ALGORITHM OF POSITIONING OF ATOMS OF CHEMICAL ELEMENTS

Makarov L.M. (Russian Federation) Email: Makarov339@scientifictext.ru

Makarov Leonid Mikhaylovich - PhD in System Analysis, Associate Professor,
DEPARTMENT OF DESIGNING AND PRODUCTION OF RADIO-ELECTRONIC MEANS,
ST. PETERSBURG STATE UNIVERSITY OF TELECOMMUNICATIONS OF THE PROF. M.A. BONCH-BRUYEVICH,
SAINT PETERSBURG

Abstract: the recurrent model of positioning of chemical elements a basis which are a natural number sequence and quantitative indicators of electronic orbital's is considered. Natural regularities of formation of electron shells of atoms of the known chemical elements are systematized, concepts of material objects of a microcosm which condition is described in terms of the recurrent model having ability to declare properties of earlier unknown separate atomic designs and molecular connections on the basis of various groups of chemical elements are entered.

Keywords: recursive model, set of chemical elements, natural numerical row.

АЛГОРИТМ ПОЗИЦИОНИРОВАНИЯ АТОМОВ ХИМИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ

Макаров Л.М. (Российская Федерация)

Макаров Леонид Михайлович – кандидат технических наук, профессор,
кафедра конструирования и производства радиоэлектронных средств,
Санкт-Петербургский государственный университет телекоммуникаций им. проф. М.А. Бонч-Бруевича,
г. Санкт-Петербург

Аннотация: рассмотрена рекуррентная модель позиционирования химических элементов, основу которой составляют натуральный ряд чисел и количественные показатели электронных орбиталей. Систематизированы Природные закономерности формирования электронных оболочек атомов известных химических элементов, введены понятия материальных объектов микромира, состояние которых описывается в терминах рекуррентной модели, обладающей способностью декларировать свойства ранее неизвестных отдельных атомарных конструкций и молекулярных соединений на основе различных групп химических элементов.

Ключевые слова: рекурсивная модель, набор химических элементов, натуральный числовой ряд.

УДК 519.61 + 530.145

Позиционирование объекта материального мира, как процесс, формируется на двух понятиях: системе координат и правилах размещения объекта в избранной системе координат. Такие представления интуитивно подтверждались опытом в Древнем мире. Например, при идентификации участков земли в сельском хозяйстве, установлении границ государства, начертании карт дорог.

В разное время научные успехи в области математики, физики и химии создавали новые представления о системах позиционирования. В частности наряду с традиционным представлением о счетном множестве объектов в декартовой системе координат, получает активное развитие геометрия Н. Лобачевского. Пространственные координаты новой неевклидовой системы координат создавались на понятие сферы, которые допускали трансформацию сферы в плоскость. Взаимная связь декартовой и сферической систем позиционирования объектов способствовала развитию большого количества научных дисциплин.

Размышления об устройстве окружающего мира в терминах физики появились в работах Аристотеля. Понимая под объектом материальные тела, обсуждалось мнение о наличии составных частей. Философия мышления этими категориями допускала существование мельчайших элементов объекта внешнего мира. По мнению философов Древней Греции, все материальные объекты едины и построены из атомов. Атомы обладают различиями. Набор из разных атомов создает неодинаковые по свойствам и внешнему виду объекты материального мира. Такие объекты обладают разными «сущностями». Задача идентификации сущностей и их количественное сопоставление постоянно актуализируется в научном сообществе.

Научные основы атомно-молекулярного учения формировались в разных национальных научных школах. Хорошо известны научные успехи эпохи XVIII – XIX столетия. Наиболее известные работы этого периода о строении материальных тел представлены в научных трудах М.В. Ломоносова, Л. Лавуазье, Ж. Пруста, Д. Дальтона, А. Авогадро и других исследователей [1].

Современные представления об атомарных конструкциях химических элементов создавались на основе исторически сложившихся представлений, дополненных инструментальными исследованиями, а также математическими моделями. По исторически устоявшейся традиции, основным параметром

модели атомарной структуры выбиралась масса. На основании показателя массы химического элемента формировалась схема идентификации. Несмотря на наличие многих дефектов такой классификации химических элементов, удалось создать сферическую модель атомарной структуры. Представления об атомарной структуре многократно проверялись на сферической модели положительно заряженного ядра атома и некоторого количества электронов, располагающихся на электронных орбиталях.

В дальнейшем параметр массы стали рассматривать как второстепенный, хотя и важный. Наиболее значимым параметром атомарной конструкции химического элемента признается заряд ядра. Новые результаты исследований показали, что у всех атомов одного и того же химического элемента число протонов, размещенных в ядре, всегда одинаково. Число протонов равно заряду атомного ядра и равно количеству электронов. Этот эффект воспроизводит электрически нейтральные свойства атома. Наряду с этим, количество нейтронов, присутствующих в атомарной структуре, может меняться. Поэтому масса одного и того же химического элемента может быть различна. Это представление составило основу теории радиоактивного распада элементов.

Закрепляя эти представления в квантовой теории строения атомов, постулируется ряд принципов: все химические элементы обладают порядковым номером N_i ; для каждого атома можно указать уникальный набор из четырех квантовых чисел $[n, l, m, s]$; атомарная структура создается на системе из семи электронных орбиталей, нумеруемых от ядра. Количественное соотношение электронов по семи орбиталям, задается выражением:

$$2, _8, _18, _32, _32, _32, _32 \quad (1)$$

По принципу Паули в структуре любого атома запрещено существование двух идентичных электронов, обладающих одинаковым набором квантовых чисел.

Следуя этому правилу, создадим схему формирования электронных орбиталей. Начальные позиции схемы, для химических элементов с порядковыми номерами с 1 по 10, отражают общий принцип добавления электронов на внешние орбитали атома. Введем функционал вида:

$$A_{i0} = a_1, a_2, a_3, a_j, \dots, a_6, a_7 \quad (2)$$

Где a_j – количественный показатель присутствия электронов на j - орбитали атома с порядковым номером i .

Действительно, справедливо утверждение: любому порядковому номеру N_i химического элемента соответствует уникальная структура электронных орбиталей A_{i0} .

$$N_i \Leftrightarrow A_{i0} \quad (3)$$

Примем во внимание, что для каждого атома, обладающего порядковым номером N_i , всегда найдется уникальная стартовая структура A_{i0} орбиталей, которая однозначно сопоставляется с числовым набором электронов в атоме. Общее выражение для «стартового кода» любого атома представим в виде:

$$A_{i00} = a_1 a_2 a_3 a_j \dots a_7 0 \quad (4)$$

Где a_j - знак числового кода в разряде j

Применительно ко всему набору химических элементов создадим код состояния атома A_{i00} . Результаты представим в серии таблиц.

Таблица 1. Итерационная схема формирования кода A_{i00}

A_{i00}	a_1	a_2	A_3	a_4	a_5	a_6	a_7	a_8
-----------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------

1	1	0						
2	2	0						
3	2	1	0					
4	2	2	0					
.....								
9	2	7	0					
10	2	8	0					
11	2	8	1	0				
12	2	8	2	0				

Начиная с химического элемента под номером 11, происходит заполнение 3 кодовой позиции (третий период классической схемы позиционирования атомарных структур [1]). Эта процедура распространяется на атомарные структуры, обладающие позиционными номерами с 12 по 28 номер. Код для атомов с номерами 28 и 29 представим набором десятичных чисел:

Таблица 2. Итерационная схема формирования кода A_{i00}

A_{i00}	a_1	a_2	A_3	a_4	a_5	a_6	a_7	a_8
28	2	8	18	0				
29	2	8	19	0				

Далее, после позиционного номера 29 по аналогии происходит формирование кодов следующих атомарных структур (таблица 3). Учитывая условие (1) для атома с номером 36 инициализируются процедура формирования 4 орбитали. При этом происходит модификация 3 орбитали атома.

Таблица 3. Итерационная схема формирования кода A_{i00}

A_{i00}	a_1	a_2	A_3	a_4	a_5	a_6	a_7	a_8
35	2	8	25	0				
36	2	8	18	8	0			

Развертка событий формирования атомарных структур аналогичным образом изменяется для химических элементов с номерами 53 и 54.

Таблица 4. Итерационная схема формирования кода A_{i00}

A_{i00}	a_1	a_2	A_3	a_4	a_5	a_6	a_7	a_8
53	2	8	18	25	0			
54	2	8	18	18	8	0		

По аналогии имеем схему формирования кодов для атомарных структур с номерами 71 и 72.

Таблица 5. Итерационная схема формирования кода A_{i00}

A_{i00}	a_1	a_2	A_3	a_4	a_5	a_6	a_7	a_8
71	2	8	18	18	25	0		
72	2	8	18	32	12	0		

Аналогичную схему воспроизводим для атомов с номерами 85 и 86.

Таблица 6. Итерационная схема формирования кода A_{i00}

A_{i00}	a_1	a_2	A_3	a_4	a_5	a_6	a_7	a_8
85	2	8	18	32	25	0		
86	2	8	18	32	18	8	0	

Аналогичную схему воспроизводим для атомов с номерами 103 и 104.

Таблица 7. Итерационная схема формирования кода A_{i00}

A_{i00}	a_1	a_2	A_3	a_4	a_5	a_6	a_7	a_8
103	2	8	18	32	18	25	0	0
104	2	8	18	32	32	12	0	0

Аналогичную схему воспроизводим для атомов с номерами 117 и 120.

Таблица 8. Итерационная схема формирования кода A_{i00}

A_{i00}	a_1	a_2	A_3	a_4	a_5	a_6	a_7	a_8
117	2	8	18	32	32	25	0	0
118	2	8	18	32	32	18	8	0
119	2	8	18	32	32	18	9	0
120	2	8	18	32	32	18	10	0

Квантовые числа характеризуют энергетические параметры атомарной конструкции. В качестве основных показателей состояния атомарной структуры принимаются: главное квантовое число (n) и орбитальное квантовое число (l). Главное квантовое число соответствует позиционному номеру химического элемента, а орбитальное квантовое число определяет форму траекторий движения электронов по орбиталям. По эмпирическому правилу В. Клеchkовского, электроны занимают в основном состоянии атома уровень определяемый соотношением главного и орбитального квантового числа [1].

Признание квантовой теории строения атомарных структур потребовало изменения основных физических понятий. Движение электронов по орбиталям атома стало позиционироваться как волновой процесс. Понятие когерентности волновых процессов электронов расширилось на весь набор электронов атомарной структуры.

Действительно, по теории корпускулярного волнового дуализма [1], состояние любого материального объекта можно позиционировать пакетом волновых уравнений или математической моделью. Используя в качестве базиса эти представления, синтезируется волновое уравнение Шредингера [1]. С позиции квантовой теории это уравнение не содержит запрета на принципы выбора частиц, составляющих объект (вещество, атом). Тогда, любой частице атомарной структуры можно сопоставить волны де Бройля. Такие волны можно описать либо уравнением Шредингера, либо математической моделью [1].

Расширим это представление. Математическая модель, характеризующая состояние объекта создается на основе рассмотрения топологии простых элементов, составляющих структуру объекта [2]. Для атомарной структуры такими элементами являются электроны. Эти представления актуализируют проблему построения информационного описания состояния атомарной структуры на основе знаний о количестве электронов. По квантовой теории количество электронов характеризует заряд атома, который равен порядковому номеру химического элемента. Следует отметить, что порядковый номер атома это натуральное число. По теории чисел позиционная система счисления обладает свойствами периодичности. Свойство периодичности обнаруживается для любого числа, представленного набором из десяти цифр:

$$0, _1, _2, _3, _4, _5, _6, _7, _8, _9 \quad (5)$$

Набор из десятичных цифр можно рассматривать в качестве кода. Тогда, структуру атома, представленную числовым набором электронов, можно сопоставить с кодовым идентификатором. Это справедливо, поскольку любой атом химического элемента обладает уникальной электронной оболочкой. Наличие кодового идентификатора в сочетании с номером позиции химического элемента убедительно свидетельствует о возможности создания модели, адекватной постулатам квантовой модели [2].

Используя свойство цикличности знаков в десятичном коде, реализуем рекуррентную процедуру модификации кода:

$$\begin{aligned}
 A_{i00} &= a_1 a_2 a_3 a_j \dots a_7 0 \Rightarrow \text{Старт} \\
 A_{ip+1} &= A_{i00} - 9 \\
 A_{ip+2} &= A_{ip+1} - 9 \\
 A_{ip+3} &= A_{ip+2} - 9 \\
 &\vdots \\
 A_{ip+k} &= A_{ip+(k-1)} - 9 \\
 A_{ipp} &= a_1 a_2 a_3 a_j \dots a_7 \Rightarrow \text{Смон}
 \end{aligned} \quad (6)$$

По завершению процедуры (6) вычислим показатель:

$$A_{i00} - A_{ipp} = P \quad (7)$$

Где Р – характеризует продолжительность развертки событий по модификации кода

Очевидно, осуществляя модификацию кода A_{i0} в крайних правых разрядах, получим вариативные значения Р. Иллюстрацией этого тезиса служит набор показателей Р, полученных посредством расчета, для нескольких химических элементов. Результаты вычислений представлены в таблице 9.

Таблица 9. Расчетные значения показателя Р

N _i					
10	11	12	13	14	15
Неон	Натрий	Магний	Алюминий	Кремний	Фосфор
Ne	Na	Mg	Al	Si	P
2	2	2	2	2	2
8	8	8	8	8	8
0	1	2	3	4	5
0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0
A _{i00}					
A ₁₀₀ =280	A ₁₁₀ =2810	A ₁₂₀ =2820	A ₁₃₀ =2830	A ₁₄₀ =2840	A ₁₅₀ =2850
A _{ipp}					
A _{10p} =208	A _{10p} =2801	A _{10p} =2802	A _{10p} =2803	A _{10p} =2804	A _{10p} =2805
P					
72	9	18	27	36	45

Просмотр результатов расчета, выявляет простые закономерности. Все вычисленные показатели Р обладают кратностью девяти, а так же имеют целочисленное значение, что хорошо согласуется с определением натуральных чисел.

Традиционно, свойства первых атомарных структур – водорода и гелия, полагаются хорошо изученными и, достаточно простыми. Именно поэтому, обзор полученных данных расчета представлен начиная с третьей позиции.

Полученные данные расчета (таблица 9) отчетливо показывают наличие смены свойств атомов на рубеже 10 и 11 номера. Действительно, порядковый номер 11 соотносится с неонам – инертным газом. Этот атом на своем порядковом номере отождествляется с ключевым переходом к новому – третьему периоду периодической системы химических элементов. Третий период характеризуется добавлением орбитали. Размещением одного электрона на этой орбитали.

Естественным расширением этого понятия является определение связи натурального ряда чисел с электронной конфигурацией ядра атома. В представленном примере расчета хорошо просматривается сочетание этих параметров. Сочетание можно признать эффективным, поскольку, несмотря на существующие различия в представленном наборе химических элементов, не только отчетливо выделяется граница второго и третьего периода, но и формируется представление о системном увеличении показателя Р.

Действительно, переход от атома неона к последующим элементам носит системный характер. В первую очередь в таком переходе не нарушается дискретность и кратность новых значений Р девяти. И в тоже время, проявление дискретного характера показателя Р свидетельствует о наличии фундаментального физического закона заполнения орбиталей электронами. Внимательный просмотр известных атомарных структур отчетливо демонстрирует отсутствие абсолютно полного системного характера заполнения электронных оболочек. Дискретность смены значений Р, столь характерная для атомарных структур, сочетается со свойствами периодичности, Эта же аналогия прослеживается и у десятичных позиционных кодов, что позволяет воспроизвести уникальный набор блоковых структур.

Представление о блочной структуре результатов хорошо согласуется с классическим понятием периода, в таблице химических элементов. Следуя этим представлениям проведем необходимые расчеты показателя Р и создадим сводную таблицу результатов (таблица 10).

Таблица 10. Расчетные значения параметра Р для набора N_i

N_i	Показатель Р	N_i	Показатель Р
1.	**	25.	135
2.	**	26.	144
3.	9	27.	153
4.	18	28.	162
5.	27	29.	171
6.	36	30.	180
7.	45	31.	189
8.	54	32.	198
9.	63	33.	207
10.	72	34.	216
11.	9	35.	225
12.	18	36.	72
13.	27	37.	81
14.	36	38.	90
15.	45	39.	99
16.	54	40.	108
17.	63	41.	117
18.	72	42.	126
19.	81	43.	135
20.	90	44.	144
21.	99	45.	153
22.	108	46.	162
23.	117	47.	171
24.	126	48.	180

Таблица 11. Расчетные значения параметра Р для набора N_i /продолжение таблицы 10/

N_i	Показатель Р	N_i	Показатель Р
49.	189	74.	126
50.	198	75.	135
51.	207	76.	144
52.	216	77.	153
53.	225	78.	162
54.	72	79.	171
55.	81	80.	180
56.	90	81.	189
57.	99	82.	198
58.	108	83.	207
59.	117	84.	216
60.	126	85.	225
61.	135	86.	72
62.	144	87.	81
63.	153	88.	90
64.	162	89.	99
65.	171	90.	108
66.	180	91.	117
67.	189	92.	126
68.	198	93.	135
69.	207	94.	144
70.	216	95.	153
71.	225	96.	162

72.	108	97.	171
73.	117	98.	180

Таблица 12. Расчетные значения параметра P для набора N_i /продолжение таблицы 11/

N_i	Показатель P	N_i	Показатель P
99.	189	111.	171
100.	198	112.	180
101.	207	113.	189
102.	216	114.	198
103.	225	115.	207
104.	108	116.	216
105.	117	117.	225
106.	126	118.	72
107.	135	119.	81
108.	144	120.	90
109.	153	121.	99
110.	162	122.	108

Для систематизации полученных результатов создадим блочные структуры (рис. 1 – рис. 8), иллюстрирующие классические свойства периодичности свойств химических элементов.

N_i	3		18
P	9		72

Рисунок 1. Блок данных 1

N_i	19		35
P	81		225

Рисунок 2. Блок данных 2

N_i	36		53
P	72		225

Рисунок 3. Блок данных 3

N_i	54		71
P	72		225

Рисунок 4. Блок данных 4

N_i	72		85
P	108		225

Рисунок 5. Блок данных 5

N_i	86		103
P	72		225

Рисунок 6. Блок данных 6

N_i	104		117
P	108		225

Рисунок 7. Блок данных 7

N_i	118		135
P	72		225

Рисунок 8. Блок данных 8

В качестве примера рассмотрим блок 1: для атома под номером 3 вычислено значение $P=9$; далее дискретный характер изменения параметра P приводит к значению $P=72$. Это финальное значение для группы атомов с 3 по 18 номер. Следующий блок стартует с номера 19, для которого $P=81$. Представленные табличные данные позволяют установить наличие циклических повторений свойств химических элементов. Например, блок 3 блок 4 используют одинаковые стартовые атомы: номер 36 – криптон и номер 54 – ксенон. Наборы химических элементов внутри серий с номера 36 по номер 53 и с номера 54 по номер 71 обладают схожими свойствами. При этом номер 71 является финальным для большой группы атомов – лантаноидов. Такие закономерности проявления цикличности проявляются на всем массиве расчетных данных.

Созданная модель позиционирования химических элементов демонстрирует сохранение основных постулатов квантовой теории, выделяет важность связи натурального числового ряда с электронной структурой атома. Используя созданную модель в качестве информационного анализатора, адекватно позиционируется известный в настоящее время набор химических элементов.

Наличие физической связи между порядковым – позиционным номером химического элемента и численной конфигурацией распределения электронов по орбиталям, эмпирически зафиксированное в своде правил, приобретает отчетливые математические закономерности. Используя представления о

заряде и топологии атомарной структуры, а также систематизируя имеющиеся знания, формируется естественная цепь природных событий образования химических элементов.

Синтез блочных структур убедительно свидетельствует о возможности позиционирования свойств химических элементов с большими порядковыми номерами. Эта особенность созданной модели чрезвычайно важна, поскольку физический эксперимент по обнаружению и изучению свойств новых атомарных структур требует больших затрат.

Список литературы / References

- 1 *Степанов Н.* Квантовая механика и квантовая химия. Мир, 2001.
- 2 *Макаров Л.* Интеллектуальные системы и поля понятий. Труды учебных заведений связи, 2016. Т. 2. № 3. С. 50-54.