Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

М. А. Кузьмин, И. К. Гаркушин, О. В. Лаврентьева, Математическое описание зависимости коэффициента сжимаемости, атомного и ковалентного радиусов металлов VB-группы периодической системы от заряда их ядра, *Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки*, 2002, выпуск 16, 200–202

DOI: <https://doi.org/10.14498/vsgtu124>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 18.234.197.8

26 апреля 2023 г., 15:23:23

УДК 546.72+546.73+546.74

М.А. Кузьмин, И.К. Гаркушин, О.В. Лаврентьева

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ КОЭФФИЦИЕНТА СЖИМАЕМОСТИ, АТОМНОГО И КОВАЛЕНТНОГО РАДИУСОВ МЕТАЛЛОВ VB-ГРУППЫ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ ОТ ЗАРЯДА ИХ ЯДРА

Получены уравнения для прогнозирования значений коэффициента сжимаемости, атомного и ковалентного радиусов металлов VB – группы периодической системы от заряда их ядра. Адекватность уравнений проиллюстрирована для элемента с порядковым номером 105 (Дубний).

Интерес к математическим методам расчета основных физико-химических параметров элементов проявился с момента возникновения самой периодической системы. В современном мире применение ЭВМ стало неотъемлемой частью почти любого научно-технического процесса, и это позволило открыть новые горизонты данного рода исследований. В настоящей работе приводится описание зависимости атомного и ковалентного радиусов и коэффициента сжимаемости металлов VB-группы периодической системы от заряда их ядра. Исследования проводились на ПЭВМ типа IBM PC с использованием программ Microsoft Excel 7.0 и TableCurve 2D v5.0 под управлением операционной системы Microsoft Windows NT 4.0.

В табл.1 приведены исходные данные атомного радиуса, ковалентного радиуса и коэффициента сжимаемости металлов VB-группы периодической системы.

Т а б л и ц а 1

Исходные данные

Элемент VB группы	Порядковый номер (заряд ядра)	Коэффициент сжимаемости U (10^{-11} м)	Атомный радиус $R_{атом.}$ (10^{-12} м)	Ковалентный радиус $R_{ков.}$ (10^{-12} м)
V (Ванадий)	23	0,618	131	123
Nb (Ниобий)	41	0,587	144	134
Ta (Тантал)	73	0,50	144	134

Р и с. 1. Зависимость логарифма приведенного коэффициента сжимаемости от порядкового номера элемента

Аналогично коэффициенту сжимаемости был проведен анализ для атомного и ковалентного радиусов. Полученные графические зависимости приведены на рис. 2 и 3, а соответствующие им уравнения – в табл. 2. По полученным уравнениям проведен прогноз значений коэффициента сжимаемости, атомного и ковалентного радиусов для элемента с порядковым номером 105 (Дубний). Эти значения были внесены в исходные данные и построены графические зависимости.

По исходным данным (см. табл. 1) были построены графические зависимости в координатах $F=f(Z)$, $\ln(F)=f(\ln(Z))$, $F/Z=f(Z)$, $\ln(F/Z)=f(\ln(Z))$, где F – исследуемое свойство ($R_{атом.}$, $R_{ков.}$, U); Z – порядковый номер элемента (заряд ядра). Графики и полученные уравнения, наиболее точно описывающие исследуемые свойства элементов VB группы, приводятся ниже.

На рис. 1 изображена зависимость логарифма приведенного коэффициента сжимаемости (коэффициента сжимаемости, отнесенного к заряду ядра Z) от порядкового номера элемента Z . Данный график отвечает условиям $R^2 \rightarrow \max$, $\sigma^2 \rightarrow \min$, где R^2 – коэффициент корреляции, σ^2 – среднее квадратичное отклонение. Используя данную графическую зависимость, получили уравнение, которое приве-

Полученные уравнения

Свойство элементов VB группы	Полученное уравнение	Прогнози- руемое зна- чение для дубния (105)	Значение коэффициен- тов в исходном уране- нии		Значение коэффициен- тов в уравнении с ис- пользованием прогно- зируемых значений	
			<i>a</i>	<i>b</i>	<i>a</i>	<i>b</i>
Коэффициент сжи- маемости U (10^{-12} М)	$\ln(U/Z)=a+bZ^2$	0,428535	-2.0494	-0.1594	-2.0283	-0.1611
Атомный радиус $R_{\text{атом.}}$ (10^{-12} М)	$(R_{\text{атом.}}/Z)^2=a+b/Z^{1.5}$	120,353541	-2.2421	3825.9815	-2.2421	3825.9815
Ковалентный ради- ус $R_{\text{ков.}}$ (10^{-12} М)	$(R_{\text{ков.}}/Z)^{-1}=a+bZ$	130,387341	0.0799	0.0015	0.0799	0.0015

Р и с. 2. Зависимость приведенного атомного радиуса от порядкового номера элемента

Р и с. 3. Зависимость приведенного ковалентного радиуса от порядкового номера элемента

На рис. 4-6 изображены зависимости исследуемых свойств элементов с использованием прогнозируемых значений.

Р и с. 4. Зависимость логарифма приведенного коэффициента сжимаемости от порядкового номера элемента с использованием прогнозируемых значений

Р и с. 5. Зависимость приведенного атомного радиуса от порядкового номера элемента с использованием прогнозируемых значений

На основании данных табл. 2 и сравнения графиков, изображенных на рис. 1 и 4, 2 и 5, 3, и б) соответственно, можно судить о том, что полученные уравнения можно использовать для прогнозирования значений коэффициента сжимаемости, атомного и ковалентного радиусов элементов VB-группы и полученные значения являются достоверными.

Р и с. 6. Зависимость приведенного ковалентного радиуса от порядкового номера элемента с использованием прогнозируемых значений

На основании вышеизложенного можно сделать следующие выводы.

1. Получены аналитические выражения зависимости коэффициента сжимаемости, атомного и ковалентного радиусов для элементов VB группы периодической системы, которые удовлетворяют условиям $R^2 \rightarrow \max$, $\sigma^2 \rightarrow \min$.

2. Спрогнозированы значения свойств для элемента с порядковым номером 105 (Дубний)

3. Проведен анализ и установлено, что полученные зависимости являются достоверными и могут быть использованы для прогнозирования свойств элементов VB группы периодической системы.