

TO A PROBLEM OF STABILITY OF ATOMIC AND MOLECULAR SYSTEMS (FULLERENES, HYDROCARBONS, CHEMICAL ELEMENTS, MAGIC NUCLEI)

Volkov I.A.*, Kushmar I.A.

All-Russia Petroleum Research Exploration Institute (VNIGRI), Liteiny pr., 39, St.-Petersburg, 191104, Russia

By analogy with the Balmer's spectrum formula the simple empirical formula for number N of atoms in relatively stable carbon clusters (C_N)

$$N = \frac{k(k+1)(k+2)}{k-2}, \quad (1)$$

(N, k – natural numbers)

and the series corresponding to it:

$N=60, 70, 84, 120, 165(330), 280, 819(1638), (2)$

for odd-numbered clusters supplemented (in brackets) by their twice value have been used as the starting result.

Specificity of correlation (2) with the previous [1] theoretical results has been discussed.

A correlation between mass-spectrum data published in [2, 3] and supplemented by the envelope (Fig.1) and by an indication of local maxima in the neighbourhood of points $N=165$ and $N=330$ (Fig.2) is made as an experimental verification of (1) and (2).

A «quantum» analytical type of formula (1) and in particular its agreement with the relation for magnetic field strength in center of a hydrogen-like atom to within notations is pointed out. For the purpose of correlation some closely problems of stability of others many-body systems, such as: aromatic hydrocarbons and «magical» nuclei are considered.

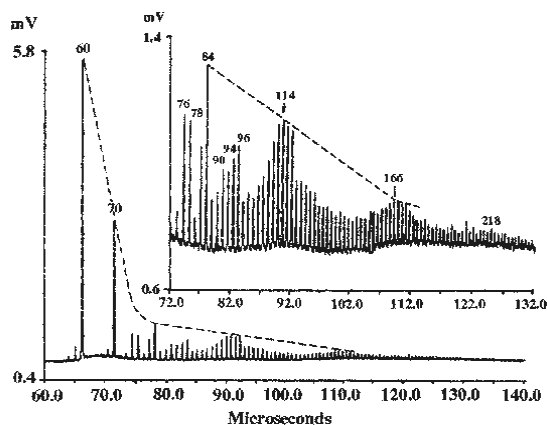


Fig. 1. Mass spectrum of carbon clusters C_N [2]

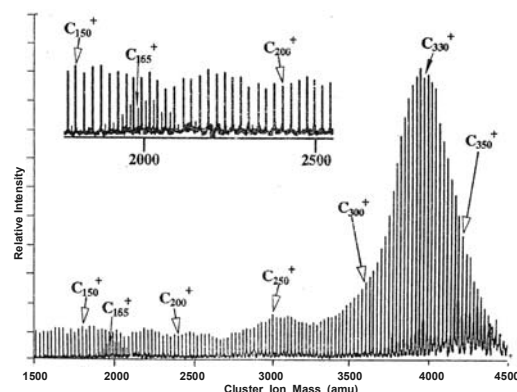


Рис. 2. Масс-спектр кластеров углерода

Fig. 2. Mass spectrum of large carbon clusters [3]

*Fax: (812) 275-57-56 E-mail: ins@vnigri.spb.su

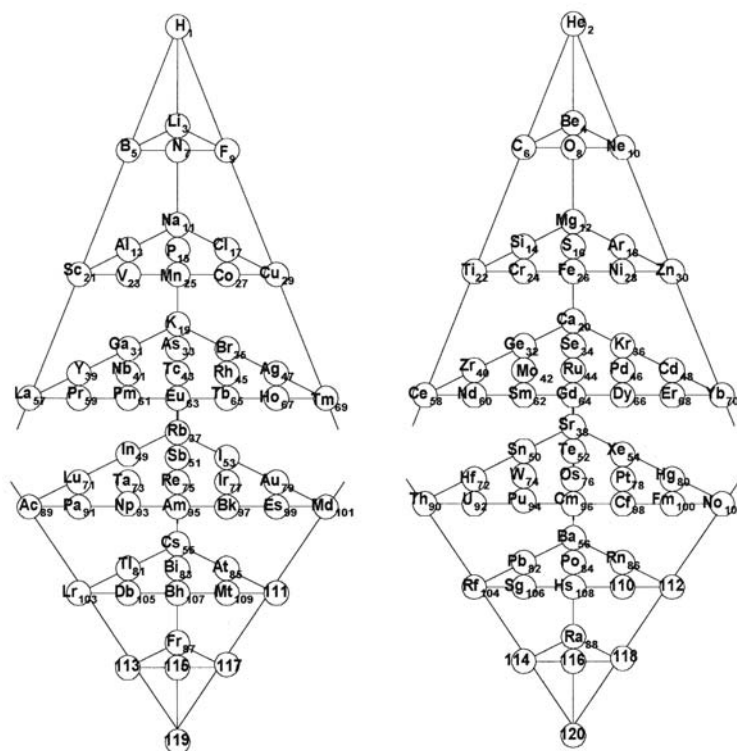


Fig. 3. Three-dimensional representation element system

A new binary three-dimensional representation of the system of chemical elements (Fig. 3) that may be named for (with the contribution of convention) the representation in coordinates of quantum numbers of unfilled electronic shells is given. It can be considered as the extension of two others representations: Cerasoli and Mazurs ones [5].

References

1. Fowler P.W. J. Chem. Soc. Faraday Trans., 87, 1991, 1945.
2. Diederich F., Whetten R.L. Acc. Chem. Res., 25(3), 1992, p. 119-126.
3. Marujama S., Anderson L.R., Smalley R.E. Rev. Sci Instrum., 60, 1990, 3686-3693.
4. Smalley R.E. Acc. Chem. Res., 1992, 25(3), p. 98-105.
5. Mazurs E.G. Graphic Representation of the Periodic System During One Hundred Years. USA, The University of Alabama Press, 1974.

К ПРОБЛЕМЕ УСТОЙЧИВОСТИ АТОМНЫХ И МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ (ФУЛЛЕРЕНЫ, УГЛЕВОДОРОДЫ, ХИМИЧЕСКИЕ ЭЛЕМЕНТЫ, МАГИЧЕСКИЕ ЯДРА)

Волков И.А.*, Кушмар И.А.

Всероссийский нефтяной научно-исследовательский геологоразведочный институт (ВНИГРИ), Литейный проспект, 39, С.-Петербург, 191104, Россия

По аналогии со спектральной формулой Бальмера в качестве исходного результата используется простая эмпирическая формула для числа атомов в относительно устойчивых кластерах углерода

$$C_N, \quad N = \frac{k(k+1)(k+2)}{k-2}, \quad (1)$$

(N, k – натуральные числа)

и соответствующий ей ряд:

$$N=60, 70, 84, 120, 165(330), 280, 819(1638), (2)$$

для нечетных кластеров дополненный (в скобках) их удвоенной четной величиной.

Обсуждается характер согласованности (2) с предшествующими [1] теоретическими результатами.

В качестве экспериментального подтверждения (1) и (2) проводится сопоставление с масс-спектрометрическими данными, опубликованными в работах [2, 3] и дополненными огибающей (Рис.1) и указателем локальных максимумов в окрестности точек $N=165$ и $N=330$ (Рис.2).

Отмечается «квантовый» аналитический вид формулы (1) и, в частности, ее совпадение с точностью до обозначений с выражением для напряженности магнитного поля в центре водородоподобного атома. С целью сопоставления рассматриваются близкие по содержанию вопросы устойчивости других многотельных объектов: ароматических углеводородов и «магических» ядер.

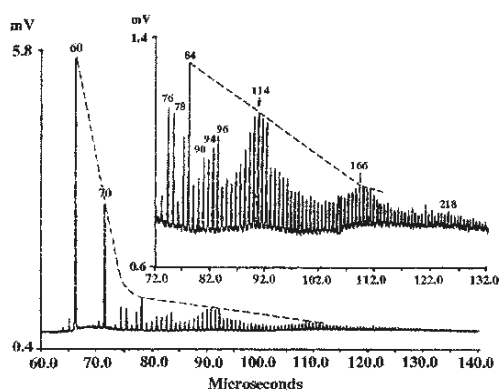


Рис. 1. Масс-спектр кластеров углерода C_N [2]

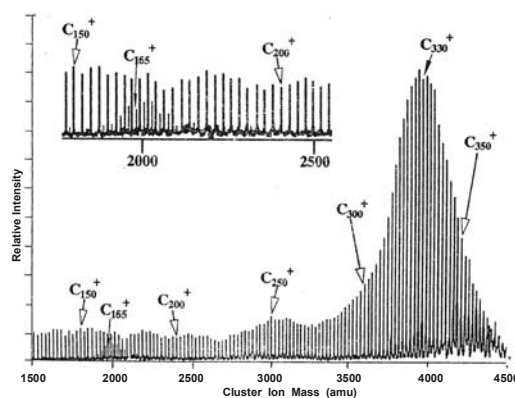


Рис. 2. Масс-спектр кластеров углерода [3]

*Факс: (812) 275-57-56 E-mail: ins@vniagri.spb.su

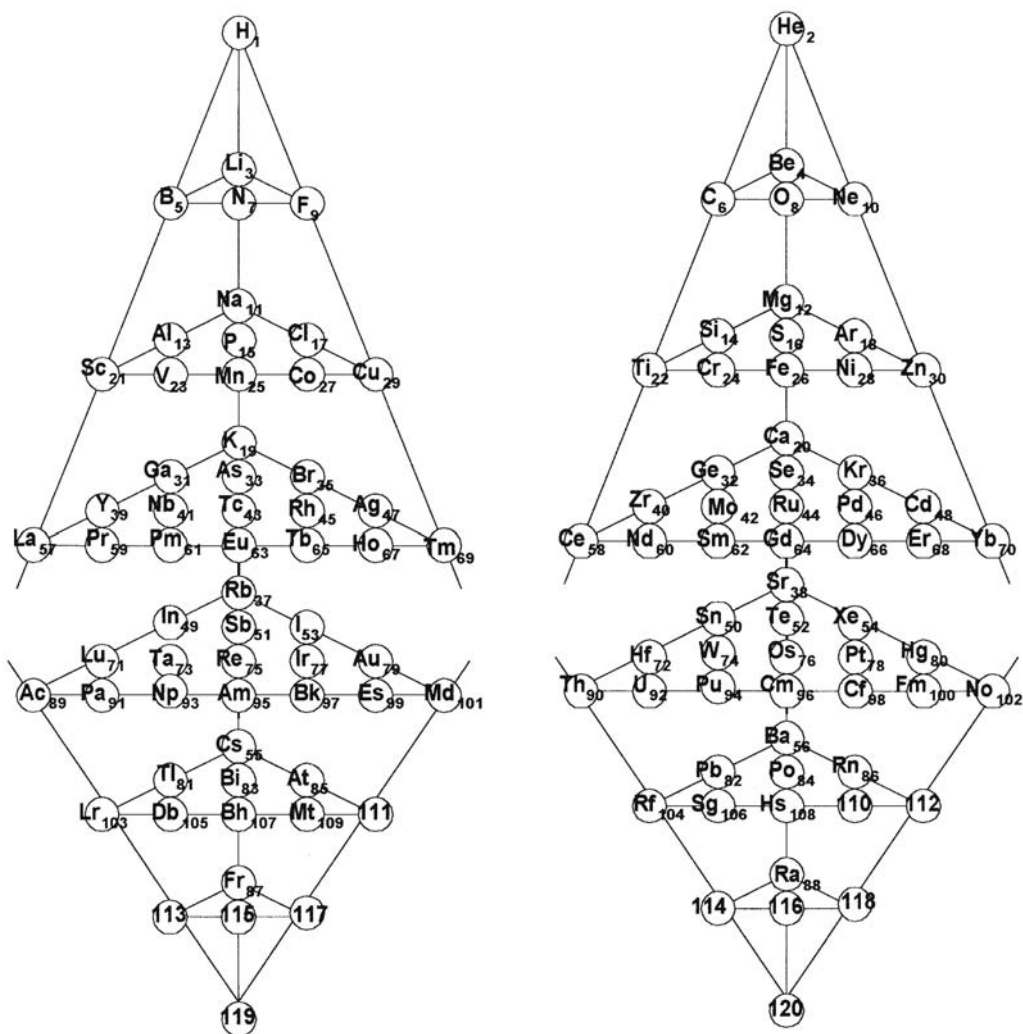


Рис. 3. Битрехмерная форма представления системы элементов

Приводится новое битрехмерное представление системы химических элементов (Рис.3), которое с определенной условностью может быть названо представлением в координатах квантовых чисел строящихся электронных оболочек. Оно может рассматриваться как обобщение двух других представлений – Керасоли и Мазурса [5].

Литература

1. Fowler P.W. J. Chem. Soc. Faraday Trans., 87, 1991, 1945.
2. Diederich F., Whetten R.L. Acc. Chem. Res., 25(3), 1992, p. 119-126.
3. Marujama S., Anderson L.R., Smalley R.E. Rev. Sci Instrum., 60, 1990, 3686-3693.
4. Smalley R.E. Acc. Chem. Res., 1992, 25(3), p. 98-105.
5. Mazurs E.G. Graphic Representation of the Periodic System During One Hundred Years. USA, The University of Alabama Press, 1974.