

СТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ СИМВОЛЬНЫХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ
(Вычислительные системы)

1984 год

Выпуск 101

УДК 541.15

ЕСТЕСТВЕННАЯ ТАБЛИЦА ХИМИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ

Ю.И. Кулаков

Как известно, первая удачная классификация химических элементов была дана Менделеевым. Однако, пытаясь придать своей таблице прямоугольную форму, он вынужден был помещать символы различных элементов в различных углах соответствующих клеток. Так,

22	24
47,90	28,08
Титан	Кремний

, но

Кроме того, некоторые клетки не умещались в рамках прямоугольной таблицы и вылезали из нее, например, Co^{27} , Ni^{28} , Rh^{45} , Pd^{46} , Ir^{77} , Pt^{78} , а в некоторые клетки приходилось помещать сразу 15 элементов: лантаноиды (от La^{57} до Lu^{71}), актиноиды (от Ac^{89} до Lr^{103}).

Принцип Паули существенно помог понять саму внутреннюю структуру строения периодической системы химических элементов, связав местоположение химических элементов с их внутренним строением. Однако это не привело к изменению формы таблицы и устранило всех указанных выше недостатков.

Нами [2] был предложен новый способ классификации химических элементов, в основе которого лежат две идеи весьма общего характера:

- идея единства мира, согласно которой множество объектов одной природы рассматривается как различные возбужденные состояния некоторой единой материи. Эта идея оказалась весьма плодотворной, например, при рассмотрении множества элементарных частиц (см.[3]);

- идея симметрии, в соответствии с которой основные законы - мерности, проявляющиеся на множествах однородных объектов, определя-

ются присущим им типом симметрии. Идея пространственной групповой симметрии позволила Е.С.Федорову дать классификацию структур кристаллических решеток [4]. На идее феноменологической симметрии основана теория физических структур, позволяющая увидеть и понять физику как единную целостную систему [5,6].

Применительно к множеству химических элементов в согласии с первой идеей каждый химический элемент трактуется как некоторое возбужденное состояние единой протоматерии (например, водород и кислород – это два различных ее состояния). В соответствии со второй идеей предполагается, что данная протоматерия обладает симметрией, описываемой специальной абстрактной группой $G = \text{SU}(2) \times \text{SO}(4,2)$, каждому представлению которой, как показано в [2], соответствует однозначно определяющая данный химический элемент четверка квантовых чисел (n, l, m, s_z) :

$$\begin{aligned} n &= 1, 2, 3, \dots; \\ l &= 0, 1, 2, \dots, n-1; \\ m &= -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l; \\ s_z &= -1/2, 1/2. \end{aligned} \tag{1}$$

Заметим, что при квантовомеханическом описании возбужденных состояний атома водорода число n является главным квантовым числом и определяет собой энергию всего мультиплета. Число l называется орбитальным квантовым числом и определяет величину полного момента импульса электрона. Число m называется магнитным квантовым числом и определяет величину проекции полного момента на ось z , и, наконец, s_z называется спиновым квантовым числом и определяет величину проекции спина на ось z [7].

В случае же классификации основных состояний различных атомов числа n, l, m, s_z имеют совершенно иной смысл и для них такой наглядной трактовки пока найти не удалось. Однако форма таблицы, приведенная в [2, вып. I, с. 27], не является вполне удачной, так как в ней затушевано основное правило расположения химических элементов в таблице.

В настоящей статье предлагается новая форма системы химических элементов (u, v -форма), естественным образом отражающая это правило.

Предлагаемая таблица химических элементов, названная нами "естественной", проста и удобна, лишена указанных выше недостатков и позволяет однозначным образом предсказывать физико-химические

свойства любых еще неоткрытых (трансурановых) химических элементов. Оказалось, что вместо квантовых чисел n и l удобно взять их линейную комбинацию:

$$u = n+1,$$

$$v = n-1,$$

и таким образом, вместо набора (I) использовать набор:

$$u = 1, 2, 3, \dots;$$

$$v = \begin{cases} 1, 3, 5, \dots, u & \text{для } u \text{ нечетного}, \\ 2, 4, 6, \dots, u & \text{для } u \text{ четного}, \end{cases}$$

$$m = -\frac{1}{2}(u-v), -\frac{1}{2}(u-v) + 1, \dots, \frac{1}{2}(u-v),$$

$$s_z = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}.$$

Введем понятия мультиплета и супермультиплета.

Мультиплетами $\tilde{M}(n,1)$ и $\tilde{M}(u,v)$ называются совокупности химических элементов с одними и теми же $(n,1)$ и соответственно (u, v) (рис.1).

Супермультиплетами $\tilde{S}(n)$ и $S(u)$ называются совокупности химических элементов, состоящие из мультиплетов, имеющих одни и те же значения n (рис.2) и соответственно u (рис.3).

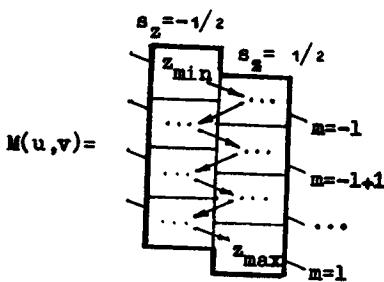
Сами мультиплеты $\tilde{M}(n,1) = M(u,v)$ представляют собой совокупности $2(2l+1) = 2(u-v+1)$ химических элементов с последовательными значениями атомных номеров:

$$z_{\min}(u,v) \leq z \leq z_{\max}(u,v);$$

$$z_{\max}(u,v) - z_{\min}(u,v) = 2(u-v)+1 = 2(2l+1)-1$$

и изображаются в виде двух строк или столбцов ($s_z = -1/2, 1/2$) длины $2l+1$:

$m = -1$	$-1+1$	\dots	1	$s_z = -1/2$
z_{\min}	\dots	\dots	z_{\max}	$s_z = 1/2$
\dots	\dots	\dots	\dots	
-1	$-1+1$	\dots	1	



Можно видеть, что в супермультиплете $\tilde{S}(n)$ содержится $N_{\tilde{S}(n)} = 2n^2$ химических элементов, а в супермультиплете $S(u)$

$$N_{\tilde{S}(u)} = \begin{cases} 1/2(u+1)^2 & \text{при } u \text{ нечетном,} \\ 1/2 u^2 & \text{при } u \text{ четном,} \end{cases}$$

т.е.

n	1	2	3	4	5	6	7	8	...
$N_{\tilde{S}(n)}$	2	8	18	32	50	72	98	128	...
u	1	2	3	4	5	6	7	8	...
$N_{S(u)}$	2	2	8	8	18	18	32	32	...

Итак, абстрактная математическая конструкция, лежащая в основании естественной классификации химических элементов, может быть изображена в виде плана некоторого городка, застроенного 1,3,5,7, 9...-этажными ($m=-1, \dots, 1$), двухподъездными ($s_z = -1/2, 1/2$) домами, расположенными на перекрестках проспектов ($l = 0, 1, 2, \dots$) и улиц ($n = 1, 2, 3, \dots$) (рис.4).

Сформулируем теперь основной физический закон, лежащий в основании периодической системы химических элементов Менделеева.

Прежде всего необходимо указать правило, по которому каждому химическому элементу сопоставляется определенное место в определенном мультиплете.

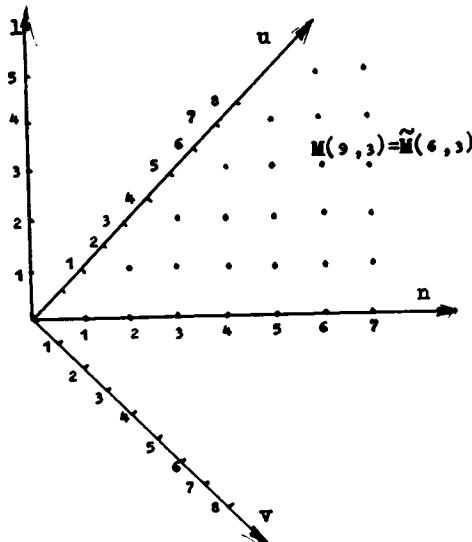


Рис. 1. Расположение мультиплетов $M(u,v)=M(n,1)$ на плоскостях (n,l) и (u,v) .

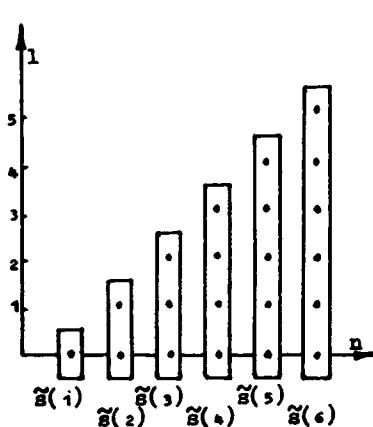


Рис. 2. Супермультиплеты $s(n)$.

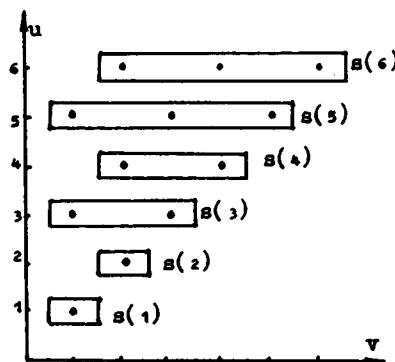


Рис. 3. Супермультиплеты $s(u)$.

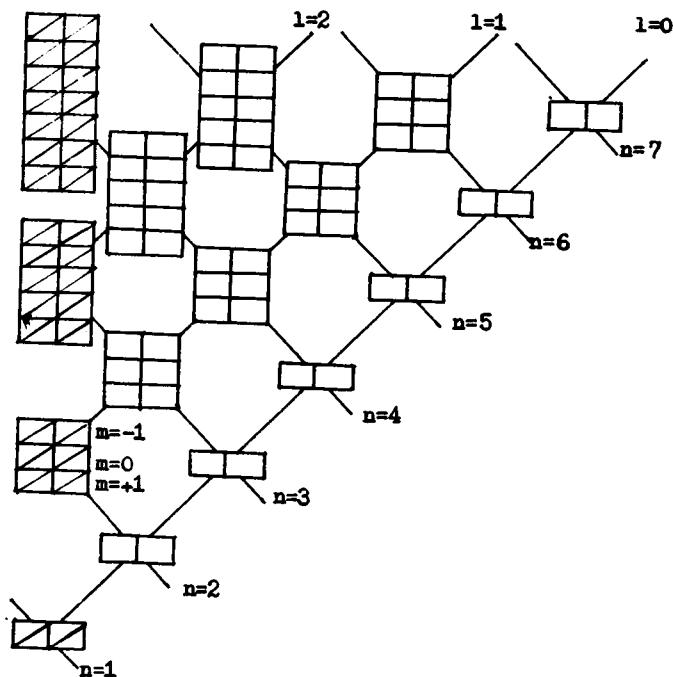


Рис. 4

Предполагается, что существует определенная измерительная процедура (например, измерение полных сечений рассеяния α -частиц на конкретных атомах), позволяющая сопоставить каждому химическому элементу атомный номер z . Расположим все химические элементы в определенной последовательности в порядке возрастания z и разобьем эту последовательность один раз на супермультиплеты $\tilde{S}(n)$ (рис.5), а другой - на супермультиплеты $S(u)$ (рис.6).

В зависимости от выбора $\tilde{S}(n)$ или $S(u)$ мы получим различные реализации мультиплетов $\tilde{M}(n,l) = M(u,v)$. Так, например, при разбиении по $\tilde{S}(n)$ мультиплет $\tilde{M}(5,I)$ будет иметь следующую реализацию: $\{\text{Eu}^{63}, \text{Gd}^{64}, \text{Tb}^{65}, \text{Dy}^{66}, \text{Ho}^{67}, \text{Er}^{68}\}$, а при разбиении по $S(u)$ мультиплет $M(6,4) = \tilde{M}(5,I)$ реализуется по-иному: $\{\text{In}^{49}, \text{Sn}^{50}, \text{Sb}^{51}, \text{Tl}^{52}, \text{I}^{53}, \text{Xl}^{54}\}$.

Можно показать, что задание четырех квантовых чисел u, v, m, s_z , характеризующих каждый химический элемент, при разбиении после -

$\tilde{S}(1)$	$\tilde{S}(2)$	$\tilde{S}(3)$			
1, 2	3, 4	5-10	11, 12	13-18	19-28
$\tilde{M}(1,0)$	$\tilde{M}(2,0)$	$\tilde{M}(2,1)$	$\tilde{M}(3,0)$	$\tilde{M}(3,1)$	$\tilde{M}(3,2)$
		$\tilde{S}(4)$			
		29-30	31-36	37-46	47-60
		$\tilde{M}(4,0)$	$\tilde{M}(4,1)$	$\tilde{M}(4,2)$	$\tilde{M}(4,3)$
		$\tilde{S}(5)$			
		61, 62	63-68	69-78	79-92
		$\tilde{M}(5,0)$	$\tilde{M}(5,1)$	$\tilde{M}(5,2)$	$\tilde{M}(5,3)$
					93-110
					$\tilde{M}(5,4)$

Рис. 5

$S(1)$	$S(2)$	$S(3)$	$S(4)$	$S(5)$	
1, 2	3, 4	5-10	11, 12	13-18	19, 20
$M(1,1)$	$M(2,2)$	$M(3,1)$	$M(3,3)$	$M(4,2)$	$M(4,4)$
				$M(5,1)$	$M(5,3)$
					$M(5,5)$
		$S(6)$	$S(7)$		
		39-48	49-54	55, 56	57-70
		$M(6,2)$	$M(6,4)$	$M(6,6)$	$M(7,1)$
				$M(7,3)$	$M(7,5)$
					$M(7,7)$
		$S(8)$			
		89-102	103-112	113-118	119, 120
		$M(8,2)$	$M(8,4)$	$M(8,6)$	$M(8,8)$

Рис. 6

доказательности химических элементов по супермультплетам $S(u)$ позволяет однозначно определить его атомный номер:

$$z(u, v, n, s_z) = \frac{u(u^2-4)}{6} + v(u+1) - \frac{v^2}{2} + \frac{u+1}{4} (1 - (-1)^u) + n + s_z - 1/2.$$

Заметим, что

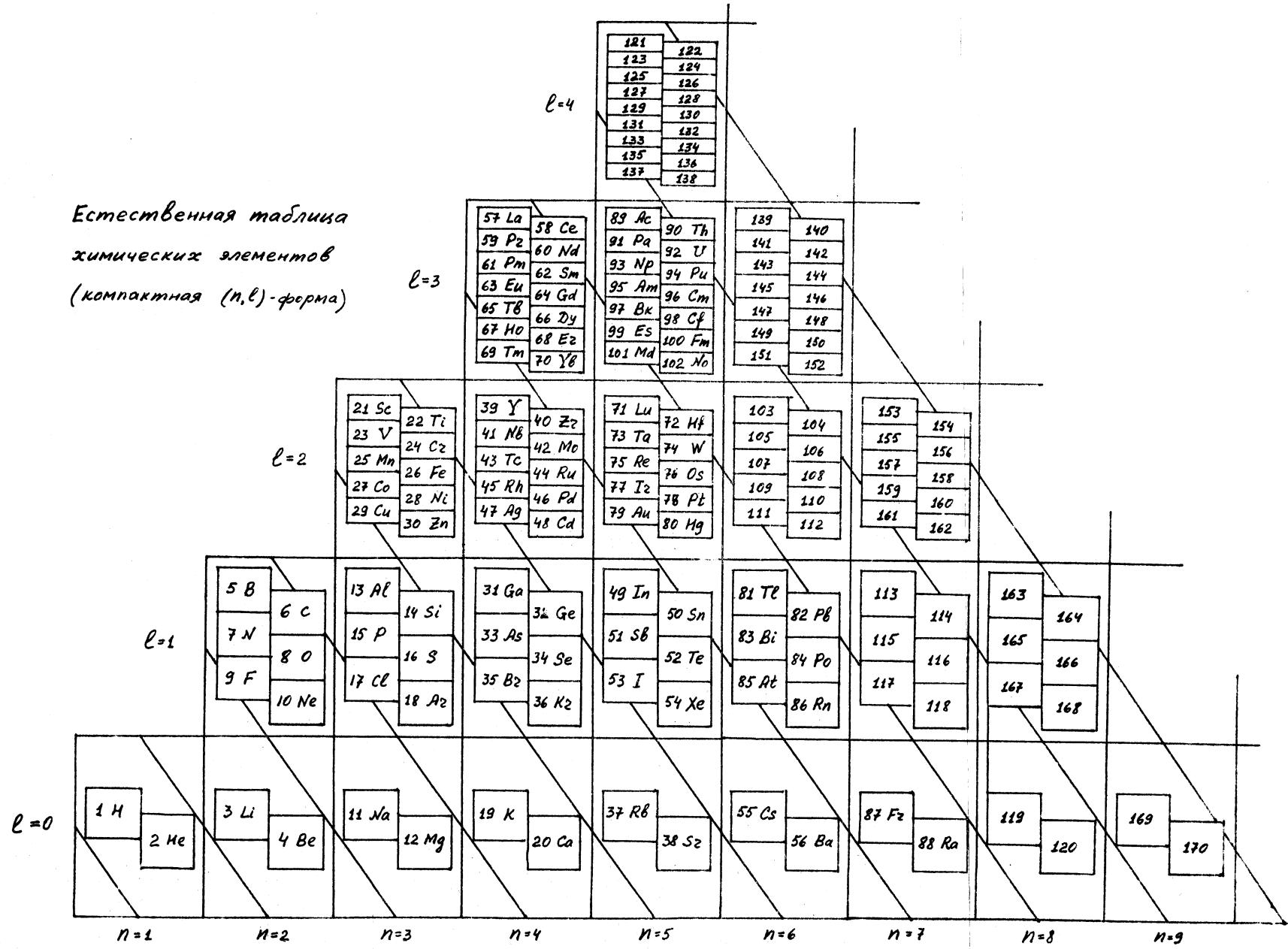
$$z_{\min}(u, v) = z(u, v, -(u-v), -1/2),$$

$$z_{\max}(u, v) = z(u, v, u-v, 1/2),$$

$U=5$	$121 \ 123 \ 125 \ 127 \ 129 \ 131 \ 133 \ 135 \ 137$		$139 \ 141 \ 143 \ 145 \ 147 \ 149 \ 151$		$152 \ 154 \ 156 \ 158 \ 160 \ 162$		$163 \ 165 \ 167 \ -$	
	$122 \ 124 \ 126 \ 128 \ 130 \ 132 \ 134 \ 136 \ 138$	→	$140 \ 142 \ 144 \ 146 \ 148 \ 150 \ 152$	→	$154 \ 156 \ 158 \ 160 \ 162$		$164 \ 166 \ 168$	→
$U=8$			$89 \ 91 \ 93 \ 95 \ 97 \ 99 \ 101$ Ac Pa Np Am Bk Es Nd 90 92 94 96 98 100 102 Ta U Pu Cm Cf Fm No	→	$103 \ 105 \ 107 \ 109 \ 111$ 104 106 108 110 112		$113 \ 115 \ 117$ 114 116 118	→
$U=7$	$57 \ 59 \ 61 \ 63 \ 65 \ 67 \ 69$ La P ₂ Pm Eu T ₆ Ho Tm 58 60 62 64 66 68 70 Ce Nd Sm Gd Dy Er Yb	→	$71 \ 73 \ 75 \ 77 \ 79$ Lu Ta Re I ₂ Au 72 74 76 78 80 Hf W Os Pt Hg	→	$81 \ 83 \ 85$ Te Bi At 82 84 86 Po Pe Rn		$87 \ 89$ Fr Ra	→
$U=6$			$39 \ 41 \ 43 \ 45 \ 47$ Y Nb Tc Rh Ag 40 42 44 46 48 Zr Mo Ru Pd Cd	→	$49 \ 51 \ 53$ In Sb I 50 52 54 Sn Te Xe		$55 \ 56$ Cs Ba	$V=7$
$U=5$	$21 \ 23 \ 25 \ 27 \ 29$ Sc V Mn Co Cu 22 24 26 28 30 Ti Cr Fe Ni Zn	→	$31 \ 33 \ 35$ Ga As Br 32 34 36 Ge Se Kr	→	$37 \ 38$ Rb Sr		$V=6$	
$U=4$	$m=-1 \ m=0 \ m=1$		$13 \ 15 \ 17$ Al P Cl 14 16 18 Si S Ar	→	19 K 20 Ca		$V=5$	
$U=3$	$5 \ 7 \ 9$ B N F 6 8 10 C O Ne	$S_z = -\frac{1}{2}$		$11 \ 12$ Na Mg			$V=4$	
$U=2$			3 Li 4 Be				$V=3$	
$U=1$			1 H 2 He				$V=2$	
								$V=1$

Естественная таблица химических элементов
(естественная (U,V) -форма)

Естественная таблица химических элементов (компактная (n, l) -форма)



Можно видеть (рис.6), что задание атомного номера z однозначно определяет квантовые числа $u(z)$, $v(z)$, $m(z)$, $s_z(z)$.

Оказывается, что если выбрать разбиение последовательности химических элементов по супермультиплетам $S(u)$, то получаемые при этом мультиплеты $M(u,v)$ (рис.6) обладают следующим свойством:

Все мультиплеты $M(u,v) = \tilde{M}(n,1)$, имеющие одинаковое строение (т.е. одну и ту же "этажность" и, следовательно, одно и то же значение 1), химически подобны.

Это означает, что физико-химические свойства химических элементов могут существенно зависеть от m и s_z при фиксированных l и n , но слабо зависят от v при фиксированных l, m, s_z . Грубо говоря, для того чтобы знать свойства всех химических элементов, достаточно знать свойства химических элементов, входящих в мультиплеты $M(u,v_0)$ одного столбца с фиксированным значением $v = v_0$ (занумерованные мультиплеты на рис. 4).

При разбиении последовательности химических элементов по супермультиплетам $\tilde{S}(n)$ (рис.5) никакого подобия между различными мультиплетами с одинаковыми l обнаружить нельзя.

Наличие одной естественной реализации мультиплетов $M(u,v) = \tilde{M}(n,1)$ с помощью разбиения по супермультиплетам $S(u)$ связано с частичным нарушением исходной симметрии $SU(2) \times SO(4,2)$. Если бы эта симметрия была строгой, то все химические элементы обладали одинаковыми свойствами и при любой реализации мультиплеты были подобны.

Заметим, что атом водорода и протоматерия, ответственная за существование химических элементов, обладают одним и тем же типом симметрии. Это приводит к тому, что для описания возбужденных состояний атома водорода и возбужденных состояний протоматерии (представляющих собой химические элементы в основном - невозбужденном - состоянии) используются одни и те же квантовые числа n, l, m, s_z .

Однако характер частичных нарушений этой симметрии у атома водорода и у протоматерии различен, в результате чего энергетические уровни атома водорода объединяются в супермультиплеты $\tilde{S}(n)$, а химические элементы - в супермультиплеты $S(u)$.

Итак, разминая, мы можем утверждать следующее:

Если осуществлять разбиение естественной последовательности хи-

мических элементов по супермультиплетам $S(u)$, то получаемые при этом мультиплеты с одинаковыми 1 химическими подобны.

Приведенная на вклейке естественная таблица химических элементов дана в двух вариантах: в координатах u, v (естественная форма) и в координатах n, l (компактная форма).

Л и т е р а т у р а

1. BARUT A.O. Structure of Matter, Rutherford Centennial Symposium. New Zealand, 1972.
2. BYAKOV V.M., KULAKOV J.I., RUMER J.B., FET A.I. Group-Theoretical Classification of Chemical Elements.-Препринт ИТЭР, ч. I, II, 1976; ч. III, 1977.
3. РАЙДЕР Л. Элементарные частицы и симметрия. -М.: Наука, 1983.
4. ФЕДОРОВ Е.С. Симметрия и структура кристаллов.-М., 1949.
5. КУЛАКОВ Ю.Н. О теории физических структур.-В кн.: Краевые задачи математической физики и смежные вопросы теории функций. Л., 1983, с. 103-151 (Труды ЛОМИ, т. 127).
6. КУЛАКОВ Ю.Н. О новом виде симметрии, лежащей в основании физических теорий феноменологического типа. - ДАН СССР, 1970, т.193, № 5, с. 985-987.
7. ДАВЫДОВ А.С. Квантовая механика. -М.: Наука, 1973.

Поступила в ред.-изд.отд.
12 апреля 1984 года