

УДК 541.9

СИММЕТРИЧНАЯ КВАНТОВАЯ ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА
ЭЛЕМЕНТОВ (НЕЙТРАЛЬНЫХ АТОМОВ) – СК-ПСА
(или Новая периодизация Периодической системы)

Махов Б.Ф.

ОАО «НИИ Стали», Москва

Подробная информация об авторах размещена на сайте

«Учёные России» - <http://www.famous-scientists.ru>

Предлагается система нейтральных атомов, основанная на квантовых числах, определяющих равновесное квантовое состояние атома как системы в целом.

Расширенный вариант доклада на Конференции PAE в г. Sousse (Сусс, Тунис) 12-19.06.05 г. [6].

В современном варианте Периодической системы элементов Менделеева (ПСЭ-М) все элементы расположены (упорядочены) по возрастанию их порядкового номера – Z , что подтверждается законом Г. Мозли, связавшим частоту характеристического рентгеновского излучения (ХРИ) нейтральных атомов элементов с их Z .

Сам Менделеев, основываясь на открытом им Периодическом законе, разделил эту последовательность на периоды (всего 7) (соответственно назвал свою систему периодической), а большие периоды, начиная с 4-го, еще и на гор. ряды (всего 10). Кроме того, элементы горизонтальных рядов разделены на 8 групп (вертикальные ряды таблицы). Таким образом, каждый элемент таблицы находится на пересечении горизонтального ряда и вертикального ряда, принадлежность к ним – это координаты элемента.

Номер периода и номер группы при этом имеют довольно формальный характер, без достаточно четкого критерия. Первый период из двух элементов не вписывается в 8-ми клеточную схему, к тому же он единственный остался непарным. Вообще не поместились в каноническую краткую форму таблицы (КФТ) лантаноиды и актиноиды, помещенные под таблицей. Имеются и некоторые другие слабые места современной ПСЭ, не случайно предпринимаются многочисленные попытки разработать более совершенную форму ПСЭ-М.

Далее представлены результаты работы автора, выполненной в период 1973 – 31.08.91. В основу своего варианта Периодической системы нейтральных атомов (далее ПСА) автор положил свободный (нейтральный) атом (для простоты в виде наиболее стабильного изотопа) и характеризующий его набор из 4-х квантовых чисел, полученных на основе изучения присутствующего ему уникального линейчатого оптического спектра (ЛОС). Квантовые числа конкретного атома не изменяются со временем и представляют собой параметры, определяющие его равновесное стабильное квантовое состояние. То есть автор использует **чёткий и однозначный критерий**.

Практически все, что мы знаем о нейтральном атоме, а именно они соединяются в молекулы и так далее, исходит из его уникальных спектров (ЛОС) и лишь небольшая часть данных происходит из химических свойств.

Имеет смысл строить периодическую систему именно нейтральных атомов (ПСА) в лице их наиболее устойчивых изотопов, ибо:

- целый ряд элементов представлен всего одним изотопом;
- элементы с нечетным порядковым номером Z имеют не более 2-х изотопов;
- имеется вполне определенная зависимость для изотопов относительно наиболее устойчивого изотопа (с минимальной внутренней энергией).

- нет необходимости отражать в самой таблице все конкретные характеристики всех изотопов элемента (их можно привести в справочнике или дать в виде гиперссылки на компьютере).

Начнем с уже хорошо известного и взглянем на школьную таблицу ПСЭ-М. Для каждого элемента таблицы в ней указана его электронная формула (например, для водорода – $1s^1$, что является формой записи того факта, что главное квантовое число $n = 1$, орбитальное квантовое число $l = 0$, и в электронной оболочке на этом квантовом энергетическом подуровне имеется один электрон).

В современной форме ПСЭ-М (краткая форма таблицы- КФТ) ячейка каждого элемента окрашена в один из четырех цветов в соответствии с конкретным значением орбитального квантового числа l и расположены они в виде групп последова-

тельных элементов – это (перечислено в порядке появления):

1) s -элементы ($l = 0$) – это элементы I и II групп (щелочные и щелочноземельные элементы) (в 1,2,3,4,6,8 и 10 гор. рядах).

2) p -элементы ($l = 1$) – это элементы III-VIII групп (во 2,3,5 и 7 гор. рядах).

3) d -элементы ($l = 2$) – это элементы III-VIII групп (в 4,6,8 и 10 гор. рядах) и I и II групп (в 5, 7 и 9 гор. рядах), т.е. разорваны в 2 ряда.

4) f -элементы ($l = 3$) — не уместились в таблице, расположены отдельно внизу (лантаноиды и актиноиды).

Всего 20 таких групп в пределах $Z \leq 120$, причем в их числе имеется всего 4 типа l -групп.

Ёмкость такой l -группы определяется по формуле Е. Стонера $N_l = 2(2l+1)$. Кратко эти группы охарактеризованы в табл 1.

Таблица 1. l -группы элементов ПСЭ в пределах $Z \leq 120$

l -группа	Ёмкость группы $N_l = 2(2l+1)$ Формула Е.Сонера	Кол-во nl -групп в пределах $Z \leq 120$	Всего таких элементов	Сравнение с гор. рядом из 8 групп ($N_l - 8$)	Примечание
s -элементы ($l = 0$)	2	8	$2 \times 8 = 16$	- 6	Объединены в КФТ в один гориз. ряд из 8 элементов
p -элементы ($l = 1$)	6	6	$6 \times 6 = 36$	- 2	
d -элементы ($l = 2$)	10	4	$10 \times 4 = 40$	+ 2	Два дополнит. элемента втиснуты в VIII группу
f -элементы ($l = 3$)	14	2	$14 \times 2 = 28$	+ 6	Не уместились в КФТ и помещены под таблицей
Итого: 4 типа l -групп	=	20	120	-	-

Известно также, что число электронов в атоме равно порядковому номеру Z , что означает, что в каждом последующем элементе на одной из внешних оболочек появляется очередной новый электрон. Квантовое состояние этого электрона и тем самым основное квантовое состояние

всего нейтрального атома определяется согласно принципу запрета В. Паули (1925, установлен на основе изучения спектров) конкретным набором из 4-х квантовых чисел (n, l, m_l, m_s). В настоящее время такие квантовые числа в результате изучения спектров нейтральных атомов

(т.е. атомов в изолированном состоянии) определены для всех известных элементов.

Изменение набора конкретных для данного элемента квантовых чисел вызывает изменение и суммарных квантовых чисел, записываемых обычно в виде т.н. спектрального термина $^{2S+1}L_J$, также определенного для каждого из известных элементов. См, например, Дж. Эмсли «Элементы», Москва, «Мир», 1993 [8].

Значение названных квантовых чисел до настоящего времени недостаточно осознано. Так, они не приведены для характеристики элементов даже в самых последних изданиях физической и химической энциклопедий. Зато щедро дополнены физическими и химическими свойствами простого вещества, очень важными для практики, но все же производными (вторичными).

Именно эти квантовые числа являются параметрами основного квантового состояния нейтрального атома в целом (не изменяются во времени) и однозначно определяются по результатам анализа спектров атома, которые строго индивидуальны для каждого конкретного атома, т.е.

являются его визитной карточкой. Многие элементы и обнаружены по их спектрам. Осознание физического смысла квантовых чисел - путь к созданию теории атома (пока только модели), а теория атома и теория и форма представления ПСА - это как две стороны одной медали. Они параллельно развиваются и взаимно обогащают друг друга.

Согласно правилу Ф.Гунда в первой половине группы спиновое квантовое число $m_s = +\frac{1}{2}$, а во второй - $m_s = -\frac{1}{2}$. Магнитное квантовое число m_l изменяется одинаково от $-l_{max}$ до $+l_{max}$.

Порядок следования всех $20\ nl$ -групп по возрастанию квантовых энергетических уровней (КВЭУ) определяется опять же из спектров свободных атомов. Номер такой группы N_{nl} определяется по формуле R. Nakala (1948). [7]

$$N_{nl} = \frac{(n+l)(n+l+2)}{4} + \frac{1-(-1)^{n+l}}{8} - l$$

Эти nl -группы объединяются в более крупные $(n+l)$ -группы последовательных атомов согласно правилам академика В.М. Ключковского (1900-72), см. табл. 2.

Таблица 2. $(n+l)$ -периоды и их пары (диады) в пределах $Z \leq 120$

№ диады $M = l_{max} + 1$	Состав диады $(n+l)$ -группы (периоды)	Кол-во nl -групп в периоде	Состав $(n+l)$ -группы	$l_{max} =$	Ёмкость $(n+l)$ -периода $N_{n+l} = 2M^2$
1	1-я и 2-я	1	<i>s</i> -элементы только	0	2
2	3-я и 4-я	2	<i>p</i> -элементы, <i>s</i> -элементы	1	8
3	5-я и 6-я	3	<i>d</i> -элементы, <i>p</i> -элементы, <i>s</i> -элементы	2	18
4	7-я и 8-я	4	<i>f</i> -элементы, <i>d</i> -элементы, <i>p</i> -элементы, <i>s</i> -элементы	3	32
		Итого: $10 \times 2 =$ 20			

Из табл. 2 видно, что СК-ПСА наглядно демонстрирует принцип сохранения и развития (в каждой новой M -диаде сначала появляется дополнительный горизонтальный ряд с увеличенным на единицу

l_{max} , т.е. $M = l_{max} + 1$). Последовательность - "*fpds*", а не "*sfdp*".

Ёмкость $(n+l)$ -периода N_{n+l} без всякой мистики получается сложением ёмкостей составляющих его l -групп

$$N_{n+l} = \sum_{l=0}^{l_{\max}} Nl = \sum_{l=0}^{l_{\max}} 2(2l+1) = 2(l_{\max} + 1)^2 = Z_M = Z_l - 1 = \frac{2l(2l+1)(2l+2)}{6} = \sum_{l=0}^{l_{\max}=M-1} (2l)^2 ;$$

$2M^2$ (см. табл. 2).

Начало (порядковый номер исходного элемента - Z_M) каждой такой M-диады (пары периодов) можно получить из выполненного автором тождественного преобразования формулы В.М. Ключковского [3] для номера Z_l элемента, при котором впервые появляется элемент с данным значением l_{\max}

тогда при $l_{\max} = 0; 1; 2; 3; 4 \dots$ имеем $Z_M = 0; 4; 20; 56; 120 \dots$, т.е. это так называемые тетраэдрические числа, что опосредованно связано с некоторыми минимальными исходными для диады квантовыми энергетическими уровнями (тетраэдр имеет минимальную площадь поверхности при фиксированном объёме).

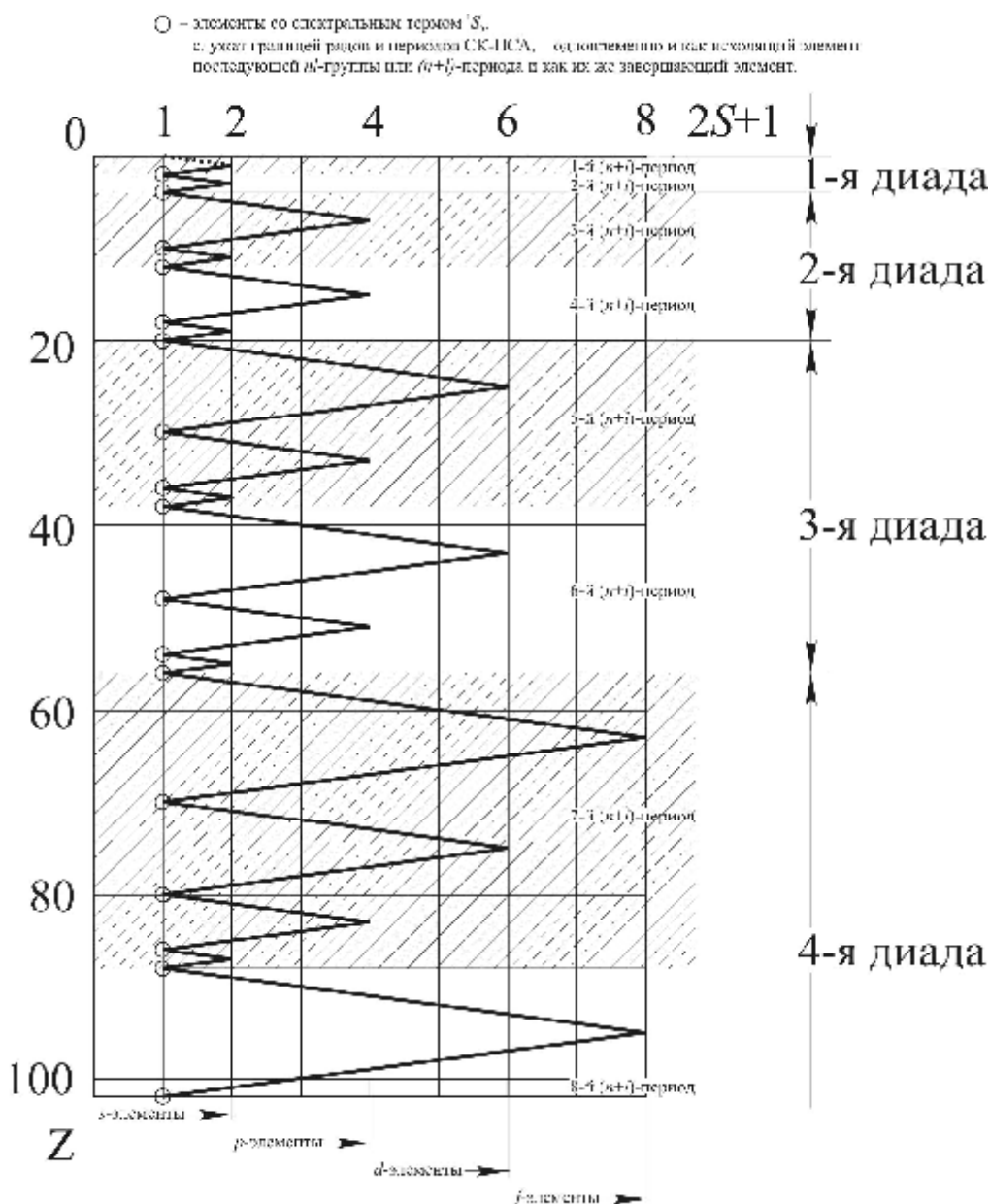


Рис. 1. Периодическая зависимость между порядковым номером Z и мультиплетностью $(2S+1)$ основного терма нейтральных атомов [3] с разметкой на $(n+1)$ -периоды и их диады

Особенно наглядным является график зависимости мультиплетности $(2S+1)$ спектрального термина от Z (рис. 1), где предельно четко видны границы nl -групп, $(n+1)$ -периодов и диад (пар периодов).

Используя отмеченные факты, автор и предложил новую форму графического изображения системы – «**Симметричную квантовую ПСА (СК-ПСА)**», в которой:

1) период СК-ПСА представляет собой $(n+l)$ -группу и все периоды, как и сами группы – парные. Каждая пара периодов составляет диаду. Всего в пределах $Z \leq 120$ имеется 4 диады.

2) каждый горизонтальный ряд представляет собой одну из nl -групп (s -, p -, d -, f -элементов) с $n = \text{const}$. В качестве исходного атома слева к ряду присоединен последний элемент предыдущего горизонтального ряда. Каждый горизонтальный ряд начинается и кончается элементом со спектральным термом 1S_0 (см. рис. 1).

3) Все горизонтальные ряды выстроены симметрично относительно центрального атома горизонтального ряда, завершающего первую половину l -группы.

4) На самом верху в таблицу включен свободный нейтрон, он же исходный элемент первого горизонтального ряда.

Тогда в предложенной автором форме таблицы набор из 4-х квантовых чисел становится координатами каждого конкретного атома:

1) Сумма $(n + l)$ определяет период, к которому относится атом. Ряд авторов уже использовали такой подход, наиболее близко – проф. Черкесов А.И. [4]

2) Квантовое число l (с соответствующим ему n) определяет горизонтальный ряд в составе $(n + l)$ -периода – конкретную l -группу, которой принадлежит атом.

3) Спиновое квантовое число m_s (со своим знаком) указывает – в какой половине таблицы (левой или правой) расположен атом.

4) Магнитное квантовое число m_l (со своим знаком) указывает на конкретный вертикальный ряд, в котором распо-

ложен атом. Таким образом, группа (в отличие от группы в ПСЭ-М) – это атомы с одинаковыми квантовыми числами l и m_l , а также координационным индексом E_k В.М. Ключковского.

Номер группы определяется принадлежностью к определенной l -группе и количеством электронов, поступивших на этот квантовый энергетический уровень. Так первая группа щелочных металлов (+водород) получает обозначение s^1 , вторая группа щелочноземельных металлов – s^2 , и т.д.

СК-ПСА, отражающая вышеуказанные принципы построения, приведена в табл. 3, форма которой:

1) в минимальной степени отличается от канонический ПСЭ-М;

2) лишена многих недостатков ПСЭ-М;

3) отвечает современным достижениям науки;

4) имеет перспективы для дальнейшего углубления знаний по теории строения атома и теории ПСА, уяснению физического смысла квантовых чисел и математическому выражению закона периодичности. Некоторые из этих вопросов будут изложены в готовящейся к печати книге автора;

5) является основой для лучшего понимания физических и химических свойств как самих атомов, так и образуемых ими простых веществ и химических соединений;

6) является теоретическим фундаментом для весьма перспективного направления – нанотехнологий, имеющих дело с материалами и веществами на атомно-молекулярном уровне;

7) в силу своей простоты и наглядности СК-ПСА наиболее пригодна для преподавания.

Данная форма таблицы разрабатывалась автором в 1973-1991 гг. С изложенными вопросами можно также ознакомиться в книге автора [5].

Квант. число l	Квант. число m_l	Квант. число m_s	Первая подоболочка $m_s = +1/2$										Вторая подоболочка $m_s = -1/2$										$2l+1$	$2s+1$	$2l+1$
0	0	0																					1	2	1
1	10	1																					3	2	2
	20	2																					5	2	2
2	30	3																					7	2	3
	40	4																					9	2	3
	50	5																					11	2	3
	60	6																					13	2	3
	70	7																					15	2	3
3	80	8																					17	2	3
	90	9																					19	2	3
	100	10																					21	2	3
	110	11																					23	2	3
4	120	12																					25	2	3
	130	13																					27	2	3
	140	14																					29	2	3
	150	15																					31	2	3
5	160	16																					33	2	3
	170	17																					35	2	3
	180	18																					37	2	3
	190	19																					39	2	3
6	200	20																					41	2	3
	210	21																					43	2	3

Таблица 3. Симметричная квантовая периодическая система нейтральных атомов

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Трифонов Д.Н. "Структура и границы периодической системы", М., Атомиздат, 1976, 271 стр.
2. Ключковский В.М. «Распределение атомных электронов и правило последовательного заполнения $(n+l)$ -групп», М., Атомиздат, 1968
3. Ключковский В.М. «Развитие некоторых теоретических проблем Периодической системы Д.И. Менделеева» (доклад

- на симпозиуме X Менделеевского съезда). - М., Наука, 1971, стр. 54-67.
4. Черкесов А.И. Квантовые состояния ядерных протонов -физическая основа ПЗХЭ. Известия ВУЗов, Серия «Химия и химическая технология». 1982, т. XXV, № 11, с.1302.
5. Махов Б.Ф. «Симметричная квантовая периодическая система элементов», Москва, КМП «Фирма ЭРА», 1997, 28 с., ISBN 5-86700-027-3.

6. Махов Б.Ф. Тезисы доклада на конференции РАЕ в г. Sousse, Тунис 12-19.06.05 «СК-СПЭ (нейтральных атомов) или новая периодизация Периодической системы» // *Фундаментальные исследования*, 2005, № 6, с. 52–56, ISSN 1812-7339.

7. R.Hakala Letter to the Editor, "J. Chem.Educ.", 1948, v.25, p.229.

8. Дж. Эмсли (John Emsley) «Элементы», Москва, «Мир», 1993, 256 стр с илл.

**SYMMETRIC QUANTUM PERIODIC SYSTEM OF ELEMENTS (NEUTRAL ATOMS)
– SQ-PSE (or New periodization of Periodic system)**

Makhov B.F.

Public Corporation Research Institute of Steel, Moscow

The system of neutral atoms based on quantum numbers determining an equilibrium quantum state of the atoms as a system on the whole is proposed.

Extended variant of the report at the conference in Sousse, Tunis, on June 12-19, 2005 [6].