

## ДИАДЫ ХИМИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Спирин Э.К., Мальчик А.Г.

*Юргинский технологический институт (филиал) ФГБОУ ВПО «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», г. Юрга (652055, Кемеровская область, г. Юрга, ул. Ленинградская, 26), e-mail: ale-malchik@yandex.ru*

Сформированная в предыдущих работах одного из авторов концепция полиномиальной природы периодичности использована при сравнении математических свойств диад (циклов) химических элементов в трактовке Ахумова, Капустинского (с нулевым периодом) и без такового. Рассматривались как полные диады, так и составляющие их слоевые и семейственные или клановые. Разница между ними состоит в том, что первые описываются полиномом пятой степени, вторые подчиняются уравнению кубической параболы. Примечательной особенностью циклового принципа представления натурального ряда элементов является то, что при этом элиминируется феномен четного-нечетного, то есть влияние вторичной периодичности. Проведено сравнительное обсуждение результативности использованных подходов к формированию диад и вариантов их математического представления. Показано, что свойства совокупностей диад (циклов) не менее многочисленны, чем свойства сумм составляющих их менее масштабных множеств, например, слоев, лучей, диагоналей и прочих последовательностей, возможных в генеральном множестве – периодической системе элементов. Кроме того, это подтверждение концепции о тесной связи закона Д.И. Менделеева с теорией чисел.

Ключевые слова: периодический закон, система химических элементов, полином, диада.

## MATHEMATICAL PROPERTIES OF THE DIAD CHEMICAL ELEMENTS

Spirin E.K., Malchik A.G.

*Yurga Institute of Technology (branch) of Tomsk Polytechnic University, Leningradskaya str. 26, 652055, Yurga, Kemerovskaya oblast, Russia, e-mail: ale-malchik@yandex.ru*

Formed in the previous works of one of the authors of the concept of a polynomial nature of periodicity used in the comparison of the mathematical properties of the dyads (cycles) of chemical elements in the interpretation of Ahumova, Kapustinskiy (zero period) and without it. Considered as complete dyad and their constituent layers and nepotism or clan. The difference between the two is that the former are described by a polynomial of degree 5, the latter obey the equation of a cubic parabola. A notable feature of the principle of cyclic representations of the natural numbers of elements is the fact that in this case eliminated the phenomenon of even-odd, that is, the influence of secondary periodicity. A comparative discussion of the effectiveness of the approaches to the formation of dyads and options for their mathematical representation. It is shown that the properties of the aggregate of the dyads (cycles) not less numerous than the sum of their constituent properties of smaller sets, such as layers, rays, diagonals and other sequences possible in the master set – the periodic table of elements. In addition, this proof of concept of the close connection of the law D.I. Mendeleev and the theory of numbers.

Keywords: periodic law, the system of chemical elements, polynomial dyad.

Исследования по математизации Периодического закона Д.И. Менделеева, наиболее полно изложенные в последней по времени работе [6], получили подтверждение при рассмотрении математических свойств диад. В работе [1] автор дополнил систему нулевыми рядом и периодом, которые, по его представлениям, состояли из электрона и нейтрона, вследствие чего конструкция приобрела логическую завершенность «сверху» (имелась в виду каноническая короткая прямоугольная форма), и выявилась ранее неизвестная разновидность периодичности – периодичность периодов, позволяющая объединить их попарно в диады или циклы, различающиеся по числу членов.

Идея была поддержана [2,3], наметилась связь периодической системы с теорией чисел и физико-химическим анализом, что обещало плодотворное развитие теории периодичности. Однако утвердившееся понятие об элементе как о системе, состоящей из нуклонов и электронов, свело на нет все предвидения на том основании, что нейтрон и электрон – «это не элементы, а частицы» [5]. Но ещё в 1919–1920 гг. Резерфорд в своих бейкериянских лекциях говорил: «Предполагается существование атома с массой 1 и нулевым зарядом ядра» [4].

В этой связи полезно обратиться к определениям понятий «атом» и «химический элемент». Согласно [8, с. 36] атом – наименьшая частица химического элемента, являющаяся носителем его свойств. Химический же элемент – это вид атомов с одинаковым зарядом ядра. Таким образом, нейтрон – атом по определению. Он же является и элементом, т.к. его атомы – одного вида, с зарядом ядра, равным нулю. Совокупность атомов образует простые вещества. В данном случае примером простого вещества служат нейтронные звёзды. Игнорирование нулевого периода стало, к сожалению, обязательным. Например, в знаковой работе [9] нулевой период отсутствует. Поэтому состав диад по [2÷4] (а) и по [9] (в) различен. В первом случае диаду составляют равнодлинные периоды, во втором – периоды разной длины (табл.1):

Таблица 1

Состав диад по таблице с нулевым периодом и без него

Диада	I	II	III	IV	
Периоды	0; 1	2; 3	4; 5	6; 7	
Число членов	2 2	8 8	18 18	32 32	(а)
Периоды	1 2	3 4	5 6	7 8	
Число членов	2 8	8 18	18 32	32 50	(в)

Рассмотрим свойства диад типа (а) и (в) и затем некоторые следствия такого анализа. В качестве рабочего используем вариант секториально-слоевой периодической таблицы [7, стр. 42].

Расчёты проведены по уравнению

$$Z = \alpha_0 + \alpha_1 n + \alpha_2 n^2 + \alpha_3 n^3 \dots,$$

$Z$  – порядковый номер элемента;  $n$  – главное квантовое число;  $\alpha_i$  – коэффициенты, изменяющиеся закономерно, которое с абсолютной точностью устанавливает связь между зарядом ядра  $Z$  и главным квантовым числом  $n$  [7, стр. 41]. В большинстве случаев для расчётов брали не целиком периоды, а отдельные семейства, в них входящие (табл. 2) цикл (а),  $S$  – элементы.

Таблица 2

Расчет свойств диад s-элементов с учетом нулевого периода

Номер диады	I	II	III	IV	V	VI
Периоды	0 1	2 3	4 5	6 7	8 9	10 11
$\Sigma n$	1	5	9	13	17	21
Состав диады	-1 1	3 11	19 37	55 87	119 169	219 291
по Z	0 2	4 12	20 38	56 88	120 170	220 292
$\Sigma Z$ в диа- де	2	30	114	286	578	1022

(a)

Сначала решим таблицу относительно номеров циклов. Получаем следующие значения коэффициентов:  $\alpha_0 = -2$ ;  $\alpha_1 = 2,6(66)$ ;  $\alpha_2 = -4$ ;  $\alpha_3 = 5,3(33)$ .

Ту же самую операцию сделаем относительно сумм главных квантовых чисел периодов, т.е.  $\Sigma n$ . Значения коэффициентов в этом случае:  $\alpha_0 = 0$ ;  $\alpha_1 = 1,416(66)$ ;  $\alpha_2 = 0,5$ ;  $\alpha_3 = 0,083(33)$ .

Теперь рассмотрим диады в трактовке [9] (табл.3).

Таблица 3

Расчет свойств диад s-элементов без учета нулевого периода

Номер цикла	I	II	III	IV	V	VI
Периоды	12	34	5	78	910	11 12
$\Sigma n$	3	7	6	15	19	23
Состав цикла	1 3	11 19	3755	87119	169 219	291363
по Z	24	1220	3856	88120	170 220	292364
$\Sigma Z$ в цик- ле	10	62	186	414	778	1310

(b)

Получим:  $\alpha_0 = -2$ ;  $\alpha_1 = 2,6(66)$ ;  $\alpha_2 = 4$ ;  $\alpha_3 = 5,3(33)$ . При замене номера диады на  $\Sigma n$  имеем:  $\alpha_0 = -1$ ;  $\alpha_1 = 1,416(66)$ ;  $\alpha_2 = 0,5$ ;  $\alpha_3 = 0,083(33)$ .

Чтобы рассеять сомнения в том, что циклы на всём пространстве таблицы подчиняются тем же закономерностям, что и семейственные, лучевые, слоевые диады, произведём обсчёт пар периодов в целом (табл. 4).

Таблица 4

Расчет свойств диад s-элементов по сумме атомных номеров

Диады	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
-------	---	----	-----	----	---	----	-----	------

Периоды	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
$\Sigma n$	1		5		9		13		17		21		25		29	
$\Sigma Z$ в паре периодов	2		168		1314		5536		16832		41832		90258		175744	
Периоды	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
$\Sigma n$	3		7		11		15		19		23		27		31	
$\Sigma Z$ в паре периодов	55		611		3075		10455		27999		63835		129611		241135	

(а)

(в)

В координатах «номер диады – сумма атомных номеров в ней» имеем для (а):

$\alpha_0=0$ ;  $\alpha_1=0$ ;  $\alpha_2=-6$ ;  $\alpha_3=2,6(66)$ ;  $\alpha_4=0$ ;  $\alpha_5=5,3(33)$ . При замене абсциссы на  $\Sigma n$  получаем:  $\alpha_0=-0,984375$ ;  $\alpha_1=0,984375$ ;  $\alpha_2=1,40625$ ;  $\alpha_3=0,510416(66)$ ;  $\alpha_4=0,078125$ ;  $\alpha_5=0,0052083(33)$ .

Для (в) имеем соответственно:  $\alpha_0=-1$ ;  $\alpha_1=3,33(33)$ ;  $\alpha_2=12,66(66)$ ;  $\alpha_3=21,33(33)$ ;  $\alpha_4=13,33(33)$ ;  $\alpha_5=5,3(33)$  и  $\alpha_0=-1$ ;  $\alpha_1=3,33(33)$ ;  $\alpha_2=12,66(66)$ ;  $\alpha_3=21,33(33)$ ;  $\alpha_4=13,33(33)$ ;  $\alpha_5=5,3(33)$ .

Таким образом, разница между диадами слоевой, семейственной или клановой и циклом (периодным или общим) заключается в степени полинома: первые описываются параболой кубической, цикл – полиномом пятой степени.

Рассмотрим теперь диады, в которых сложение частично заменяется вычитанием. Это, например, совокупность s-элементов по лучевому направлению, т.е. члены облекающего слоя (табл. 5).

Таблица 5

Расчет свойств диад по разности атомных номеров в периодах

Цикл (D)	I		II		III		IV		V		VI	
Периоды	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
$f(\Sigma)$	4		16		36		64		100		144	
Периоды	12		34		5		78		910		11	12
$f(\Sigma)$	4		16		36		64		100		144	

(а)

(в)

Здесь  $f(\Sigma)$  – разность сумм  $Z$  в клановой диаде; т.е. для цикла I по (а) имеем  $(1+2) - (1+0)=4$ ; для II получаем  $(11+12) - (3+4)=16$  и так далее. Расчёт даёт:  $\alpha_0=\alpha_1=\alpha_3=0$ ;  $\alpha_2=2(2D^2)$ . По (в) для цикла I имеем  $(3+4) - (1+2) = 4$ ; для II  $(13+20) - (11+12) = 16$  и т.д. Если  $D$  – номер цикла, тогда  $f(\Sigma)=4D^2$  представляет собою: 1) число членов в полной диаде т.е. включающей все элементы каждой пары периодов; 2) число независимых состояний с заданным значением номера периода, т.е.  $N_n$  по [9]. Таким образом, на основании данных для  $Z$  семейственных

диад мы можем получить соответствующие показатели клановых и полных диад. Т.е. согласно [8] построить естественную (натуральную) систему химических элементов.

От разности сумм перейдем к сумме сумм (табл. 6). Следует отметить, что такие координаты представляют чисто математический интерес, т.к. не имеют, по-видимому, реального физического смысла, но для иллюстративных целей они вполне подходят.

Таблица 6

Расчет свойств диад по сумме сумм атомных номеров

Номер диады D	$\Sigma D$	$\Sigma D/D$	$\Sigma(\Sigma Z)$	
			(a)	(b)
I	1	1	2	10
II	3	1,5	32	72
III	6	2	146	258
IV	10	2,5	432	672
V	15	3	1010	1450
VI	21	3,5	2032	2760
VII	28	4	3682	4802
VIII	36	4,5	6176	7808
IX	45	5	9762	12042

Имеем: по (a)

$$D - \Sigma(\Sigma Z): \alpha_0=0; \alpha_1=-1,3(33); \alpha_2=0,6(66); \alpha_3=1,3(33); \alpha_4=1,3(33)$$

$$(\Sigma D)/D - \Sigma(\Sigma Z): \alpha_0=2; \alpha_1=-8; \alpha_2=18,6(66); \alpha_3=-32; \alpha_4=21,3(33),$$

по (b)

$$D - \Sigma(\Sigma Z): \alpha_0=\alpha_1=0; \alpha_2=4,6(66); \alpha_3=4; \alpha_4=1,3(33),$$

$$(\Sigma D)/D - \Sigma(\Sigma Z): \alpha_0=2; \alpha_1=-5,3(33); \alpha_2=2,6(66); \alpha_3=-10,6(66); \alpha_4=21,3(33).$$

В координатах  $\Sigma D - \Sigma(\Sigma Z)$  задача не имеет решения вплоть до полинома девятой степени.

Т.е. вариантов обсчета свойств диад множество. Мы укажем ещё только на одно. Если взять две соседние последовательности (лучевые или слоевые – значения не имеет), например, ряд s – элементов в IV квадрате (табл. 7):

Таблица 7

Расчет свойств диад-элементов по сумме накрест лежащих членов

n	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$\Sigma n$	1		5		9		13		17	
$\Sigma Z$	-1	1	9	17	35	53	85	117	167	217
	0	2	10	18	36	54	86	118	168	218

D	1	2	3	4	5
---	---	---	---	---	---

то в каждой диаде суммы накрест лежащих членов (–1 и 2, 0 и 1, 9 и 18, 10 и 17 и т.п.) равны.

То есть они будут описываться одними и теми же уравнениями:

$$D - \Sigma Z: \alpha_0 = -5,0; \alpha_1 = -1,3(33); \alpha_2 = 2,0; \alpha_3 = 2,6(66)$$

$$\Sigma n - \Sigma Z: \alpha_0 = 1,75; \alpha_1 = 2,2083(33); \alpha_2 = 0,5; \alpha_3 = 0,0416(66)$$

Таким образом, ряды (–1–2), (9–18), (35–54), (85–118), (167–218)... и (0–1), (10–17), (36–53), (86–117), (168–217)... будут совместимы и их можно использовать для расчёта свойств неизвестных элементов таблицы Д.И. Менделеева.

Перечень примеров можно продолжать. Однако и без того ясно, что свойства диад не менее многочисленны, чем свойства совокупности слоёв и лучей. Кроме того, это ещё одно подтверждение концепции А.Ф. Капустинского о тесной связи закона Менделеева с теорией чисел [3].

### Выводы

Проведено исследование математических свойств диад. Изученные свойства подтверждают сформулированную ранее полиномиальную концепцию периодичности и являются аргументом в пользу диадной парадигмы ее представления.

### Список литературы

1. Ахумов Е.И. О периодической системе химических элементов // Журнал общей химии, 1947. – Т.17. – С. 1241-1245.
2. Капустинский А.Ф. Структура периодической системы химических элементов // ДАН СССР, 1951. – Т. 81. – № 1. – С. 41-50.
3. Капустинский А.Ф. Периодичность в строении электронных оболочек и ядер атомов. I. Периодическая система химических элементов и её связь с теорией чисел и физико-химическим анализом // Изв. АН СССР, ОХН, 1953. – № 1. – С.3-11.
4. Наумов А.И. Физика атомного ядра и элементарных частиц. – М.: Просвещение, 1984. – 384 с.
5. Семишин В.И. О принципах построения и формах периодической системы // 100 лет периодического закона химических элементов: сб. – М., 1969. – С. 71-98.
6. Спирин Э.К., Спирин К.Э. Новые возможности периодического закона. Нетрадиционный анализ периодической системы элементов. Verlag: LAPLAMBERT Academic Publishing GmbH & Co. KG, 2012. – 169 s.
7. Спирин Э.К., Спирин К.Э. Новые возможности периодического закона Д.И. Менделеева. – Томск: Изд-во ТГУ, 2009. – 162 с.

8. Физический энциклопедический словарь / Под. ред. Прохорова А.М. – М.: Советская энциклопедия, 1983. – 928 с.

9. Черкесов А.И. Нуклонный принцип построения естественной системы химических элементов // Изв. вузов. Химия и хим. технология. – 1975. – Т. 18. – Вып. 5. – С. 691-695.

**Рецензенты:**

Портола В.А., д.т.н., профессор, ГОУ ВПО «Кузбасский государственный технический университет имени Т.Ф. Горбачева», г. Кемерово.

Еремин Л.П., д.х.н., профессор, ФГБОУ ВПО «Томский государственный педагогический университет», г. Томск.

Виноградова М.Г., д.х.н., профессор, профессор кафедры естественнонаучных дисциплин, Тверской институт экологии и права, г. Тверь.