

(0,140 нм). В системе Белова и Бокля, считающейся одной из наиб. надёжных, А. р. O^{2-} принимается равным 0,136 нм. Ниже приведены значения радиусов нек-рых ионов:

в системе Гольдшмидта		в системе Полинга	в системе Гольдшмидта		в системе Полинга
Li+	0,078	0,060	Ba ²⁺	0,143	0,135
Na+	0,098	0,095	F ⁻	0,133	0,136
K+	0,133	0,133	Cl ⁻	0,181	0,181
Rb+	0,149	0,148	Br ⁻	0,196	0,195
Cs+	0,165	0,169	I ⁻	0,220	0,216
Mg ²⁺	0,078	0,065	O ²⁻	0,132	0,140
Ca ²⁺	0,106	0,099	S ²⁻	0,174	0,184
Sr ²⁺	0,127	0,113			

Для ионных кристаллов, имеющих одинаковые координац. числа, ср. отклонение суммы А. р., вычисленной по приведённым выше А. р., от опытных значений кратчайших межъядерных расстояний в ионных кристаллах составляет 0,001—0,002 нм.

В 70—80-х гг. были сделаны попытки прямого определения А. р. ионов путём измерения электронной плотности методами рентгеновского структурного анализа при условии, что минимум электронной плотности на линии, соединяющей ядра, принимается за границу ионов. Дифракц. измерения для кристаллов галогенидов щелочных металлов позволили получить А. р. катионов Li⁺, Na⁺, K⁺, Rb⁺ и Cs⁺, равные соотв. 0,094; 0,117; 0,149; 0,163; 0,186 нм, а А. р. анионов F⁻, Cl⁻, Br⁻, I⁻ — равные соотв. 0,116; 0,164; 0,180; 0,205 нм. Т. о. дифракц. измерения приводят к завышенным (по сравнению с традиционными, приведёнными выше) значениям А. р. катионов и к заниженным значениям А. р. анионов. А. р., найденные путём измерения распределения электронной плотности в кристалле, нельзя переносить от одного соединения к другому, а отклонения от их аддитивности слишком велики, поэтому такие А. р. не могут быть использованы для предсказания межъядерных расстояний.

Ковалентный радиус определяется как половина длины одинарной хим. связи X—X (где X — элемент-неметалл). Для галогенов ковалентный А. р. — это половина межъядерного расстояния X—X в молекуле X₂, для S и Se — половина расстояния X—X в X₈, для углерода — половина кратчайшего расстояния C—C в кристалле алмаза. Ковалентные А. р. F, Cl, Br, I, S, Se и C соотв. равны 0,064; 0,099; 0,114; 0,133; 0,104; 0,117 и 0,077 нм. Для атома H А. р. принимают равным 0,030 нм (хотя половина длины связи H—H в молекуле H₂ равна 0,037 нм). Аддитивность ковалентных А. р. позволяет предсказывать кратчайшие межъядерные расстояния (длины связей) в многоатомных молекулах. Так, согласно этому правилу длина связи C—Cl должна быть равной 0,176 нм, а экспериментально полученное для этой величины значение в молекуле CCl₄ равно 0,177 нм. Ниже приведены ковалентные А. р. для атомов нек-рых элементов, вычисленные на основании длин одинарных связей:

H	Li	Be	B	C	N	O	F
0,032							
0,123	0,089		0,081	0,077	0,074	0,074	0,072
			Al	Si	P	S	Cl
			0,125	0,117	0,110	0,104	0,099
				Ge	As	Se	Br
				0,122	0,121	0,117	0,114
				Sn	Sb	Te	J
				0,140	0,141	0,137	0,133

В молекулах, имеющих двойные или тройные хим. связи, используют уменьшенные значения ковалентных А. р., ибо кратные связи короче одинарных. Ниже приведены ковалентные радиусы атомов при образовании кратных связей:

	C	N	O	S	Se
для двойной связи	0,067	0,062	0,060	0,094	0,107
для тройной связи	0,060	0,055	0,055	0,087	—

Ван-дер-ваальсовы радиусы определяют эфф. размеры атомов благородных газов. Кро-

ме того, ван-дер-ваальсовыми А. р. считают половину межъядерного расстояния между ближайшими одноимёнными атомами, не связанными между собой хим. связью и принадлежащими разным молекулам (напр., в молекулярных кристаллах). При сближении атомов на расстояние, меньшее суммы их ван-дер-ваальсовых радиусов, возникает сильное межатомное отталкивание. Поэтому ван-дер-ваальсовы А. р. характеризуют минимальные допустимые контакты атомов, принадлежащих разным молекулам. Ниже приведены значения ван-дер-ваальсовых атомных радиусов для нек-рых атомов:

H	0,11	O	0,14	F	0,135
N	0,15	S	0,185	Cl	0,180
P	0,19	Se	0,200	Br	0,195
As	0,20	Te	0,220	I	0,215
Sb	0,22				

Ван-дер-ваальсовы А. р. в ср. на 0,08 нм больше ковалентных А. р. Ионный А. р. для отрицательно заряженного иона (напр., Cl⁻) практически совпадает с ван-дер-ваальсовым радиусом атома в нейтральном состоянии.

Знание ван-дер-ваальсовых А. р. позволяет определять форму молекул, конформации молекул и их упаковку в молекулярных кристаллах. Согласно принципу плотной упаковки, молекулы, образуя кристалл, располагаются таким образом, что «выступы» одной молекулы входят во «впадины» другой. Пользуясь этим принципом, можно интерпретировать имеющиеся кристаллографические данные, а в ряде случаев и предсказывать структуру молекулярных кристаллов.

Лит.: Бокля Г. Б., Кристаллохимия, 3 изд., М., 1971; Полинг Л., Общая химия, пер. с англ., М., 1974; Кемпбелл Дж., Современная общая химия, пер. с англ., т. 1, М., 1975; Картерелл Э., Фолуэлл Г. В. А., Валентность и строение молекул, пер. с англ., М., 1979. В. Г. Дашевский.

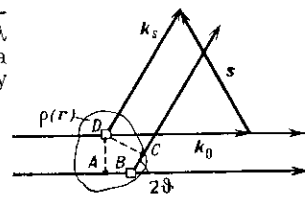
АТОМНЫЙ ФАКТОР — величина, характеризующая способность изолированного атома или иона когерентно рассеивать рентгеновское излучение, электроны, нейтроны. Величина А. ф. и его зависимость от угла рассеяния θ и длины волны излучения λ определяются физ. природой взаимодействия излучения с атомом. А. ф. определяет интенсивности дифракц. максимумов и их зависимости от θ и λ (см. Дифракция рентгеновских лучей, Дифракция частиц), он играет важную роль в рентгеновском структурном анализе, электронографии, нейтронографии.

Общее для всех типов излучения выражение для А. ф. $f(s)$ находящегося в определенной точке пространства атома в борновском приближении теории рассеяния имеет вид:

$$f(s) = K \int_V \rho(r) \exp[i(sr)] dV, \quad (1)$$

где $\rho(r)$ — распределение плотности рассеивающего компонента в атоме, $s = k_s - k_0$ — вектор рассеяния, k_0 и k_s — волновые векторы падающей и рассеянной волн соответственно; величину s определяет угол рассеяния θ : $s = 4\pi \sin \theta / \lambda$ (рис. 1). При рассеянии на кристалле s равен вектору

Рис. 1. Рассеяние излучения в точках В и D атома. Разность хода между лучами, рассеянными в точках В и D, равна $|AB| - |BC|$.



обратной решётки g (см. Брэгга — Вульфа условие). Множитель K определяется взаимодействием излучения с атомом; r — радиус-вектор точки пространства, в которой происходит рассеяние волны.

А. ф. (1) учитывает только потенциальное рассеяние излучения (без учёта возможных резонансных механизмов рассеяния).

Выражение (1) приобретает более простой вид, если