Чернышев С.Л.

Десять шагов на пути к новому пониманию Периодической системы элементов

Введение

Фундаментальное свойство окружающей нас природы — способность самоорганизации. Представление результатов эволюционных процессов самоорганизации в виде определенной системы — новый уровень понимания явлений природы [1,2]. Анализ открытий и достижений человечества за прошедшие 200 лет показывает, что «главной целью науки остается достижение лучшего понимания или объяснение того, что происходит или может происходить в окружающем мире» [3]. Понимание логики окружающей среды формирует новые представления о Периодической системе элементов (ПСЭ). Эта логика связана с процессом измерений, которые вносят изменения в динамику исследуемого процесса и воздействуют на исследуемый объект также как окружающая среда [4,5]. Принципиальная неустранимость воздействия измерительного прибора на наблюдаемую систему — характерная черта квантовых измерений [4, с.256].

Исследования химических элементов и их соединений, выявляют связи типа «состав-структура-свойства», где все большее значение приобретает учет размерных факторов. Можно отметить: исследования физико-химических свойств одномерных кристаллов, нанопроволок и нанонитей; создание наноразмерных структурированных углеродных материалов для систем преобразования и хранения энергии; молекулярный дизайн одно- и двумерных молекулярных структур для нужд молекулярной электроники; синтез квазидвумерных полупроводниковых наночастиц и ансамблей на их основе [6].

Исследования взаимосвязей кристаллических и квазикристаллических форм строения вещества и структуры ПСЭ инициируют новые интерпретации классификации элементов [7,8]. Следующий шаг в этом направлении — попытка представить классификацию химических элементов с учетом размерности пространства (на плоскости) на базе решений уравнения Шредингера в многомерном представлении [9].

Важная идея, положенная в основу ПСЭ, заключается в фундаментальном значении, которое придавалось понятию «элемент» [1,10]. Согласно представлениям Д.И. Менделеева, «элемент» — это не только химический элемент, но, кроме того, — некая абстрактная субстанция. Такому «абстрактному элементу» могут быть приписаны различные характеристики — атомный вес, заряд ядра атома, количество электронов в атоме и т.д. Объединяющей сущностью и одновременно классификационным признаком таких элементов может служить порядковый (атомный) номер, роль которого впервые была отмечена Ван ден Брейком на основе данных по рассеянию α-частиц [2]. Введение в рассмотрение порядковых номеров элементов позволяет в полной мере использовать достижения физики дискретного — квантовой теории, включая применение симметрических групп [11].

Современные методы классификации в метрологии реализуются на базе теории шкал [12]. При этом ПСЭ может быть представлена как система шкал, отображающих свойства симметрии объектов с учетом размерности пространства. Такое представление может быть дополнено введением новых дискретных математических объектов, например, фигурных чисел, объединяющих понятия числа, фигуры и множества [13].

Существует противоречие между квантовой теорией и строением ПСЭ, состоящее в том, что построение водородоподобных электронных конфигураций на основе квантовой теории с использованием квантовых чисел соответствует структуре ПСЭ только до 18 элемента (аргон) включительно. Решение проблемы согласования строения ПСЭ и квантовой теории заключается в признании того, исследование ПСЭ заключает в себе, по меньшей мере, два подхода [14], что может проявляться в существовании двух видов шкал. Следствием этого является, в частности, двойственное положение первых двух элементов — водорода и гелия в таких шкалах. Один вид шкал, например, соответствовал бы водородоподобной системе элементов, отображая бесконечное разнообразие структур в соответствии с группами ортогональных преобразований (вращений и отражений), проявляющихся в квазикристаллических объектах. Другой вид шкал воспроизводил бы общепринятую структуру ПСЭ в трехмерном случае, отображая свойства преобразований элементов в соответствии с группами инвариантных решеток, взаимосвязанных со строением кристаллов. Наличие двух видов взаимосвязанных шкал позволяет обеспечить согласование водородоподобной системы и структуры ПСЭ для элементов с произвольными порядковыми номерами.

Ряд особенностей ПСЭ, а также составляющих ее элементов служат определяющими факторами для исследователей и задают направления дальнейших поисков. Отметим следующие факторы: неопределенность задания номеров групп и периодов для всех элементов; неоднозначность определения положений водорода и гелия; ограниченность представления периодических свойств элементов в виде таблицы, содержащей только группы и периоды элементов; неоднозначность валентных свойств элементов; многообразие кристаллических форм химических элементов (наличие полиморфизма); новые свойства квазикристаллических структур [8,15]; наличие изотопов; проявления размерных факторов при исследовании наноструктур [6].

Существуют более 700 различных форм изображения ПСЭ, однако поиски новых форм продолжаются и направлены на отыскание внутренней симметрии (паттерна организации) системы элементов [16]. Наличие «белых пятен» в объяснении строения ПСЭ — причина поисков, которые, так или иначе, обращаются к логическим основам.

Направления исследования ПСЭ связаны также с применением теории групп [11,16] и внедрением синергетического мышления [17]. Синергетические концепции исследования ПСЭ предусматривают переход от простого элемента к сложному элементу, от закрытой системы к открытой системе, от линейности к нелинейности, от равновесных процессов к нестабильности. Анализ особенностей структурообразования атомов показывает, что ПСЭ является сложной синергетической системой, в которой повторяемость свойств с ростом атомного номера и массы обусловлена периодическими изменениями симметрии электронной и ядерной структур [18].

Таким образом, новое понимание Периодической системы элементов предполагает шаги в направлении использования понятий новой логики, взаимосвязанной с процессом квантовых измерений и синергетическим мышлением. Также необходимо внедрение положений теории шкал с включением новых математических объектов — фигурных чисел, позволяющих моделировать сложные объекты с учетом размерности пространства, в котором рассматриваются кристаллические и квазикристаллические структуры.

1. Основные положения

1.1. Логические основы классификации элементов

Логические построения используют для укрепления фундамента и определения путей новых поисков в науке. Для совершенствования представлений о ПСЭ необходим анализ логических основ классификации на базе современной теории измерений. Классификация заключается в разбиении множества исследуемых объектов на классы эквивалентности. Каждый химический элемент может быть представлен в виде набора характеризующих его разнотипных признаков. При этом основным классификационным признаком служит порядковый номер элемента. Для выяснения специфики проявляемых химическими элементами свойств и периодичности этих свойств необходимо понять взаимосвязанную с процессом измерения логику эволюционного развития.

Измерение в квантовой механике (квантовое измерение) — взаимодействие между классическим объектом (измерительный прибор) и объектом квантовым. При этом, чем точнее измерение, тем сильнее оказываемое им воздействие, и лишь при измерениях очень малой точности воздействие прибора на измеряемый объект может быть слабым. Квантовая механика на основе вероятностной интерпретации позволяет объяснять физические явления и процессы микромира. В то же время ни эволюция волновой функции согласно уравнению Шредингера, ни использование аппарата матрицы плотности и операторов проектирования для получения результатов измерений не предусматривают модели процесса измерений. Отсутствие математического описания процесса измерений при исследовании микрообъектов приводит к следующим трудностям: необходимости интерпретации волновой функции и самой квантовой механики; выяснению роли наблюдателя в процессе перехода от физической величины (множества возможных результатов) к ее собственному значению (определению конкретного результата); возникновению парадоксов при переходе от квантовой к классической физике [19].

Информационная модель взаимодействия динамической системы с окружающей средой может быть представлена в виде последовательного сравнения с мерами с учетом вероятностей ошибок первого и второго рода. Логические состояния «ложное утверждение», соответствующее вероятности ошибки первого рода, и «ложное отрицание», соответствующее вероятности ошибки второго рода при сравнениях, представляли бы в этом случае, по выражению фон-Неймана, своеобразные объекты физической реальности. Вероятности ошибок сравнения выполняют функции воздействия окружающей среды — «метанаблюдателя». В результате возникает дискретный марковский процесс блуждания по четырем логическим состояниям («истинное утверждение», «истинное отрицание», «ложное отрицание», «ложное утверждение»), связанными с «принятием решения» о состоянии системы.

В квантовой механике известный логический парадокс связан с рассмотрением двух возможных состояний двух классических и одного квантового объектов: измерительного прибора, «шредингеровского кота» и квантовой частицы. С точки зрения четырехзначной логики при измерениях как квантового, так и не квантового объекта мы не выясняем «жив кот или нет», но приходим вместо одного или двух состояний к четырем логическим состояниям, обусловленными отличными от нуля вероятностями ошибок сравнения [20].

Действия демона Максвелла, понижающие энтропию системы, также могут получить объяснения в рамках четырехзначной логики, в которой при определенных условиях допустимо увеличение порядковых номеров (результатов измерений) по сравнению с исходными (измеряемыми) значениями. В более широком смысле четырехзначная логика — это логика окружающей среды, которая позволяет отобразить эволюционный процесс рождения нового, в частности, новых порядковых номеров элементов [5].

1.2. Модель измерения, приводящая к матрице измерений-воздействий

Реалистическая интерпретация квантовой теории, согласно И. Пригожину, связана с переходом от волновых функций к ансамблям (потокам событий) без загадочного вмешательства наблюдателя. Для неустойчивых систем в статистической формулировке основными объектами динамики становятся не траектории или волновые функции, а вероятности [17].

Состояния объекта, который может находиться в одном из двух состояний (0 или 1), можно описать следующей матрицей второго порядка $\mathbf{M}_{0,1}(\alpha,\beta)$, где номера строк и столбцов L=0,1; N=0,1:

$$\mathbf{M}_{0,1}(\alpha,\beta)=\begin{pmatrix}1-\beta & \beta\\ \alpha & 1-\alpha\end{pmatrix}.$$

Рассматриваемая матрица представляет собой матрицу переходов (стохастическую матрицу второго порядка) цепи Маркова с двумя состояниями. Эта же матрица описывает процесс измерения с учетом возможных ошибок измерения (сравнения): первого рода (1 принимаем за 0) и второго рода (0 принимаем за 1). Ошибки измерения характеризуются соответствующими условными вероятностями ошибки первого рода α и ошибки второго рода β. Множество условий проведения данного эксперимента представлены комплексным числом (α,β), а результаты измерения 0 и 1 отображаются в соответствующих строках матрицы $\mathbf{M}_{0,1}(\alpha,\beta)$.

Если измеряемая величина принимает неотрицательные целые значения L=0,1,2, … , то результаты измерения (сравнений) этой величины N=0,1,2, … отображаются матрицей бесконечного порядка. Первая строка этой матрицы показывает результаты измерения величины равной нулю. Вторая строка — результаты измерения величины равной единицы с учетом вероятностей ошибок измерения и т.д. Таким образом, если исследуемая величина может принимать бесконечное (счетное) число значений (L=0,1,…; N=0,1,…), то приходим к стохастической матрице бесконечного порядка $\mathbf{M}_{L,N}(\alpha,\beta)$ [5,20]. Действительно, условие стохастичности выполнено, так как в каждой строке матрицы сумма вероятностей состояний равна единице и все вероятности суть неотрицательные целые числа. Дискретное распределение вероятности результата N для L-й строке матрицы $\mathbf{M}_{L,N}(\alpha,\beta)$ обозначим $P_L(N;\alpha,\beta)$. Независимость вероятностей ошибок сравнения от значений измеряемой величины означает, что все измеряемые значения равнозначны априори.

Множество условий проведения эксперимента представлено комплексным числом (α,β), а результаты измерения отображаются в соответствующих столбцах матрицы. При безошибочном контроле состояний условные вероятности ошибок α и β равны нулю — в результате получаем единичную матрицу.

Матрица измерений-воздействий дает возможность сравнивать различные порядковые номера элементов в зависимости от определенных условий окружающей среды. Дискретное блуждание по четырем логическим состояниям реализует некоторый эволюционный процесс. При этом четыре исходных компонента (комплементарные пары элементов α и 1-α, β и 1-β) задают определенный код этого процесса аналогичный генетическому коду, в котором можно выявить двадцать состояний [13].

1.3. Квантование воздействий

Вероятностное описание явлений микромира предполагает существование кванта воздействия, взаимосвязанного с отличными от нуля вероятностями ошибок первого и второго рода α и β, характеризующих воздействие окружающей среды. Переход от континуума условий проведения эксперимента, характеризуемых комплексным числом (α,β) к счетному числу, характеризуемому параметром порядка, можно сравнить с квантованием воздействий. При этом от действительных значений вероятностей ошибок первого и второго рода $0<\alpha<1$, $0<\beta<1$ происходит переход к дискретной последовательности вероятностей: $(\alpha_0,\beta_0);(\alpha_1,\beta_1);\ldots;(\alpha_M,\beta_M)\ldots.$

В каждой строке, начиная со второй, соответствующей L=1, матрицы измерений-воздействий, имеются две моды. Равенство вероятностей, соответствующих двум модам распределения $P_L(N;\alpha,\beta)$ в M-й строке (L=M) матрицы для нулевого столбца (N=0) и M-го столбца (N=M) определяет условие квантования воздействий. Соответствующие этому условию значения вероятностей ошибок обозначим α_M и β_M:

$$P_M(0;\alpha_M,\beta_M)=P_M(M;\alpha_M,\beta_M).$$

Если $\alpha_M=\beta_M$, то условие равенства вероятностей мод означает, что справедливы следующие соотношения $\alpha_M=(1-\alpha_M)^{M+1}$; $\beta_M=(1-\beta_M)^{M+1}$, M=0,1,2, … . Это означает, что равные вероятности ошибок α_M и β_M взаимосвязаны с отношением обобщенной золотой пропорции q_M, где параметр порядка M — порядок обобщенной золотой пропорции. Действительно, замена переменных $q_M=1/(1-\alpha_M)$ и $q_M=1/(1-\beta_M)$ преобразует указанные выражения к известному выражению для отношения q_M обобщенной золотой пропорции $q_M^{M+1}-q_M^M=1$. При выполнении условий квантования матрица $\mathbf{M}_{L,N}(\alpha_M,\beta_M)\equiv\mathbf{M}_{L,N}^M$ называется матрицей квантовых измерений. Бесконечномерная стохастическая матрица квантовых измерений $\mathbf{M}_{L,N}^M$ определяется соотношением [20]:

$$\mathbf{M}_{L,N}^M=q_M^{-(1+N+KM)}, \tag{1}$$

где q_M — отношение обобщенной золотой пропорции порядка M; K=1, если N<L и K=N−L, если N≥L. Отметим, что в каждой строке матрицы реализуется построение канторовского фрактального множества. Свойства матрицы квантовых измерений, в частности аналогия с построением фрактальных структур, показаны на сайте http://www.cplire.ru/html/InformChaosLab/kvart/default.htm .

Таким образом, квантование воздействий приводит к построению матриц квантовых измерений. При этом условия окружающей среды, при которых сравниваются порядковые номера элементов, можно охарактеризовать определенным параметром порядка. Параметр порядка в матрицах квантовых измерений представляет собой порядок обобщенных золотых пропорций и соответственно порядок обобщенных чисел Фибоначчи, взаимосвязанных с этими пропорциями.

1.4. Фигурные числа — результаты квантовых измерений

В матрице квантовых измерений каждому элементу, характеризуемому определенной вероятностью, соответствует фигурное число [13]. Фигурные числа, соответствующие элементам матриц квантовых измерений, представляют собой, в частности, ортогональные разбиения единицы. Поэтому такие фигурные числа суть результаты квантовых измерений согласно [4,20]. Параметр формы M фигурного числа представляет параметр порядка матриц квантовых измерений и одновременно параметр порядка обобщенных золотых пропорций и обобщенных чисел Фибоначчи. Обобщенные золотые пропорции рассмотрены А.П. Стаховым, исходя из задач измерений [21]. В настоящее время обобщенные золотые пропорции и обобщенные числа Фибоначчи играют важную роль в исследованиях квазикристаллов [8,15].

Изоморфное представление элементов матрицы квантовых измерений (1) с помощью фигурных чисел имеет следующий вид [13,20]:

$$\log_{1/q_M} M_{L,N}^{M} = \Phi_N^{KM}(2). \qquad (2)$$

Здесь $\Phi_N^{KM}(2) = 1 + N + KM$; K=1, если N<L и K=N−L, если N≥L. Фигурное число — это математический объект, объединяющий числовые, геометрические и топологические свойства. Как следует из (2), элементам главной диагонали (N-я строка, N-й столбец) матриц квантовых измерений соответствуют фигурные числа вида $\Phi_N^0(2)$, геометрическими образами которых служат N-мерные симплексы.

Переход от традиционной логики двух состояний (утверждение или отрицание какого-либо факта) к четырехзначной логике измерений сопровождается переходом от метрических пространств к конфигурационному пространству размерностей. В матрицах квантовых измерений вместо координаты или времени используется понятие размерности пространства, включающее представление о N-мерном симплексе [20]. При этом одномерность связана с одномерным симплексом — отрезком; двумерное пространство с двумерным симплексом — треугольником и т.д.

Параметры фигурного числа, определенного выражением (2), взаимосвязаны с размерностью пространства и параметром порядка или формы. Таким образом, порядковые номера элементов, которые могут быть поставлены в соответствие номерам строк или столбцов матрицы квантовых измерений, посредством фигурных чисел приобретают новые характеристики. Проявляются взаимосвязи порядковых номеров с размерностью пространства и симметрией или формой моделей элементов с определенными порядковыми номерами. Показано [13], что фигурные числа позволяют моделировать фрагменты как кристаллических, так и квазикристаллических структур.

1.5. Представление квантовых числовых последовательностей в виде фигурных чисел

В квантовой механике состояние системы описывается с помощью волновых функций, представляющих решения уравнения Шредингера. Если это уравнение записано в конфигурационном пространстве, то интенсивность (квадрат модуля) волны в каждой ячейке конфигурационного пространства соответствует определенной вероятности. Это вероятность того, что эксперимент, обнаруживающий частицы системы в данных ячейках, позволяет приписать системе определенный геометрический образ [22,23]. Такими образами могут служить фигурные числа. Кроме того квантовые числа оказываются непосредственно взаимосвязанными с фигурными числами определенного вида.

Квантовые числа — целые или дробные числа, которые определяют возможные дискретные значения физических величин, характеризующих квантовые системы (атомное ядро, атом, молекулу и др.) [24, с.275]. При этом, по словам Бора, с квантовой точки зрения макроскопические явления характеризуются большими квантовыми числами. В области больших квантовых чисел существует хорошее согласие между частотами излучений, испускаемых по классическим законам, и частотами, которые может излучать электрон в процессе квантового перехода.

Арифметическая прогрессия $Z_1(n)$ с общим элементом 2(2n−1) определяет количество электронов, размещаемых соответственно на первой (*s*-электроны), второй (*p*-электроны), третьей (*d*-электроны), четвертой (*f*-электроны) и т.д. орбитах или оболочках атома и может рассматриваться в качестве линейной шкалы. Последовательность $Z_2(n)$ с общим элементом $2n^2$ показывает, сколько электронов может находиться на оболочке, характеризуемой главным квантовым числом n. Сумма вида $2\sum_{i=1}^{i=n} i^2 = n(n+1)(2n+1)/3$ определяет суммарное количество электронов и соответственно порядковый номер нейтрального атома при полном насыщении на всех орбитах всех оболочек, с главными квантовыми числами от 1 до n. Общие элементы рассматриваемых квантовых числовых последовательностей $Z_D(n)$ подчиняются определенным закономерностям: правила суммирования и рекуррентные соотношения оказываются такими же, как и у фигурных чисел. Величина n — это номер элемента в последовательности представляет собой главное квантовое число, величина D — максимальная степень числа n в выражении для общего элемента. Поэтому общий элемент квантовой числовой последовательности можно представить следующим образом [20]

$$Z_D(n) = \Phi_D^1(n)\,\Delta_n^D \Phi_D^1(n). \qquad (3)$$

Здесь $\Delta_n^D \Phi_D^1(n)$ — равное 2 значение конечной разности степени D фигурных чисел вида $\Phi_D^1(n)$ для любых натуральных D. Отметим, что верхний индекс (M=1) в обозначении фигурных чисел указывает на четырехугольную форму (для плоских структур) и соответствующую симметрию. Симметрия в структуре ПСЭ, характерная для правильных четырехугольных фигур, была выявлена [25].

Как показано в [20], функция $g(l,D)$, задающая кратность вырождения энергетических уровней водородоподобного атома, определяемых из решения уравнения Шредингера в D-мерном пространстве, определенная в [9] может быть представлена фигурным числом с параметром формы M=1 и определена в виде

$$g(l, D) \equiv \Phi_{D-2}^1(l+1). \qquad (4)$$

Здесь орбитальное квантовое число $l=0,1,2, \ldots, n-1$, $D\geq 2$. Функции $Z_2(n)$ и $g(l,2)$ использовались для классификации элементов, характеризуемых порядковыми номерами, при построении ПСЭ в двумерном мире [9]. Таким образом, если квантовые числовые последовательности $Z_D(n)$ определенной степени D могут быть использованы для классификации состояний квантовых объектов. При этом такая классификация соответствует размерности пространства D.

1.6. Комплексы элементов в матрицах квантовых измерений

Комплексы элементов — результаты квантовых измерений в матрицах, представляют собой паттерны самоорганизации. При этом порядковый номер химического элемента, помещенный в определенную ячейку комплекса, представляет сумму неотрицательных целочисленных значений параметра, характеризующего размерность структуры и параметра порядка или формы. Таким образом, в процессе воспроизводства паттерна возникает своеобразная «конкуренция» размерностей и свойств симметрии моделей элемента.

Построение комплексов в матрицах квантовых измерений производится с использованием таблиц Юнга — комбинаторных объектов, определяющих геометрическую форму разбиения натурального числа на натуральные слагаемые [26]. Такое разбиение в соответствии с теоремой Лагранжа позволяет выявить структуру (неприводимые представления) симметрических групп и служит основой для классификации элементов, размещаемых в комплексах.

Классификация элементов комплекса $K_D(n)$, где n — главное квантовое число, D — размерность пространства, может быть проведена на основе значений квантовых чисел, которые могут быть поставлены в соответствие каждой ячейке комплекса. В то же время сложная структура комплекса позволяет провести классификацию элементов с учетом значения параметра порядка. Такая классификация приводит к водородоподобной системе элементов, но обладает принципиальной особенностью: возникает неоднозначность образов классифицируемых элементов. Отметим, что построение комплексов в матрице квантовых измерений можно осуществить для квантовых числовых последовательностей со степенями D=1,2,3,4 и только для таких значений D, где величина D здесь представляет размерность пространства [13]. При этом первый комплекс $K_D(1)$, включающий пять расположенных крестообразно ячеек матрицы, для всех значений размерности D одинаков и содержит элементы с порядковыми номерами 1 и 2.

Строки матриц квантовых измерений представляют собой модели канторовских фрактальных множеств. Объединение элементов нескольких строк матрицы квантовых измерений приводит к мультифрактальной структуре комплексов матриц квантовых измерений. Отметим, что ячейки матрицы, образующие комплексы, расположены симметрично относительно главной диагонали. При бесконечном построении таких комплексов образуется множество самоподобных комплексов, каждый из которых включает в себя все предыдущие комплексы, встроенные друг в друга как матрешки, подобно фракталу. Матрицы квантовых измерений и комплексы в этих матрицах представлены на сайте http://www.cplire.ru/html/InformChaosLab/kvart/default.htm . Первые два комплекса $K_3(1)$ и $K_3(2)$, построенные на основе квантовой числовой последовательности $Z_3(n)$, показаны на рис. 1.

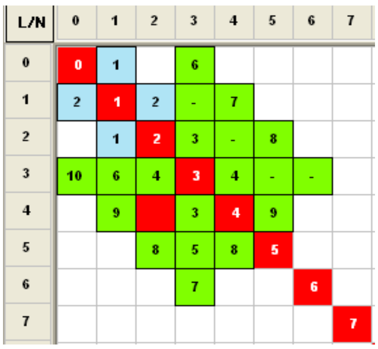

Рис. 1. Комплексы $K_3(1)$ и $K_3(2)$ матрицы квантовых измерений, построенные в мультимедийном комплексе «Квартика».

Выражения для квантовых последовательностей и фигурных чисел в комплексах матриц квантовых измерений связаны следующим соотношением [13]

$$Z_{D+1}(n+1) = \frac{2}{D+1} C^{n}_{D+n} \Phi^{n}_{D+n}(2).$$

При D=n это соотношение преобразуется к виду $Z_{D+1}(D+1) = 2C_D \Phi^{D}_{2D}(2)$, где C_D — число Каталана. Известно, что числа Каталана позволяют, например, вычислить количество вариантов перемещения или расположения ладей по клеткам некоторой части шахматной доски, форма которой соответствует диаграмме Юнга. Таким образом, основа построения комплексов — последовательности $Z_D(n)$, содержимое комплексов — фигурные числа вида $\Phi^{KM}_{N}(2)$ и структура комплексов оказываются взаимосвязанными. На основе таких комплексов можно исследовать эволюцию сложных объектов при воздействии окружающей среды. Комплексы в матрице квантовых измерений служат основными элементами (паттернами) матричного конфигурационного пространства.

1.7. Комплексные квантовые шкалы для классификации элементов

Современное представление ПСЭ основано на квантовых закономерностях и включает описание периодов и групп, в которых располагаются классифицируемые элементы в соответствии с их порядковыми номерами. Совершенствование представлений о ПСЭ включает исследование процесса самоорганизации, в результате которого возникает система сложных структур.

Квантовые числовые последовательности $Z_D(n)$, где n — главное квантовое число могут представлять соответствующие квантовые шкалы [27]. Водородоподобная система элементов в трехмерном физическом пространстве представляет собой шкалу наименований, характеризующую качественные свойства, в которой определенному атому (названию атома) ставится в соответствие определенное множество значений квантовых чисел. Если при заданном главном квантовом числе значения трех других квантовых чисел совпадают, то такие элементы (атомы) образуют определенную классификационную группу. Так, например, в первую группу водородоподобной системы попадают элементы: водород, литий, натрий, медь и т.д. Элементы второй группы водородоподобной системы: гелий, бериллий, магний, цинк и т.д.

Аналогичную классификацию можно провести на основе расположения элементов, характеризуемых порядковыми номерами, в комплексах $K_D(n)$ матрицы квантовых измерений, построенных в соответствии с квантовыми числовыми последовательностями $Z_D(n)$ степени D. Отметим, что возможность представления степени D в качестве размерности пространства следует из взаимосвязи последовательностей $Z_D(n)$ с фигурными числами. В одну классификационную группу попадают элементы, расположенные в подобных (совпадающих при совмещении комплексов) положениях. Классифицируемые элементы различаются значениями параметра порядка, соответствующими положениям элемента с данным порядковым номером в комплексе.

Элементы, характеризуемые порядковыми номерами и размещенные в комплексах $K_1(n)$, n=1,2, … можно разделить на классы эквивалентности с учетом положения в комплексах. При этом каждый класс эквивалентности характеризуется одним, двумя или тремя значениями параметра порядка M. Эти значения параметра порядка определяются с учетом взаимосвязи порядковых номеров Z, представленных в комплексах, и фигурных чисел в соответствующих элементах матриц квантовых измерений согласно соотношению

$$\Phi_N^{KM}(2) = 1 + N + KM = Z + 1. \qquad (5)$$

Возможность классификации элементов, характеризуемых порядковыми номерами, обусловлена сложным строением комплексов, составленных из трех ступенчатых структур (диаграмм Юнга).

Классификационные группы элементов в комплексных шкалах, представляющих квантовые числовые последовательности, реализованные в комплексах матриц квантовых измерений, в точности совпадают с классификационными группами водородоподобной системы элементов. Водородоподобная система и комплексная трехмерная шкала представляют структуры элементов, с бесконечным разнообразием симметрий. При неограниченном увеличении главного квантового числа суммарное количество классов эквивалентности (групп классифицируемых элементов) неограниченно растет, если размерность пространства D>1.

Комплексные квантовые шкалы позволяют проследить эволюционный процесс образования новых групп элементов, обладающих сложной и неоднозначной структурой. Комплексная шкала, соответствующая водородоподобной системе элементов, отображает бесконечное разнообразие структур в соответствии с неограниченным увеличением наборов квантовых чисел при неограниченном увеличении главного квантового числа. Это положение соответствует бесконечности числа групп ортогональных преобразований для пространства с размерностью D>1. Аналогичное бесконечное разнообразие форм классифицируемых структур проявляется в квазикристаллических структурах.

1.8. Степенные квантовые шкалы для классификации элементов

Многочисленные свойства (химические, физические и другие) сложного объекта могут определяться не в одной, а сразу в нескольких различных шкалах, описывающих как количественные, так и качественные свойства. Качественные свойства элементов описывают комплексные квантовые шкалы. Другой вид шкал или степенные шкалы, приводят к общепринятой ПСЭ в трехмерном случае и отображают конечное число взаиморасположений и возможностей преобразования элементов. Реперы степенных шкал в виде последовательностей $Z_D(\bar{r})$, где D=1,2,3,4; $\bar{r}$ — параметры шкалы, определяются на основе квантовых числовых последовательностей $Z_D(n)$, где n — главное квантовое число. Классифицируемые элементы различаются в степенных шкалах в зависимости от удаления порядкового номера от ближайшего репера с определенной характеристикой.

Такой подход можно сопоставить с представлениями о взаимосвязи дальнего порядка, проявляющегося в кристаллах, и локальных принципов упорядочения [28]. При этом рассматривается множество Делоне, представляющее множество точек (центров шаров D-мерного евклидова пространства), где каждая сфера радиуса r содержит не более одной точки, а сфера радиуса R не менее одной точки. Доказано, что если конфигурация точек данного множества внутри сферы радиуса ρ и конфигурация точек этого же множества внутри сферы радиуса ρ+2R обладают одной и той же симметрией, то данное множество является периодическим. В случае D=2 в качестве ρ достаточно взять 4R, а в случае D=3 — 6R [28,29]. Заметим, что минимальные расстояния между реперами степенных квантовых шкал (характеристики) равны: для квадратичной шкалы — 4, а для кубической — 6.

Система реперов для шкалы каждой степени такова, что расстояния (разности) между соседними реперами могут принимать значения ρ_D-2; ρ_D; ρ_D+2, где ρ_D — базовая характеристика представляет разность второго и первого реперов. Результаты классификация элементов, характеризуемых порядковым номером, на основе квантовых степенных шкал представлены в таблице.

Характеристики реперов степенных шкал и число групп элементов

Степень шкалы	Базовая характеристика	Характеристики реперов	Число групп элементов
1	4	4	4
2	6	4, 6	10
3	8	6, 8, 10	32
4	10	8, 10, 12	60

Степенные квантовые шкалы учитывают взаиморасположение классифицируемых элементов и позволяют проследить процесс их преобразования. Такие шкалы можно отнести к шкалам разностей, которые при классификации элементов, характеризуемых порядковыми номерами, приводят к конечному множеству классов эквивалентности. Аналогичное разнообразие свойств классифицируемых структур проявляется в кристаллах.

1.9. Взаимосвязь степенных шкал и нумерующих функций

Квантовые шкалы взаимосвязаны посредством нумерующих функций, позволяющих построить взаимно однозначные отображения многомерных векторов с неотрицательными целыми координатами различных размерностей друг в друга. Нумерующие функции представляют связующее звено между шкалами, характеризующими количественные свойства и шкалами, определяющими качественные свойства. Показано, что степенные шкалы могут быть представлены с помощью нумерующих функций [13,30]. Выражение степенных квантовых шкал посредством нумерующих функций позволяет определить размерность пространства, в котором располагаются реперы. В пространстве переменных нумерующей функции реперы квадратичной шкалы располагаются на плоскости и определяются двумя базовыми векторами. Соответственно, реперы кубической шкалы располагаются в трехмерном пространстве; эти реперы можно задать, используя, по меньшей мере, три базовых вектора. Таким образом, подтверждается гипотеза о взаимосвязи классификации элементов, характеризуемых порядковыми номерами, с определенной размерностью пространства, в котором существуют эти элементы.

1.10. Взаимосвязи комплексных и степенных квантовых шкал

Два вида квантовых шкал (комплексные и степенные) полностью взаимосвязаны. Реперы степенной шкалы $Z_D(\bar{r})$ представляют порядковые номера элементов определенной группы комплексной шкалы той же степени $Z_D(n)$. Согласованы также номера групп элементов в шкале степени D и номера элементов в шкале степени D-1. Соответствующие выражения, характеризующие указанные взаимосвязи, представлены с помощью фигурных чисел [13]. Так, например, реперы квадратичной шкалы $Z_2(n,l)$, соответствующие значениям n=2,3,…; l=1: 8,14,24,38,56,78,… представляют собой элементы шестой группы двумерной комплексной шкалы. При этом в пространстве с размерностью D=2 номера групп двумерной шкалы, взаимосвязанные с реперами квадратичной шкалы, суть реперы одномерной шкалы (D=1). В этом свойстве проявляется самоподобие построений системы шкал, отображающих ПСЭ с учетом размерности пространства.

Шкалы, основанные на квантовых числовых последовательностях, могут быть построены только для четырех размерностей: D=1,2,3,4. Таким образом, восемь рассматриваемых квантовых шкал представляют собой полную систему классификации элементов, характеризуемых порядковыми номерами, с учетом размерности пространства. Указанные восемь квантовых шкал в виде таблиц приведены в [13].

Заключение

Периодическая система элементов (ПСЭ), открытая Д.И. Менделеевым в 1869 г., в интегрированном виде содержит необходимую для будущих исследований и технологий физическую, химическую и метрологическую информацию, во многом еще не использованную [31]. Возможно, что раскрытие кодов эволюционного саморазвития и логических основ построения ПСЭ, послужит стимулом для осмысления функционирования интеллектуальных систем, признаком наличия сознания которых, по словам Р. Пенроуза, служит способность интуитивного постижения глубокого различия между истиной и ложью [32].

ПСЭ может быть представлена в пространствах различных размерностей, в зависимости от того, какая степень квантовой числовой последовательности служит основой построения шкал. На определенную размерность пространства в процессе классификации элементов, указывают также взаимосвязи степенных шкал и нумерующих функций. Для каждой размерности можно построить два вида шкал: квантовая комплексная шкала, отображает структурные свойства элементов, а квантовая степенная шкала отображает свойства преобразования элементов. Полный набор отображений структуры и свойств химических элементов в пространствах размерности 1D-4D (и только таких размерностей), включает восемь шкал (таблиц), представляющих ПСЭ [13].

К основным результатам построения системы квантовых шкал, учитывающих свойства симметрии для различных размерностей пространства, относятся:

возможность системной классификации элементов с порядковыми номерами, выражаемыми натуральными числами;

согласование квантово-механического представления ПСЭ и ее современного вида (для трехмерного пространства);

модели элементов, характеризуемых порядковыми номерами, в виде фигурных чисел и представление порядкового номера в виде суммы параметров порядка (формы) и размерности;

неоднозначность моделей элементов с одним и тем же порядковым номером, различающихся значениями параметра порядка и соответственно геометрическими образами;

правила преобразования элементов для различных размерностей пространства;

сложный характер моделей элементов и возможность их сопоставления с квазипериодическими структурами (фибоначчиевыми сверхрешетками) [33].

Классификация элементов, характеризуемых порядковыми номерами, на основе комплексных шкал приводит к тому, что один и тот же элемент может иметь один, два или три образа в виде соответствующих фигурных чисел. Отметим, что неоднозначность моделей атомов впервые была выявлена в 1878-1879 гг. в опытах А. Майера. Эти опыты послужили основой первой не квантовой модели атома, построенной Д.Д. Томсоном. Анализ опытов А. Майера с самоорганизующимися плавающими намагниченными иголками [2], показывает, что при переходе от плоскости к пространствам более высоких размерностей в основу моделирования таких опытов могут быть положены отображения вершин Z-мерных симплексов (фигурных чисел, соответствующих главным диагоналям матриц) в конфигурационное пространство размерностей. Целям такого моделирования служат комплексы в матрицах квантовых измерений, представляющие множества элементов различных размерностей и различных симметрий, объединенных по определенным правилам.

Неоднозначность моделей элементов, обусловленная различными значениями параметра порядка, возникает вследствие того, что один и тот же порядковый номер может появляться в комплексах более одного раза. Так, в первом комплексе $K_D(1)$ порядковые номера Z=1 и Z=2 появляются по два раза каждый (рис. 1). Таким образом, для комплексных шкал различных размерностей выделены классификационные группы, для которых элементы, расположенные в этих группах, будут иметь по одному, по два или по три образа в виде соответствующих фигурных чисел. Эта информация может быть полезна для проведения исследований кластеров воды, металлов и других соединений, в которых определенные атомы одного и того же элемента, например, кислорода или железа, могут входить в различных электронных конфигурациях.

Свойства первых двух элементов остаются практически неизменными для различных размерностей пространства (D>1). Как указывалось ранее, двойственность положения водорода и гелия в ПСЭ объясняется двойственным видом шкал. Первые изменения свойств, обусловленные размерностью физического пространства, начинают проявляться для элементов с порядковыми номерами 3 и 4 (литий и бериллий). При увеличении порядковых номеров элементов таких отличительных особенностей становится все больше.

Для степенных шкал определенных размерностей можно выделить группы элементов, удаленных от реперов с одинаковой характеристикой на одинаковое по величине расстояние, но различающееся знаком. Можно предположить, что для расстояний, равных 1 и 2, группы таких элементов в квадратичной и биквадратической шкалах будут образовывать соединения, аналогичные соединениям щелочных металлов и галогенов в кубической шкале. Так, в плоском мире (D=2) весьма вероятны соединения азота и фосфора, алюминия и фосфора, ванадия и марганца, рубидия и иттрия и т.д. В четырехмерном пространстве (D=4) могут появиться соединения соответственно: лития и натрия, алюминия и скандия, ванадия и галлия и т.д.

Свойство «инертности» элементов характеризуется нулевым отклонением порядкового номера элемента в степенных шкалах от репера с соответствующей характеристикой. В одномерном пространстве список инертных элементов линейной шкалы включает гелий, углерод, неон, кремний, аргон, титан, т.е. элементы, порядковые номера которых удовлетворяют условию Zmod4=2. В двумерном пространстве согласно квадратичной квантовой шкале инертны гелий, кислород, кремний, аргон, хром, никель, германий и т.д. Отметим, что практически все «инертные» элементы кубической шкалы (D=3) обладают экстремальными потенциалами ионизации. В биквадратической (D=4) шкале инертны магний, титан, галлий, олово и т.д. Для шкал всех степеней инертными свойствами обладают элементы с порядковыми номерами 2 (гелий) и 78 (платина).

Сложность расчетов на основе методов молекулярной квантовой химии приводит с необходимостью к поиску новых подходов к анализу электронных распределений и химической связи. Один из таких подходов связан с представлением системы квантовых шкал, отображающих ПСЭ в пространствах различных размерностей. Как показано в [13] существует четыре и только четыре вида таких размерностей, в которых может быть произведена классификация элементов, характеризуемых порядковыми номерами, базирующаяся на квантовых числовых последовательностях, приводящая к восьми квантовым шкалам и согласованная с трехмерным вариантом ПСЭ.

Водородоподобная система и комплексная трехмерная шкала представляют структуры элементов, с бесконечным разнообразием симметрий, подобно тому, как это проявляется в квазикристаллических структурах. Тридцать две группы элементов, которые могут быть определены на основе кубической шкалы, отображают свойства трехмерного пространства, для которого число групп инвариантных решеток равно также тридцати двум. Как известно группы инвариантных решеток представляют фактор-множество всех 230 групп симметрии (федоровских групп), существующих и обнаруженных в кристаллах. Результаты классификации элементов, отнесенной к различным размерностям пространства, включая одномерное пространство, можно сравнить со свойствами симметрии пространств различных размерностей, определяемых группами преобразований (списками Вейля) [34]. Количество групп инвариантных решеток и количество групп элементов для квантовых степенных шкал совпадают в случае двумерного и трехмерного пространств. Для четырехмерного пространства комплексная квантовая шкала приводит к бесконечному числу групп элементов, а для биквадратической шкалы число таких групп равно шестидесяти.

Новые возможности для метрологических исследования свойств элементов открываются в каждой из восьми квантовых шкал, отражающих размерности пространства. Введение одномерной периодической системы в 1D-мире (D=1) позволяет сформулировать положения одномерной химии, в которой существуют четыре группы элементов. Применение положений одномерной химии предполагает постановку новых метрологических задач по исследованию особенностей одномерных квантовых систем, включая исследования свойств квазикристаллов, представляющих структуры с размерами от 1 до 100 нанометров и широко используемых в различных областях науки и техники. Модели плоских структур, представляющие основу химии поверхности, а также особенности их преобразования могут быть исследованы на основе двух квантовых шкал, воспроизводящих ПСЭ для размерности пространства D=2. Здесь в комплексной двумерной шкале присутствует бесконечное число симметрий элементов, отвечающее расширяющемуся набору значений квантовых чисел, а в квадратичной шкале число групп элементов равно десяти, т.е равно числу групп инвариантных решеток плоского мира.

Новые свойства элементов Периодической системы, включая свойства преобразований электронного строения элементов с выделением или поглощением энергии, следуют из рассмотрения двух типов квантовых шкал в случае D=3 [35]. Отметим, что для исследования сверхтяжелых элементов с порядковыми номерами, превышающими 118, выявленные с помощью квантовых шкал свойства могут стать незаменимой информацией, поскольку расчетные методы исследования структур таких элементов чрезвычайно сложны. Так, например, кубическая квантовая шкала позволяет прогнозировать количество элементов в VIII, IX и X периодах, соответственно: 18, 32 и 8, и свойства этих элементов. Наконец, анализ преобразований элементов в четырехмерном пространстве на основе комплексной и степенной шкал в 4D может послужить основой развития четырехмерной или «космической» химии и ее метрологического обеспечения.

Способность интуитивного постижения глубокого различия между истиной и ложью, отмеченная Р.Пенроузом, является признаком наличия сознания, своеобразным критерием которого может служить неалгоритмическое построение суждений [32]. В модели измерений-воздействий при бесконечном увеличении номеров комплексов, обладающих свойствами мультифракталов, рано или поздно наступает момент разрушения алгоритмических основ построения сложной системы. Там за горизонтом, в области сверхбольших номеров комплексов и сверхбольших значений параметра порядка, можно обнаружить признаки сознания или духа, о котором упоминал в «Заветных мыслях» Д.И. Менделеев [36].

Список литературы

1. Менделеев Д.И. Периодический закон. Основные статьи. Сер. «Классики науки». — М.: Изд-во АН СССР, 1958. — С.529-554.
2. Льоцци М. История физики. — М.: Мир, 1971.
3. Логвинов В.В. Все открытия и достижения науки и техники за последние 200 лет. Летопись. — М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2009. — 448 с.
4. Математическая физика. Энциклопедия / Гл.ред.Л.Д.Фадеев — М: Большая Российская энциклопедия, 1998.
5. Чернышев С.Л., Дмитриев А.С. Модель неспецифического воздействия окружающей среды. Препринт ИРЭ РАН, 4(604), 1995.
6. http://www.rfbr.ru.
7. Галиулин Р.В., Имангазиева К.Б. Кристаллография таблицы Д.И.Менделеева// Кристаллография. — 2005, Т.50, №6, с.967-975.
8. Macia E.Aperiodic Structures in Condensed Matter. Fundamentals and Applications. — Boca Raton-London-New-York: CRC Press.Taylor&Francis Group, 2009. — 429 c.
9. Negadi T., Kibler M. The Periodic Table in Flatland // Intern. Journal of Quantum Chemistry. — 1996. — V.57. — №1. — P.53-61.
10. Scerri E.R. The Past and Future of the Periodic Table //American Scientist, V.96, 2008, P.52-58.

11.Хамермеш М. Теория групп и ее приложение к физическим проблемам: Уч. пособие/ Пер.с англ. — М.: Едиториал УРСС, 2002. — 588 с.
12.Пфанцагль И. Теория измерений / Пер. с нем. — М.: Мир, 1976.
13.Чернышев С.Л. Фигурные числа: Моделирование и классификация сложных объектов. — М.: Красанд, 2015. — 400 с.
14.Протодъяконов М.М., Герловин И.Л., Электронное строение и физические свойства кристаллов. — М.: Наука, 1975.
15.Векилов Ю.Х., Черников М.А. Квазикристаллы // Успехи физических наук. — 2010. — Т. 180, №6. — С.561-586.
16.Scerri E.R., Edwards J. Bibliography of secondary sources of the Periodic System of the chemical elements // Foundations of Chemistry **3:** 183-196, 2001.
17.Пригожин И. Конец определенности. Время, хаос и новые законы природы/ Пер.с англ. — Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2001.
18.Иванова В.С. Введение в междисциплинарное наноматериаловедение. —М.:Сайенс-пресс, 2005.
19.Кадомцев Б.Б. Динамика и информация. — М.: Редакция журнала «Успехи физических наук», 1997. — 400 с.
20.Чернышев С.Л.,Чернышев Л.С.Квантовый анализ результатов измерений // Измерительная техника, 2006, №12,с.3-8.
21.Стахов А.П. Введение в алгоритмическую теорию измерений. — М.: Советское радио, 1977.
22.Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики. — СПб.: Изд-во «Лань», 2004. — 672 с.
23.Де Бройль Луи. Революция в физике. — М.: Атомиздат, 1965.
24.Физический энциклопедический словарь./ Гл.ред. А.М.Прохоров — М.: Сов.энциклопедия, 1983. — 928 с.
25.Bogomolov F., Magarshak Yu. Chemical Elements as the States of I-particle // Scientific Israel-Technological Advantages Journal (SITA), V.9, issue 1, 2007.
26.Фултон У. Таблицы Юнга и их приложения к теории представлений и геометрии / Пер. с англ. — М.: МЦНМО. — 2006. — 328 с.
27.Исаев Л.К., Чернышев С.Л. Основанная на теории шкал классификация элементов, характеризуемых порядковыми номерами // Нелинейный мир. — 2007. — №10-11. — т.5. — с.705-711.
28.Делоне Б.Н., Долбилин Н.П., Шторгин М.И., Галиулин Р.В. // Доклады Академии Наук СССР 227 (1976).
29.Лорд Э.Э., Маккей А.Л., Ранганатан С. Новая геометрия для новых материалов. / Пер. с англ. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010. — 264 с.
30.Исаев Л.К.,Чернышев С.Л. О взаимосвязи шкал,характеризующих количественные и качественные свойства сложных объектов, на основе нумерации // Метрология.— 2012.— №12.— с.3-12.
31.Тарбеев Ю.В., Трунов Н.И.,Лобашев А.А.,Кухарь В.В.// Измерительная техника, 2001, №9, с.53.
32.Пенроуз Р. Новый ум короля: О компьютерах, мышлении и законах физики. Пер.с англ. / Под общ. Ред. В.О. Малышенко. Изд.4-е.— М.: УРСС: Издательство ЛКИ, 2011.— 400 с.
33.Чернышев С.Л., Чернышев Л.С. Сверхрешетки и фигурные числа в модели системы обработки сигналов и восприятия цвета // Журнал радиоэлектроники, 2013, №12.
34.Вейль Г. Симметрия/ Пер. с англ. — М.: Наука, 1968.
35.Дмитриев А.М., Чернышев С.Л. В поисках таинственного НИЧТО (К 400-летию произведения И.Кеплера «Новогодний подарок, или о шестиугольных снежинках») . — М.: «СТАНКИН», 2011. — 60 с.
36.Менделеев Д.И. Заветные мысли. — М.: Голос-Пресс, 2009. — 384 с.