Determination of PSE by Golden mean [Excerpt from (Trifonov and Dmitriev, 1981)]

АКАДЕМИЯ НАУК СССР
ИНСТИТУТ ИСТОРИИ ЕСТЕСТВОЗНАНИЯ И ТЕХНИКИ

УЧЕНИЕ О ПЕРИОДИЧНОСТИ

История и современность

ИЗДАТЕЛЬСТВО «НАУКА»
МОСКВА
1981

УДК 541.9

Книга содержит статьи, рассматривающие историю и современное состояние теории периодической системы элементов и роль и значимость квантовомеханических представлений в учении о периодичности.

Книга рассчитана на широкий круг читателей — химиков и физиков, историков и философов естествознания, преподавателей высших и средних учебных заведений.

Ответственный редактор
доктор химических наук
Д. Н. ТРИФОНОВ

У $\frac{20501\text{-}032}{055(02)\text{-}81}$ 162-80, кн. 2 1801000000

УДК 541.9

О КОЛИЧЕСТВЕННОЙ ИНТЕРПРЕТАЦИИ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ

Д. Н. Трифонов, И. С. Дмитриев

В историческом плане можно говорить о двух формулировках закона периодичности. Одна из них соответствует элементному (химическому) уровню представлений о периодичности, другая отвечает атомному (электронному, физическому) уровню. Согласно первой констатируется периодическое изменение свойств элементов в зависимости от увеличения их атомных весов (Д. И. Менделеев), согласно второй — периодическое повторение определенных типов электронных конфигураций атомов по мере роста зарядов их ядер Z (Н. Бор). Обе формулировки являются качественными; преимущество второй состоит в том, что она опирается на физическую модель строения атома, лежащую в основе традиционного объяснения внутренних причин периодичности. Но в то же время вторая формулировка оказывается лишь выражением определенных закономерностей формирования реальной схемы электронных конфигураций атомов. Между тем во многих случаях на основании представлений об электронных конфигурациях нельзя сделать однозначных выводов относительно свойств соответствующих элементов. Поэтому в известной степени вторая формулировка не является более содержательной, чем первая.

Своеобразие закона периодичности (на фоне многих других фундаментальных законов природы) заключается в том, что он не может быть записан в виде какого-либо общего аналитического уравнения. Практически наиболее приемлемый способ его наглядного отражения — табличный, т. е. посредством периодической системы элементов (что касается геометрических форм— различные фигуры, кривые и т. п., то они не дают никакой дополнительной информации по сравнению с таблицами). В конечном счете периодическая система элементов, ее определенная структура исторически проявила себя как своеобразная топологическая «матрица», позволившая с достаточной полнотой передать сущность закона периодичности. При этом не имеет значения, идет ли речь об элементном или об атомном уровне представлений о периодичности: ведь даже в рамках формальной теории периодической системы каноническая структура последней отнюдь не подвергалась пересмотру — она лишь получила определенное физическое истолкование. Иное дело, что в русле боровской квантовой теории строения атомов подобное истолкование не является достаточно строгим: многие фундамен-

Таблица 5

Распределение простых чисел по Q- и q-группам чисел натурального ряда

Q	q	Значения ρ и i	S_Q	S_q
1	1	2 *1*	2	1
	2	3 *2*		1
2	3	5 7 11 *3 4 5*	6	3
	4	13 17 19 *6 7 8*		3
3	5	23 29 31 37 *9 10 11 12*	8	4
	6	41 43 47 53 *13 14 15 16*		4
4	7	59 61 67 71 73 79 83 *17 18 19 20 21 22 23*	14	7
	8	89 97 101 103 107 109 113 *24 25 26 27 28 29 30*		7

шего простых чисел в последовательных Q-совокупностях. Анализ табл. 5 позволяет обнаружить следующее.

1. В каждой совокупности чисел Q содержится четное число простых чисел, причем значения S_Q образуют последовательность 2, 6, 8, 14, которая является рекуррентной. Это — так называемый обобщенный ряд Фибоначчи (два последних члена последовательности выражаются как сумма двух предыдущих). Для последовательности подобного вида может быть выведено аналитическое выражение зависимости S_Q от Q:

$$S_Q = (1/2^{Q-1})[(1+\sqrt{5})^Q + (1-\sqrt{5})^Q], \qquad (22)$$

аналогичное формуле Бинэ для классического ряда Фибоначчи: 1, 1, 2, 3, 5, 8. . . Одновременно суммирование S_Q дает последовательность 2, 8, 16, 30, оказывающуюся последовательностью значений $_Q i$, причем $_Q i$ может быть выражен как функция от Q:

$$_Q i = (1/2^{Q+1})[(1+\sqrt{5})^{Q+2} + (1-\sqrt{5})^{Q+2}] - 6, \qquad (23)$$

а равным образом и i_Q — как функция от Q:

$$i_Q = (1/2^Q)[(1+\sqrt{5})^{Q+1} + (1-\sqrt{5})^{Q+1}] - 5. \qquad (24)$$

2. Каждая Q-совокупность подразделяется на две q-совокупности, содержащие одинаковые количества простых чисел. Для нечетных и четных значений q последовательности S_q также являются рекуррентными, представляя обобщенный ряд Фибоначчи, называемый рядом Люка́ (1, 3, 4, 7).

Таблица 6

Распределение элементов с порядковыми номерами, равными простым числам, по n,l-подгруппам

Q	q	Значения n и l у элементов с Z, равными простым числам							Типы элементов
1	1	2 (1,0)							1s
	2	3 (1,0)							2s
2	3	5 (2,1)	7 (2,1)	11 (3,0)					2p2p3s
	4	13 (3,1)	17 (3,1)	19 (4,0)					3p3p4s
3	5	23 (3,2)	29 (3,2)	31 (4,1)	37 (5,0)				3d3d4p5s
	6	41 (4,2)	43 (4,2)	47 (4,2)	53 (5,1)				4d4d4d5p
4	7	59 (4,3)	61 (4,3)	67 (4,3)	71 (5,2)	73 (5,2)	79 (5,2)	83 (6,1)	4f4f4f5d5d5d6p
	8	89 (5,3)	97 (5,3)	101 (5,3)	103 (6,2)	107 (6,2)	109 (6,2)	113 (7,1)	5f5f5f6d6d6d7p

Примечание. Цифры в скобках под простыми числами обозначают: первая — величину главного квантового числа n, вторая — орбитального квантового числа l.

формирования электронных конфигураций атомов по мере роста Z. Следовательно, математическая модель распределения простых чисел по q-совокупностям может быть соотнесена с физической моделью, являющейся системой $(n+l)$-групп электронных состояний в атомах. Это соответствие нельзя признать идеальным, поскольку в группах $(n+l)=5$ и 6 имеет место нарушение отмеченной выше симметрии, а, кроме того, начиная с $(n+l)=6$ отсутствуют элементы с $Z=\rho$, отвечающие s-элементам. Тем не менее мы вправе утверждать, что построена некоторая модель явления периодичности, которая коротко может быть названа «моделью простых чисел» и которая находит физическую аналогию с моделью $(n+l)$-групп.

Выбор иных условий разбиения конечного множества чисел натурального ряда, таких, которые приводят к вычленению n- или l-групп, не позволяет говорить о более или менее отчетливой закономерности распределения простых чисел по этим группам. Поэтому «модель простых чисел» оказывается пригодной лишь для интерпретации системы $(n+l)$-групп.

Мы выбрали в качестве верхней границы конечного множества натуральных чисел число 120. Этот выбор оказывается обоснованным, если мы примем во внимание, что закономерности построения реальной схемы формирования электронных конфигураций атомов хорошо известны или с достаточной уверенностью

ЛИТЕРАТУРА

1. *Трифонов Д. Н.* О количественной интерпретации периодичности. М.: Наука, 1971. 159 с.
2. *Резерфорд Э.* Периодический закон и его интерпретация.— Вопр. истории естеств. и техн., 1969, вып. 4 (29), с. 101—110.
3. *Boyd R. J.* Electron density partitioning in atoms.— J. Chem. Phys., 1977, vol. 66, p. 356—358.
4. *Коулсон Ч.* Волновая механика и периодическая система.— В кн.: Сто лет периодического закона химических элементов. М.: Наука, 1969, с. 201—209.
5. *Яцимирский К. Б., Яцимирский В. К.* Химическая связь. Киев: Высшая школа, 1971. 303 с.
6. *Маррел Дж., Кеттл С., Теддер Дж.* Теория валентности. М.: Мир, 1968. 520 с.
7. *Щукарев С. А.* Неорганическая химия. Т. 1. М.: Высшая школа, 1970. 352 с.
8. *Щукарев С. А.* Некоторые перспективы прогнозирования свойств не открытых еще сверхтяжелых элементов.— В кн.: Прогнозирование в учении о периодичности/Под ред. Б. М. Кедрова и Д. Н. Трифонова. М.: Наука, 1976. 360 с.
9. *Rydberg I.* Untersuchungen über das System der Grundstoffe.— Lunds univ. årsskr., Avd. 2, 1913, Bd. 9, N 18. S. 1—41.
10. *Клечковский В. М.* Распределение атомных электронов и правило последовательного заполнения $(n+l)$-групп. М.: Атомиздат, 1968, 432 с.
11. *Трифонов Д. Н.* Структура и границы периодической системы. М.: Атомиздат, 1969. 271 с.
12. *Демков Ю. Н., Островский В. Н.* Правило заполнения $(n+l)$ в периодической системе Менделеева и фокусирующие потенциалы.— ЖЭТФ, 1972, т. 62, с. 125—132.
13. *Кедров Б. М., Трифонов Д. Н.*, О современных проблемах периодической системы. М.: Атомиздат, 1974. 72 с.
14. *Трифонов Д. Н.* Модели и моделирование в учении о периодичности.— В кн.: Моделирование в теоретической химии. М.: Наука, 1975. 172 с.
15. Прогнозирование в учении о периодичности/Под ред. Б. М. Кедрова и Д. Н. Трифонова. М.: Наука, 1976. 354 с.
16. *Novarro O., Wolf K.* Model hamiltonian for the periodic table.— Rev. mex. fis., 1971, vol. 20, N 4, p. 265—268.
17. *Odabasi H.* Some evidence about the dynamical group *SO* (4, 2) symmetries of the periodic table of elements.— In: Intern. Quant. Chem. Symp., 1973, N 7, p. 23—33.
18. *Sinanoglu O.* Remarcs on dynamical and noncompact groups in physics and chemistry.— Ibid., p. 45—52.
19. *Novaro O. A., Berrondo M.* Approximate symmetry of the periodic table.— J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys., 1972, vol. 5, p. 1104—1110.
20. *Berrondo M., Novaro O. A.* On a geometrical realization of the Aufbauscheme.— J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys., 1973, vol. 6, p. 761—769.
21. *Barut A. O.* Group structure of the periodical table.— In: Rutherford Centennial Lectures. New Zealand, 1972. 240 p.
22. *Фок В. А.* Атом водорода и неэвклидова геометрия.— Изв. АН СССР. Сер. 7, отд. физ.-мат. наук, 1935, № 2, с. 169—179.
23. *Claydon C. R., Carlson K. D.* Ground states, configurations and truncated orbital basis of iron-series atoms.— J. Chem. Phys., 1968, vol. 49, p. 1331—1339.

(Page 253)