЛИНЫ ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ ПО ТИПУ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ

Елкин Иван Сергеевич, Некрасов Александр Николаевич

Кузбасский государственный технический университет имени Т. Ф. Горбачева

* e-mail: eis.fiz@kuzstu.ru

**Информация о статье**

Поступила:

25 июня 2025 г.

Одобрена после
рецензирования:

15 мая 2026 г.

Принята к публикации:

11 июня 2026 г.

Опубликована:

29 июня 2026 г.

Ключевые слова:

плотность, твердое тело, металл, кристаллическая решетка, измерения, длина металлической связи, атомный радиус, молярная масса, длина химической связи

Аннотация.

Представлен современный взгляд на проблему определения плотности простых веществ, твердого тела с кристаллической структурой, металлов, представленных в периодической таблице химических элементов Д. И. Менделеева. Показана взаимосвязь плотности веществ, атомного радиуса, длины химической связи с типом кристаллической структуры вещества. Описываются современные экспериментальные и теоретические способы определения плотности веществ. Указывается нелинейная взаимосвязь между плотностью и молярной массой вещества. Указана достоверность получаемых результатов в предлагаемом методе определения плотности по структуре кристаллической решетки твердого тела. Приведен анализ экспериментальных методов исследования при определении плотности кристаллических тел. Расхождение между результатами определений объясняется методической погрешностью при использовании экспериментального метода с одной стороны и несовершенством кристаллической структуры, наличием нарушений в кристаллической структуре с другой стороны. По результатам исследований разработана программа для ЭВМ, позволяющая определить плотность кристаллических тел, металлов, представленных в периодической таблице химических элементов Д. И. Менделеева, а также радиус атома по типу структуры кристаллической решетки. Результаты расчетов представлены в виде таблиц. Отмечено, что среди экспериментальных методов наибольшую точность дают оптические методы. Расхождение между различными источниками объясняется как влияние дефектов в кристаллической решетке на результаты измерений при использовании экспериментальных методов. Расчеты проведены для металлов, находящихся при нормальных условиях. Работа имеет целью расширение понимания рассматриваемого вопроса об определении плотности твердого тела экспериментальными и расчетными методами как в учебных, так и научных целях.

Для цитирования: Елкин И.С., Некрасов А.Н. Определение плотности металлов и длины химической связи по типу кристаллической решетки // Вестник Кузбасского государственного технического университета. 2026. № 2 (174). С. 101-114. DOI: 10.26730/1999-4125-2026-2-101-114, EDN: AXBIBS

Современное интенсивное развитие машиностроения, материаловедения, металлургии, химических технологий требует совершенствования области физических знаний, направленных на создание новых материалов с заданными физическими характеристиками (плотностью, тепло- и электропроводностью) на

основе представлений об исходных веществах и их соотношении в новом материале. При этом процесс образования композитных материалов характеризуется химическим взаимодействием исходных простых веществ. Одной из основных характеристик процессов указанного взаимодействия является длина химической

связи. По исследованию простых веществ на сегодня созданы и имеют широкое применение точные экспериментальные и комбинированные методы, позволяющие с большей достоверностью определять основные характеристики вещества. В связи с этим необходимо обратить большее внимание на современные методы исследования твердого тела [1–5].

Длина химической связи металлов характеризуется радиусами атомов металлов-участников связи. В то же время экспериментальные определения радиусов

атомов для металлов зачастую сильно разнятся [6–8]. При этом не указывается взаимосвязь с другими величинами, характеризующими основные свойства твердого тела, металлов. Одной из таких величин является плотность простого вещества, твердого тела, металла.

Поскольку плотность вещества является величиной, зависящей от массы, она должна быть зависима от другой основной величины – молярной массы:

$$\rho = \frac{m}{V} = \frac{Mv}{V} = \frac{MN}{VN_A} = \frac{Mn}{N_A}, \quad (1)$$

где m – масса; V – объем; v – количество

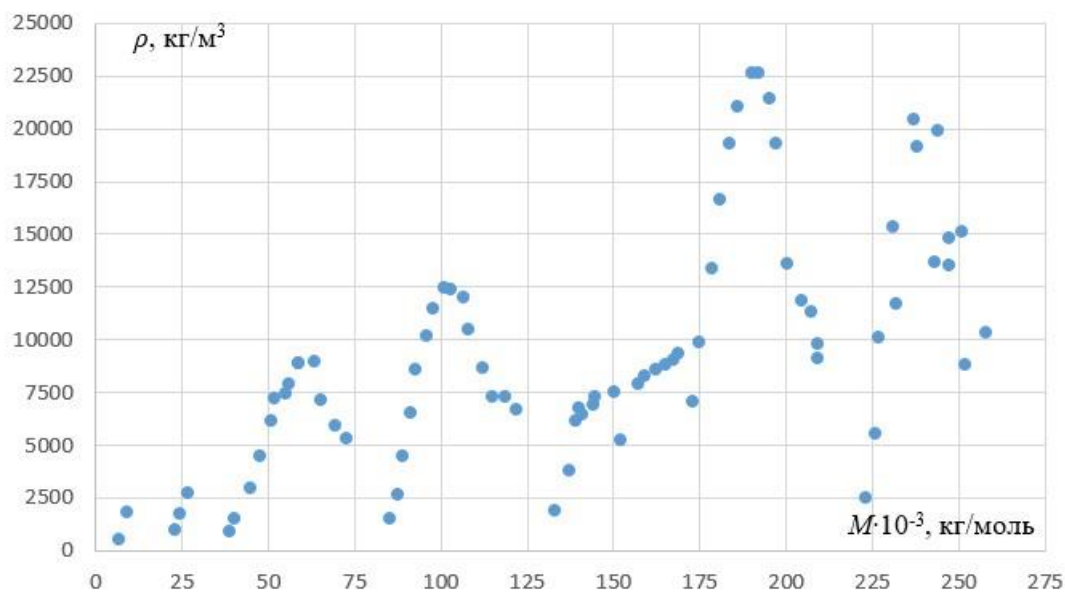


Рис. 1. Зависимость плотности простых веществ от их молярной массы

Fig. 1. Dependence of the density of simple substances on their molar mass

Таблица 1. Основные типы кристаллических решеток металлов

Table 1. Main types of metal crystal lattices

Обозначение в книге Л. Полинга [6]/ в книге К. Сайто [10]	Обозначение в «Химической энциклопедии» [3]	Обозначение решетки в кристаллографии [10], [11], [12]	Число атомов на элементарную ячейку n
A1	α -Cu	ГЦК	4
A2	α -Fe	ОЦК	2
A3	α -Mg	ГПУ	6
A4	Кубическая гранцентрированная типа алмаза	Алмаза	8
Отдельно не выделен/А3'	α -La	Структурная разновидность ГПУ с чередованием слоев по вертикали по типу АВАСАВАС	12 ¹
Не выделен, возможно, А6/Т	Тетрагональная объемно-центрированная кристаллическая решетка	Тетрагональная объемно-центрированная кристаллическая решетка	2

вещества; M – молярная масса; N – количество частиц вещества; $N_A = 6,022 \cdot 10^{23}$ моль⁻¹ – число Авогадро [9]; n – концентрация частиц вещества.

Линейная взаимосвязь между указанными величинами описывается уравнениями молекулярной физики (1). Однако при рассмотрении зависимости плотности твердого тела, металлов от их молярной массы (Рис. 1) гипотеза о линейной зависимости не соответствует действительности. Коэффициент аппроксимации значительно отличен от 1 даже при использовании полиномиальных уравнений высших порядков. На основании этого допустимо сделать вывод о наличии величины, характеризующей плотность вещества по формуле (1), но не имеющей относительно простого полиномиального уравнения.

Если считать зависимость между плотностью и молярной массой линейной, а число Авогадро – величиной постоянной, то вероятно предположить, что для каждого простого вещества, металла, различной является концентрация атомов. Поскольку большинство металлов при нормальных условиях являются твердыми телами, то различие в концентрации обусловлено разными типами кристаллической решетки, присущими металлу при данной температуре. В этом случае взаимосвязанными характеристиками являются периоды кристаллической решетки, длина химической связи, молярная масса и атомные радиусы металла.

В связи с этим актуальным является изучение вопроса об определении плотности твердого тела, металлов, на основании длины химической связи и типа кристаллической решетки вещества. Рассмотрение этого вопроса является важным как в образовательных, так и в научных целях.

Элементарная ячейка кристаллической решетки твердого тела, металла, характеризуется периодами, что позволяет вычислить ее объем, и числом атомов в элементарной ячейке. Это дает возможность определить концентрацию атомов для твердого тела, металла, и вычислить плотность вещества:

$$\rho = \frac{n}{V_{эл}} u A_r, \quad (2)$$

где ρ – плотность вещества, металла; $V_{эл}$ – объем элементарной кристаллической решетки; n – число атомов на элементарную ячейку; $u = 1,660565 \cdot 10^{-27}$ кг – а.е.м. [3]; A_r – относительная атомная масса.

Одними из основных источников, содержащих структурированные сведения о типах кристаллических решеток большого числа металлов и о величинах, которыми они могут быть описаны, являются «Природа химической связи» Л. Полинга [6, стр. 392–393], «Химия и периодическая таблица» К. Сайто [10] и «Химическая энциклопедия» [3]. Источник [4]

отдельно не рассматривается, поскольку по содержанию в большой степени соответствует [3] с уточненными данными плотности. Обобщенные и систематизированные сведения об основных типах кристаллических решеток, чаще всего встречающихся в металлах, и их обозначения представлены в Таблице 1.

В некоторых источниках число атомов на элементарную ячейку n для ГПУ равно 2, а не 6, что подтверждается дальнейшими расчетами [3], [11]. 6 атомов на элементарную ячейку представляется в [12].

Поскольку период кристаллической решетки не является числовым эквивалентом длины химической связи между атомами, необходимы формулы, отображающие отношения между указанными величинами. Так, в [6] указываются длины металлических связей, в [3] – периоды решетки. Для перевода периода кристаллической решетки в длину химической связи необходимо знать расположение атомов в каждом типе кристаллических решеток. Обозначим длину металлической связи, то есть расстояние между центрами двух ближайших атомов, буквой d , и рассмотрим каждый тип кристаллической решетки из Таблицы 1.

Гранецентрированная кристаллическая решетка (ГЦК) (Рис. 2, б) характеризуется тремя равными и взаимно перпендикулярными периодами, поэтому для обозначения используется только один период a . В центре каждой грани находится атом, поэтому две кратчайшие длины связи образуют гипотенузу равнобедренного прямоугольного треугольника, из чего

$$d = \frac{a\sqrt{2}}{2} \Rightarrow a = \frac{2d}{\sqrt{2}}. \quad (3)$$

Объемно-центрированная кристаллическая решетка (ОЦК) (Рис. 2, а) также характеризуется единственным периодом a , имеет один атом в центре куба, но не имеет атомов в центре граней, тогда

$$d = \frac{a\sqrt{3}}{2} \Rightarrow a = \frac{2d}{\sqrt{3}}. \quad (4)$$

Гексагональная плотноупакованная решетка (ГПУ) (Рис. 2, в) характеризуется двумя периодами a и c , поэтому для ее описания используются два значения длин связей. Из структуры решетки видно, что одна связь характеризует расстояние между атомами правильного шестиугольника, разбитого на треугольники, другая – между атомами правильного тетраэдра. Поскольку в основании также находится правильный треугольник, с помощью расчетов было установлено, что длина связей между атомами этого треугольника соответствует длине связей правильных треугольников в шестиугольнике, из чего следует, что, во-первых, a равна длине связи между атомами в треугольниках, во-вторых,

боковые грани тетраэдра представляют собой равнобедренные треугольники. Тогда

$$\frac{1}{2}c = \sqrt{d^2 - \frac{a^2}{3}}; \quad d = \sqrt{\frac{1}{4}c^2 + \frac{a^2}{3}}; \quad (5)$$

$$V_{\text{эл}} = 3\sqrt{3}a^2 \sqrt{d^2 - \frac{a^2}{3}}, \quad (6)$$

где d – длина связи между атомами треугольников разных «уровней» (боковое ребро тетраэдра).

Правильность проведенных по формуле (5) расчетов можно сопоставить с данными, представленными в книге Л. Полинга [6, с. 391]. Отметим, что из 21 элемента, имеющего по данным [6] ГПУ решетку, лишь 5 элементов (Ст, Нf, Со, Ni, Ru) имеют абсолютное отклонение при расчетах в 0,001. При этом учтено, что по данным значений [6, с. 392–393] d – верхнее число, a – нижнее.

Объем ГПУ элементарной ячейки вычисляется по формуле (6). Для расчета объема ячейки для α -La использовались те же формулы, что для расчета ГПУ.

Кристаллическая решетка алмаза (Рис. 3) также является кубической, поэтому для вычисления объема необходим один период a . При этом все атомы образуют тетраэдры с углом $109^\circ 28'$. Тогда, рассматривая любой из треугольников тетраэдра, по теореме косинусов получим зависимость d от a :

$$\left(\frac{\sqrt{2}a}{2}\right)^2 = 2d^2 - 2d^2 \cos(109^\circ 28') = 2d^2(1 - \cos(109^\circ 28'));$$

$$a = \frac{2\sqrt{2d^2(1 - \cos(109^\circ 28'))}}{\sqrt{2}} = 2d\sqrt{1 - \cos(109^\circ 28')}. \quad (7)$$

Тетрагональная кристаллическая решетка в [3] представлена модификацией I , то есть решетка объемно-центрированная, характеризуется двумя периодами, из чего следует, что половина диагонали прямоугольного параллелепипеда есть длина металлической связи. Тогда

$$2d = \sqrt{2a^2 + c^2} \Rightarrow c = \sqrt{4d^2 - 2a^2}. \quad (8)$$

Для расчета плотностей воспользуемся формулой (2), при этом объем элементарной ячейки высчитывается для формул (3), (4) и (7), (8) исходя из формы ячеек. Поскольку в работе Л. Полинга [6] не указаны температуры, для которых характерно существование того или иного типа кристаллических решеток, при расчете плотности будут использоваться те кристаллические решетки, которые характерны для веществ, взятых при нормальных условиях, и описаны в [3] в случае, если простое вещество имеет более одного типа кристаллической решетки в зависимости от фазового состояния. Некоторые плотности рассчитаны с учетом данных, приведенных в [3], на основе периодов решеток без определения длин химической связи

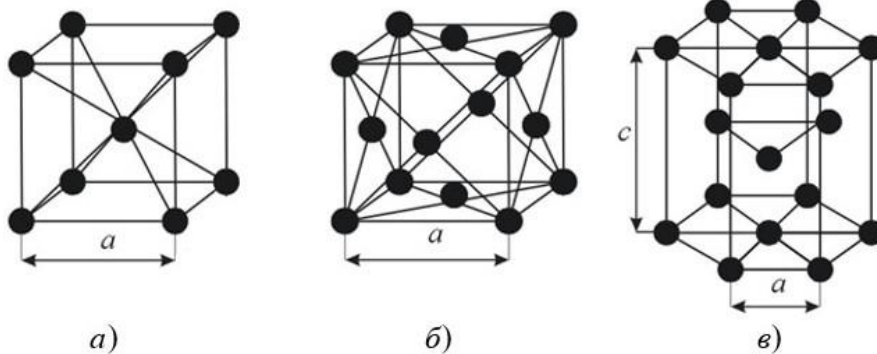


Рис. 2. Вид решеток для ОЦК(а), ГЦК(б) и ГПУ(в)
Fig. 2. View of gratings for BCC(a), FCC(b) and GPU(c)

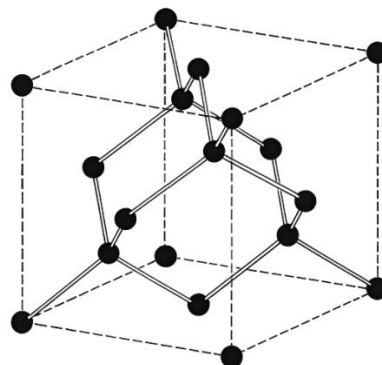


Рис. 3. Кубическая гранецентрированная решетка типа алмаза
Fig. 3. Cubic face-centered diamond-type lattice

(Mn, Ga, Sn, Sb, Sm, Bi, U, Np). Значения для относительной атомной массы для расчетов взяты из источников [3], [4]. Результаты расчетов

плотностей и относительные расхождения представлены в Таблице 2.

Таблица 2. Теоретические значения плотностей простых веществ, металлов
Table 2. Theoretical values of densities of simple substances and metals

Порядковый номер	Обозначение химического элемента в ПСХЭ Д. И. Менделеева	Значение плотности по данным «Химической энциклопедии» [3] (теоретическое значение плотности), кг/м ³	Расчетное значение плотности по данным Л. Полинга [6], кг/м ³	Расчетное значение плотности идеального кристалла по данным из «Химической энциклопедии» [3], кг/м ³	Относительное расхождение между теоретическим и расчетным значением по данным [6], %	Относительное расхождение между теоретическим и расчетным значением плотности для идеального кристалла, %
3	Li	533	532,94	537,66	0,01	0,87
4	Be	1816	1868,80	1844,68	2,91	1,58
11	Na	968,42	963,35	966,37	0,52	0,21
12	Mg	1740	1748,45	1739,55	0,49	0,03
13	Al	2698,9	2714,26	2717,33	0,57	0,68
19	K	862,9	856,39	850,83	0,75	1,40
20	Ca	1540	1548,23	1532,21	0,53	0,51
21	Sc	2989		2989,74		0,02
22	Ti	4505	4452,74	4489,01	1,16	0,35
23	V	6110	6061,35	6118,04	0,80	0,13
24	Cr	7190	7239,05	7195,24	0,68	0,07
25	Mn	7440	7267,84	7474,09	2,31	0,46
26	Fe	7874	7917,24	7875,04	0,55	0,01
27	Co	8900	8825,78	8808,11	0,83	1,03
28	Ni	8900	8960,51	8909,87	0,68	0,11
29	Cu	8933,31	8989,34	8934,68	0,63	0,02
30	Zn	7133	7179,42	7138,06	0,65	0,07
31	Ga	5904		5915,13		0,19
32	Ge	5330	5357,04	5318,31	0,51	0,22
37	Rb	1532	1596,22	1532,72	4,19	0,05
38	Sr	2630	2595,26	2581,80	1,32	1,83
39	Y	4472	4370,34	4472,17	2,27	0,00
40	Zr	6510,7	6574,00	6512,09	0,97	0,02
41	Nb	8570	8630,14	8632,98	0,70	0,73
42	Mo	10200	10284,21	10291,93	0,83	0,90
43	Tc	11487		11414,50		0,63
44	Ru	12450	12447,64	12365,66	0,02	0,68
45	Rh	12410	12498,62	12427,26	0,71	0,14
46	Pd	12020	12082,79	12006,69	0,52	0,11
47	Ag	10491	10560,36	10503,02	0,66	0,11
48	Cd	8650	8699,31	8646,52	0,57	0,04
49	In	7310	7343,74	7292,78	0,46	0,24
50	Sn	7280		7332,60		0,72
51	Sb	6690		6696,65		0,10

Продолжение таблицы 2
Continuation of table 2

Порядковый номер	Обозначение химического элемента в ПСХЭ Д. И. Менделеева	Значение плотности по данным «Химической энциклопедии» [3] (теоретическое значение плотности), кг/м ³	Расчетное значение плотности по данным Л. Полинга [6], кг/м ³	Расчетное значение плотности идеального кристалла по данным из «Химической энциклопедии» [3], кг/м ³	Относительное расхождение между теоретическим и расчетным значением по данным [6], %	Относительное расхождение между теоретическим и расчетным значением плотности для идеального кристалла, %
55	Cs	1904	1992,63	1905,95	4,65	0,10
56	Ba	3780	3616,30	3626,84	4,33	4,05
57	La	6162	6233,43	6165,94	1,16	0,06
58	Ce	6768	6839,57	6769,42	1,06	0,02
59	Pr	6475	6819,19	6770,38	5,32	4,56
60	Nd	6908	7033,09	7007,46	1,81	1,44
61	Pm	7260		7161,11		1,36
62	Sm	7536		7546,00		0,13
63	Eu	5245		5246,40		0,03
64	Gd	7895		7888,15		0,09
65	Tb	8272		8254,96		0,21
66	Dy	8559		8706,75		1,73
67	Ho	8799		8801,03		0,02
68	Er	9062	7538,62	9064,17	16,81	0,02
69	Tm	9318		9320,24		0,02
70	Yb	7020		6960,61		0,85
71	Lu	9849		9850,15		0,01
72	Hf	13350	13170,33	13354,59	1,35	0,03
73	Ta	16600	16790,72	16783,32	1,15	1,10
74	W	19300	19384,11	19369,49	0,44	0,36
75	Re	21010	21142,97	20467,63	0,63	2,58
76	Os	22610	22709,71	22575,53	0,44	0,15
77	Ir	22650	22705,74	22571,23	0,25	0,35
78	Pt	21450	21578,62	21511,93	0,60	0,29
79	Au	19320	19403,99	19283,02	0,43	0,19
81	Tl	11849	11927,87	11873,69	0,67	0,21
82	Pb	11341,5	11427,15	11423,91	0,76	0,73
83	Bi	9780		9770,04		0,10
84	Po	9136		9156,63		0,23
88	Ra	5500		5502,09		0,04
89	Ac	10100		10066,21		0,33
90	Th	15370		15381,87		0,08
91	Pa	11724	11777,33	11727,55	0,45	0,03
92	U	19120	19599,19	19045,67	2,51	0,39
93	Np	20450		20527,99		0,38
95	Am	13670		13789,17		0,87
96	Cm	13510		13683,42		1,28
97	Bk	14800		13152,50		11,13
98	Cf	15100		15219,84		0,79
99	Es	8840		8807,56		0,37

Таблица 3. Длины металлической связи
Table 3. Metal bond lengths

Порядковый номер	Обозначение химического элемента в ПСХЭ Д. И. Менделеева	Длины связи по данным Л. Полинга [6], Å		Длины связи, рассчитанные на основе периодов кристаллической решетки по данным «Химической энциклопедии» [3], Å		Длина металлической связи для идеального кристалла на основании данных плотности из «Химической энциклопедии» [3], Å	
3	Li	3,04		3,0311		3,0399	
4	Be	2,268	2,224	2,2866	2,2255	2,2986	2,2372
11	Na	3,72		3,7161		3,7135	
12	Mg	3,202	3,19	3,21	3,1929	3,2097	3,1926
13	Al	2,858		2,8569		2,8634	
19	K	4,618		4,628		4,6064	
20	Ca	3,932		3,9457		3,939	
21	Sc			3,3085	3,2537	3,3088	3,254
22	Ti	2,953	2,915	2,951	2,9014	2,9475	2,898
23	V	2,627		2,6189		2,62	
24	Cr	2,493		2,4981		2,4987	
26	Fe	2,478		2,4824		2,4825	
27	Co	2,507	2,499	2,505	2,5043	2,4963	2,4957
28	Ni	2,487		2,4917		2,4926	
29	Cu	2,551		2,5562		2,5563	
30	Zn	2,66	2,907	2,6649	2,9129	2,6655	2,9136
32	Ge	2,445		2,4509		2,4491	
37	Rb	4,87		4,9363		4,9371	
38	Sr	4,296		4,3035		4,277	
39	Y	3,663	3,595	3,6474	3,5559	3,6474	3,556
40	Zr	3,223	3,166	3,231	3,1781	3,2312	3,1783
41	Nb	2,853		2,8527		2,8597	
42	Mo	2,72		2,7193		2,7275	
43	Tc			2,737	2,705	2,7312	2,6993
44	Ru	2,699	2,645	2,7054	2,6504	2,6993	2,6444
45	Rh	2,684		2,6891		2,6904	
46	Pd	2,745		2,7508		2,7498	
47	Ag	2,884		2,8892		2,8903	
48	Cd	2,943	3,287	2,979	3,2937	2,9786	3,2933
49	In	3,242	3,37	3,2512	3,3768	3,2486	3,3741
55	Cs	5,24		5,3183		5,3201	
56	Ba	4,343		4,3388		4,2794	
57	La	3,754	3,727	3,772	3,7363	3,7728	3,7371
58	Ce	3,637		3,6495		3,6498	
59	Pr	3,657	3,638	3,6725	3,6401	3,7275	3,6947
60	Nd	3,657	3,62	3,6579	3,6279	3,6754	3,6452
61	Pm			3,65	3,5949	3,6334	3,5785
63	Eu			3,9681		3,9685	
64	Gd			3,636	3,573	3,6349	3,572
65	Tb			3,601	3,5251	3,5985	3,5227

Продолжение таблицы 3
Continuation of table 3

Порядковый номер	Обозначение химического элемента в ПСХЭ Д. И. Менделеева	Длины связи по данным Л. Полинга [6], Å		Длины связи, рассчитанные на основе периодов кристаллической решетки по данным «Химической энциклопедии» [3], Å		Длина металлической связи для идеального кристалла на основании данных плотности из «Химической энциклопедии» [3], Å	
66	Dy			3,5603	3,4923	3,5807	3,5123
67	Ho			3,5773	3,4857	3,5776	3,486
68	Er	3,74	3,73	3,5588	3,4679	3,5591	3,4682
69	Tm			3,5375	3,4474	3,5378	3,4477
70	Yb			3,8793		3,8684	
71	Lu			3,5031	3,4342	3,5032	3,4343
72	Hf	3,2	3,139	3,1883	3,1216	3,1887	3,122
73	Ta	2,854		2,8544		2,8649	
74	W	2,735		2,7357		2,739	
75	Re	2,76	2,735	2,76	2,7899	2,736	2,7656
76	Os	2,73	2,67	2,7353	2,6754	2,7339	2,674
77	Ir	2,709		2,7144		2,7112	
78	Pt	2,769		2,7719		2,7745	
79	Au	2,878		2,884		2,8822	
81	Tl	3,45	3,404	3,4566	3,4079	3,459	3,4102
82	Pb	3,492		3,4923		3,5008	
84	Po			3,359		3,3615	
87	Fr					5,7733	
88	Ra			4,4583		4,4589	
89	Ac			3,7554		3,7513	
90	Th	3,59		3,5951		3,5954	
91	Pa			3,925	3,2131	3,926	3,2139
95	Am			3,468	3,4506	3,478	3,4606
96	Cm			3,496	3,4783	3,5109	3,4931
97	Bk			3,5334		3,3971	
98	Cf			3,39	3,3774	3,3989	3,3863
99	Es			4,0659		4,0609	

В Таблице 2 представлены значения для 75 химических элементов, металлов. Из таблицы исключены ртуть Hg, поскольку при нормальных условиях данный металл является жидкостью, и плутоний (Pu), поскольку, используя данные, приведенные в [3], при расчетах не удалось получить значение, достаточно близкое к экспериментальным значениям плотности для данного вещества. В Таблице 2 также отсутствует франций Fr, в источниках [3] и [6] нет данных о периодах кристаллической решетки или длинах металлической связи. Из 75 элементов 48 имеют расчетные значения плотности как в книге Л. Полинга [6], так и в «Химической энциклопедии» [3]. Для 10 из 48

химических элементов расхождение плотностей по Л. Полингу меньше, чем по «Химической энциклопедии» [3]. Вместе с тем среднее расхождение с практическим значением плотности по данным Л. Полинга [6] составляет более 1,5 %, в то время как расхождение по данным, представленным «Химической энциклопедией» [3], не превышает 0,7%, что, с одной стороны, свидетельствует о том, что данные энциклопедии более точны по сравнению с данными [6], а с другой стороны, позволяет использовать данные «Химической энциклопедии» [3] для более точного расчета плотности твердого тела.

Таблица 4. Атомные радиусы металлов

Table 4. Atomic radii of metals

Порядковый номер	Обозначение химического элемента в ПСХЭ Д. И. Менделеева	Расчетный радиус атома для идеального кристалла, Å	Справочный радиус атома [3], Å
3	Li	1,52	1,57
4	Be	1,119	1,13
11	Na	1,857	1,92
12	Mg	1,596	1,6
13	Al	1,432	1,43
19	K	2,303	2,313
20	Ca	1,97	1,97
21	Sc	1,627	1,64
22	Ti	1,449	1,49
23	V	1,31	1,34
24	Cr	1,249	1,27
26	Fe	1,241	1,26
27	Co	1,248	1,25
28	Ni	1,246	1,24
29	Cu	1,278	1,28
30	Zn	1,333	1,39
32	Ge	1,225	1,39
37	Rb	2,469	2,48
38	Sr	2,139	2,15
39	Y	1,778	1,81
40	Zr	1,589	0
41	Nb	1,43	1,45
42	Mo	1,364	1,4
43	Tc	1,35	1,358
44	Ru	1,322	1,34
45	Rh	1,345	1,342
46	Pd	1,375	1,37
47	Ag	1,445	1,45
48	Cd	1,489	1,46
49	In	1,624	1,66
55	Cs	2,66	2,66
56	Ba	2,14	2,21
57	La	1,869	1,87
58	Ce	1,825	1,83
59	Pr	1,847	1,82
60	Nd	1,823	1,82
61	Pm	1,789	1,82
63	Eu	1,984	2,02
64	Gd	1,786	1,79
65	Tb	1,761	1,77
66	Dy	1,756	1,77
67	Ho	1,743	1,76

Продолжение таблицы 3

Continuation of table 3

Порядковый номер	Обозначение химического элемента в ПСХЭ Д. И. Менделеева	Расчетный радиус атома для идеального кристалла, Å	Справочный радиус атома [3], Å
68	Er	1,734	1,75
69	Tm	1,724	1,74
70	Yb	1,934	1,93
71	Lu	1,717	1,74
72	Hf	1,561	1,59
73	Ta	1,432	1,46
74	W	1,37	1,368
75	Re	1,368	1,373
76	Os	1,337	1,35
77	Ir	1,356	1,35
78	Pt	1,387	1,38
79	Au	1,441	1,44
81	Tl	1,705	1,71
82	Pb	1,75	1,75
84	Po	1,681	1,53
87	Fr	2,887	2,9
88	Ra	2,229	2,35
89	Ac	1,876	1,88
90	Th	1,798	1,798
91	Pa	1,607	1,63
95	Am	1,73	1,74
96	Cm	1,747	1,75
97	Bk	1,699	
98	Cf	1,693	1,69
99	Es	2,03	2,03

При определении расчетной плотности берклия Bk по данным «Химической энциклопедии» [3] установлено, что плотность с гексагональной кристаллической решеткой более соответствует действительному значению плотности, чем значение, представленное в Таблице 2 (кристаллическая решетка гранцентрированная кубическая). Однако температура полиморфного перехода намного выше температуры при нормальных условиях для данного элемента.

Поскольку представленные плотности для идеального кристалла оказываются как выше, так и ниже теоретических значений, расхождения в плотности объясняются дефектами реального кристалла. Если принять, что периоды элементарных решеток определены в «Химической энциклопедии» [3] с достаточной точностью, а весы, на которых производились измерения ρ , исправны и обладают достаточной точностью, то незначительное отклонение

значений может быть объяснено как с точки зрения химии, так и с точки зрения кристаллографии. С точки зрения химических представлений изменение плотности может быть объяснено химической активностью металлов, в особенности щелочных металлов, образованием соединений металла с компонентами воздуха (оксидная пленка, твердые растворы) [3]. С точки зрения кристаллографии заниженное практическое значение плотности может быть следствием наличия вакансий, нарушений в структуре кристаллической решетки, отсутствием атомов в кристаллической решетке либо дислокацией, обрывов атомных плоскостей в кристалле в кристаллической структуре металла [9]. Завышенное значение может быть объяснено наличием междоузельных или примесных атомов в структуре кристалла (поскольку при получении металлов остается некоторый процент примесей) [9]. В расчетах предполагается, что у кристаллов нет примесей, дефектов, кристаллы

однородны по своему строению, идеальны по строению кристаллической решетки.

В случае, если принять практические значения плотности как верные, возможно определить более точную длину химической связи для каждого из химических элементов. Результаты расчетов представлены в Таблице 3.

При расчете гексагональных и тетрагональных кристаллических решеток, то есть решеток, характеризующихся двумя периодами, для определения длин химической связи отношение c/a считалось постоянным, определенным по данным «Химической энциклопедии» [3] ввиду более позднего срока издания и, как следствие этого, вероятности наличия более точного оборудования, используемых методов и большего количества химических элементов, имеющих более достоверные определенные значения периодов. В Таблице 3 представлен период, в котором длина связи внутри атомной плоскости a указывается в первой ячейке, длина связи между атомными плоскостями d – во второй.

При сравнении данных длин химических связей для рения Re установлено не отмеченное в работе Л. Полинга [6] и обнаруженное только при определении расчетных значений длин связи отношение $d > a$, характерное для Zn и Cd. При этом отношение c/a приблизительно равно 1,66, то есть значительно меньше отношений c/a для указанных двух металлов, но превосходящее отношение для остальных элементов с гексагональной и двойной гексагональной кристаллической решеткой. В то же время отношение c/a для протактиния Pa не превышает 1 (приблизительно 0,825). В связи с этим наблюдается значительное различие между длинами связи a и d .

В ходе вычислений гипотетически предсказана длина металлической связи для франция Fr. Франций относится к щелочным металлам, каждый из которых, согласно источникам [3], [6], [10], имеет объемно-центрированную кубическую кристаллическую решетку. Предполагается, что данный тип кристаллической решетки характерен для всех щелочных металлов, в том числе и для франция, металлические свойства которого являются наибольшими.

На основании приведенных в Таблице 3 данных были определены атомные радиусы для указанных здесь металлов. Дополнительно были использованы справочные радиусы атомов, взятые из «Химической энциклопедии» [3]. Результаты расчетов представлены в Таблице 4.

Из 65 справочных значений радиусов атомов только 22 совпадает с полученными расчетными значениями при их округлении, остальные имеют расхождения, в основном не превышающие 1–2 пм (Таблица 4).

Вместе с тем несовпадение большого числа атомных радиусов ставит вопрос о верификации – с одной стороны, получаемых с помощью рефрактометрических методов, например, метода, основанного на измерении рефракции, и метода, основанного на связи диэлектрической проницаемости или показателя преломления с поляризуемостью α микрочастиц, рентгеноструктурных, столкновительных и иных практических методов измерений атомных радиусов [13 – 16]; с другой стороны, получаемых экспериментальных значений плотности различными методами.

На основе данных исследований нами разработана программа для ЭВМ [17]. Программа позволяет рассчитать плотность вещества, определить радиус атомов для большинства известных химических элементов, представленных в таблице Д. И. Менделеева. Интерфейс программы также предлагает описание физических и химических свойств химических элементов, обладающих кристаллической структурой. Имеет целью дополнить учебный курс по физике и общей химии в вузе.

Результаты: анализируя полученные данные, показано, что на основе данных о структуре кристаллической решетки можно определить плотность твердого тела, радиус химической связи для основных металлов, представленных в периодической таблице химических элементов Д. И. Менделеева. При этом результаты расчетов сопоставимы с результатами экспериментальных исследований других авторов. Относительное расхождение составляет менее 2–3%, а в некоторых отдельных случаях менее 0,05%.

Современные экспериментальные методы исследования, информационные технологии, технические возможности ЭВМ позволяют с большей точностью определять основные физические характеристики твердых тел, металлов, а также композитных материалов и сплавов, и решать обратные задачи в зависимости от целей научных исследований и практических задач.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Рогозин, В. Д., Слаутин О. В., Проничев Д. В. Теория строения материалов. Физика металлов: учеб.-метод. пособие. Волгоград : ВолгГТУ, 2022. 136 с.
2. Гиричева Н. И., Федоров М. С. Избранные главы квантовой химии : учеб. пособие. Иваново : Иван. гос. унт, 2021. 108 с.
3. Химическая энциклопедия: в 5 т. / под. ред. Кнунянц И. Л., Кулов Н. Н., Зефирова Н. С. Москва : Большая российская энциклопедия (Советская энциклопедия), 1988–1998.
4. Раков Э. Г. Химические элементы // Большая российская энциклопедия: научно-

образовательный портал. URL: <https://bigenc.ru/c/khimicheskie-elementy-b1370e/?v=4338097>. Дата публикации: 30.06.2022. Дата обновления: 22.07.2022

5. Степанов Н. Ф. Атомные радиусы // Большая российская энциклопедия : научно-образовательный портал URL: <https://bigenc.ru/c/atomnye-radiusy-fa9757/?v=7372110>. Дата публикации: 25.05.2023

6. Полинг Л. Природа химической связи / перевод с английского Дяткиной М. Е. Москва : Государственное научно-техническое издание химической литературы, 1947. 438 с.

7. Сироткин О. С., Калашников А. В. Специфика электронной плотности гомоядерных связей элементов, образующих металлы и неметаллы. // Вестник Казанского технологического университета. 2010. № 7. С. 35–44.

8. Неверов А. С. Расчет атомных радиусов металлов исходя из их плотности // Хімія: Проблеми Викаданя. 2006. № 6. С. 28–33.

9. Трофимова Т. И. Курс физики: учебное пособие для вузов. 8-е изд., стер. Москва : Высшая школа, 2004. 544 с.

10. Сайто К., Хаякава С., Такеи Ф., Ямадера Х. Химия и периодическая таблица. Под ред. Сайто К.; пер. с японск. Алашева Ф. Д. Москва : Мир, 1982. 320 с.

11. Ожерельев В. В., Костюченко А. В., Канькин С. В., Донцов А. И. Методы исследования структуры твердых тел : учебное пособие. Воронеж : ФБГОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», 2021. 108 с.

12. Картонова Л. В., Кечин В. А. Основы

материаловедения металлических и неметаллических веществ : учебное пособие // Владим. гос. ун-т им. А. Г. и Н. Г. Столетовых. Владимир : Изд-во ВлГУ, 2014. 176 с.

13. Патент № 2359248 Российская Федерация МПК G01N 15/02 (2006.01) Способ измерения радиуса и энергии связи атомов и ионов: № 2007107014: заявл. 26.02.2007: опубл. 20.06.2009 / Потапов А. А.; заявитель ИДСТУ СО РАН. 14 с.

14. Филиппова В. П., Блинова Е. Н., Шурыгина Н. А. К вопросу об искажениях кристаллической решетки твердых растворов // Проблемы черной металлургии и материаловедения. 2025. № 2. С. 44–52.

15. Филиппова В. П., Блинова Е. Н., Шурыгина Н. А., Корниенков Б. А. К вопросу о точности определения периода кристаллической решетки деформированных металлов и твердых растворов методом рентгеновской дифрактометрии // В сборнике: Физико-механические испытания, прочность и надежность современных конструкционных и функциональных материалов. Материалы XVII Всероссийской конференции по испытаниям и исследованиям свойств материалов «ТестМат». Москва, 2025. С. 354–370.

16. Lider V. V. Precise determination of crystal lattice parameters // Uspekhi Fizicheskikh Nauk, Russian Academy of Sciences. Physics – Uspekhi. 2020. № 63(9). Pp. 907–928.

17. Программа для ЭВМ № 2025618125 Российская Федерация. «Atom»: № 2025616262: заявл. 24.03.2025: опубл. 02.04.2025 / Елкин. И. С., Некрасов А. Н.; заявитель КузГТУ им. Т. Ф. Горбачева. 1 с.

© 2026 Авторы. Эта статья доступна по лицензии Creative Commons «Attribution» («Атрибуция») 4.0 Всемирная (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>)

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Об авторах:

Елкин Иван Сергеевич, канд. техн. наук, доцент, Кузбасский государственный технический университет имени Т. Ф. Горбачева, 650000, Россия, г. Кемерово, ул. Весенняя, 28, e-mail: eis.fiz@kuzstu.ru

Некрасов Александр Николаевич, студент, Кузбасский государственный технический университет имени Т. Ф. Горбачева, e-mail: nekrasovan_official@mail.ru

Заявленный вклад авторов:

Елкин Иван Сергеевич – постановка исследовательской задачи, научный менеджмент, концептуализация исследования, написание текста, выводы.

Некрасов Александр Николаевич – проведение расчетов, разработка программы, написание текста, обзор литературы.

Все авторы прочитали и одобрили окончательный вариант рукописи.

Original article

DETERMINATION OF METAL DENSITY AND CHEMICAL BOND LENGTH BY TYPE OF CRYSTAL LATTICE

Ivan S. Elkin, Alexander N. Nekrasov

T.F. Gorbachev Kuzbass State Technical University

* for correspondence: eis.fiz@kuzstu.ru

**Article info**

Received:

25 June 2025

Accepted for publication:

15 May 2026

Accepted:

11 June 2026

Published:

29 June 2026

Keywords: density, solid, metal, crystal lattice, measurements, metal bond length, atomic radius, molar mass, chemical bond length

Abstract.

A modern view of the problem of determining the density of simple substances, solids with a crystalline structure, and metals represented in the periodic table of chemical elements by D. I. Mendeleev is presented. The relationship of the density of substances, atomic radius, and chemical bond length with the type of crystalline structure of a substance is shown, and modern experimental and theoretical methods for determining the density of substances are described. The nonlinear relationship between the density and the molar mass of a substance is indicated. The reliability of the results obtained in the proposed method for determining density from the structure of the crystal lattice of a solid is indicated. An analysis of experimental studies in determining the density of crystalline bodies is presented. The discrepancy between the results of the definitions is explained by the methodological error when using the experimental method, on the one hand, and the imperfection of the crystal structure, the presence of irregularities in the crystal structure, on the other hand. Based on the research results, a computer program has been developed that makes it possible to determine the density of crystalline bodies and the radius of an atom by the type of crystal lattice structure. The results of the calculations are presented in the form of tables. It is noted that optical methods provide the highest accuracy among the experimental methods. The discrepancy between different sources is explained as the influence of defects in the crystal lattice on the measurement results using experimental methods. The calculations were performed for metals under normal conditions. The aim of this work is to expand the understanding of the issue of determining the density of a solid body for both educational and scientific purposes.

For citation: Elkin I.S., Nekrasov A.N. Determination of metal density and chemical bond length by type of crystal lattice. *Vestnik Kuzbasskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta*=Bulletin of the Kuzbass State Technical University. 2026; 2(174):101-114. (In Russ., abstract in Eng.). DOI: 10.26730/1999-4125-2026-2-101-114, EDN: AXBIBS

REFERENCES

1. Rogozin V.D., Slautin O.V., Pronichev D.V. Teoriya stroeniya materialov. Fizika metallov [Theory of the structure of the metals. Physics of metals]. Volgograd: VolgGTU: 2022. 136 p.
2. Giricheva N.I., Fedorov M.S. Izbrannye glavy kvantovoy khimii [Selected chapters of quantum chemistry]. Ivanovo: Ivanovskiy gosudarstvennyy universitet; 2021. 108 p.
3. Khimicheskaya entsyklopediya: v 5 t. [Chemical encyclopedia: in 5 vol.]. Edited by Knunyants I.L., Kulov N.N. Zefirov N.S. Moscow: Bolshaya rossiyskaya entsyklopediya (Sovetskaya entsyklopediya); 1988–1998.
4. Rakov E.G. Khimicheskie element [Chemical elements]. Bolshaya rossiyskaya entsyklopediya: nauchno-obrazovatelnyy portal [Big russian

encyclopedia: scientific and educational portal]. URL: <https://bigenc.ru/c/khimicheskie-elementy-b1370e/?v=4338097> (published: 30.06.2022; updated: 22.07.2022)

5. Stepanov N.F. Atomnye radiusy [Atomic radii]. Bolshaya rossiyskaya entsyklopediya: nauchno-obrazovatelnyy portal [Big russian encyclopedia: scientific and educational portal]. URL: <https://bigenc.ru/c/atomnye-radiusy-fa9757/?v=7372110> (published: 25.05.2023).

6. Pauling L. Priroda khimicheskoy svyazi [The Nature of the Chemical Bond]. Translated by Dyatkina M.E. Moscow: Gosudarstvennoe nauchno-tekhnicheskoe izdanie khimicheskoy literatury; 1947. 438 p.

7. Sirotkin O.S., Kalashnikov A.V. Spetsifika elektronnoy plotnosti gomoyadernykh svyazey

elementov, obrazuyushchikh metally i nenetally [The specifics of the electron density of homonuclear bonds of elements forming metals and nonmetals]. *Vestnik kazanskogo tekhnologicheskogo universiteta [Bulletin of Kazan technological university]*. 2010; 7:35–44.

8. Neverov A.S. Raschet atomnykh radiusov metallov islhodya iz ikh plotnosti [Calculation of atomic radii of metals based on their density]. *Chemistry: Teaching Issues*. 2006; 6:28–33.

9. Trofimova T. I. Kurs fiziki: uchebnoe posobie dlya vuzov – 8-e izd. ster. [Physics course: textbook for universities – 8-th ed. ster]. Moscow: Visshaya shkola; 2004. 544 p.

10. Saito K., Hayakawa S., Takei F., Yamadera H. Khimiya i periodicheskaya tablitsa [Chemistry and Periodic Table]. Edited by K. Saito. Translated by Alashev F.D. Moscow: Mir; 1982. 320 p.

11. Ozherelev V.V., Kostyuchenko A.V., Kannykin S.V., Dontsov A.I. Metody issledovaniya struktury tverdykh tel [Methods of studying the structure of solids]. Voronezh: FBGOU VO «Voronezhskiy gosudarstvennyy universitet»; 2021. 108 p.

12. Kartonova L.V., Kechin V.A. Osnovy materialovedeniya metallicheskikh i ne metallicheskikh veshchestv [Fundamentals of materials science of metallic and non-metallic substances]. Vladimirskiy gosudarstvennyy universitet imeni A.G. and N.G. Stoletovykh. Vladimir: izdatelstvo VIGU; 2014. 176 p.

13. Potapov A.A. Patent № 2359248 Russian Federation Int. Cl. G01N 15/02 (2006.01) Sposob izmereniya radiusa i energii svyazi atomov i ionov [Method for measurement of radius and energy of atoms and ions coupling]: № 2007107014: effective date.

26.02.2007, published: 20.06.2009. Proprietor: Institut dinamiki sistem i teorii upravleniya Sibirskogo otdeleniya Rossijskoj akademii nauk (IDSTU SO RAN). 14 p.: il.

14. Filippova V.P., Blinova E.N., Shurygina N.A. K voprosu ob iskazheniyakh kristallicheskoj reshetki tverdykh rastvorov [On the issue of the distortion of the crystal lattice of solid solutions]. *Problemy chernoy metallurgii I materialovedeniya [Problems of the ferrous metallurgy and material science]*. 2025; 2:44–52.

15. Filippova V.P., Blinova E.N., Shurygina N.A., Komienkov B.A. K voprosu o tochnosti opredeleniya perioda kristallicheskoj reshetki deformirovannykh metallov i tverdykh rastvorov metodom rentgenovskoy diffraktometrii [On the issue of the accuracy of determining the lattice period of metals and solid solutions by X-ray diffractometry]. *V sbornike: Fiziko-mekhanicheskie ispytaniya, prochnost i nadezhnost sovremennykh konstrukcionnykh i funktsionalnykh materialov. Materialy XVII Vserossiyskoj konferentsii po ispytaniyam i issledovaniyam svoystv materialov «TestMat» [In the collection: Physical and mechanical testing, strength, and reliability of modern structural and functional materials. Materials of the XVII All-Russian conference on testing and research of material properties «TestMat»]*. Moscow, 2025. Pp. 354–370.

16. Lider V.V. Precise determination of crystal lattice parameters. *Uspekhi Fizicheskikh Nauk, Russian Academy of Sciences, Physics – Uspekhi*. 2020; 63(9):907–928.

17. Elkin I.S., Nekrasov A.N. Computer program № 2025618125 Russian Federation. «Atom»: № 2025616262: effective date: 24.03.2025, published 02.04.2025. Proprietor: KuzGTU im. T. F. Gorbacheva. 1 p.

© 2026 The Authors. This is an open access article under the CC BY license (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>). The authors declare no conflict of interest.

About the authors:

Ivan S. Elkin, C. Sc. in Engineering, associate professor, T.F. Gorbachev Kuzbass State Technical University, 28, Vesennyya St., Kemerovo, 650000, Russian Federation, e-mail: eis.fiz@kuzstu.ru

Alexander N. Nekrasov, student, T.F. Gorbachev Kuzbass State Technical University, 28, Vesennyya St., Kemerovo, 650000, Russian Federation, e-mail: nekrasovan_official@mail.ru

Contribution of the authors:

Ivan S. Elkin – formulation of research problems, scientific management, conceptualization of research, writing of text, conclusions.

Alexander N. Nekrasov – performing calculations, developing a program, writing a text, reviewing literature.

All authors have read and approved the final manuscript.

