

УДК 66.0

ОБЪЕМНАЯ МАТРИЦА ХИМИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ
FOR THE CREATION OF THE THREE-DIMENSIONAL PERIODIC TABLE

Б.В. ГУСЕВ, А.А. СПЕРАНСКИЙ

B.V. GUSEV, A.A. SPERANSKY

(Российская инженерная академия)

(Russian Academy of Engineering)

E-mail: info-rae@mail.ru; vibro-vector@yandex.ru.

Полтора века безуспешных попыток усовершенствовать Периодическую таблицу химических элементов выдающегося русского ученого Д.И. Менделеева подтверждают ее гениальность и чрезвычайную сложность поставленной Нобелевским лауреатом по химии, Президентом Общества "Знание" СССР академиком Н.Н. Семеновым задачи по устранению пяти главных недостатков, породивших ее несистемность и асимметричность. Авторами выполнено первое обобщенное представление об Объемной матрице химических элементов, что позволит решать задачи цифрового моделирования в материаловедении, в том числе при создании текстильных материалов.

Almost 150 years of attempts to modify the Periodic Table of Chemical Elements developed by the remarkable Russian scientist D. I. Mendeleev prove its significance and the complexity of a problem formulated by the Nobel laureate in chemistry, president of the "Znanie" Foundation of the USSR, academician N.N. Semenov. The problem is to eliminate the 5 deficiencies of the table which cause its lack of

systematism and symmetry. The authors have completed the first generalized representation of the Three-dimensional Periodic Table which allows for applications in solving materials science problems, including textile materials creation, using computer modelling.

Ключевые слова: химический элемент, объемная периодическая матрица, механизмы периодичности, орбитальные модели элементов вещества и химических соединений.

Keywords: chemical elements, three-dimensional periodic table, periodicity mechanisms, orbital models of elements and chemical compounds.

Химия, как фундаментальная наука, является основой естествознания. За последние несколько десятилетий химия разительно изменилась благодаря тесному взаимодействию с физической химией, физикой твердого тела, ядерной физикой, органической химией, биохимией, а также применению современных инструментальных методов исследования. Необыкновенно расширился круг объектов, входящих в компетенцию изучения неорганической химии. К ним теперь причисляют не только соединения, но и материалы, причем помимо неорганической составляющей они часто содержат органические, полимерные или биополимерные фрагменты. Именно это дает простор для создания самых разных материалов с заданными и управляемыми свойствами. Материалы стабильны могут найти широкое применение в текстильной промышленности.

В основе самой химии заложено изучение свойств химических элементов и их взаимодействие при получении новых веществ и материалов. В связи с этим невозможно переоценить значение величайшего открытия нашего соотечественника Дмитрия Ивановича Менделеева – Периодического закона (1869 г.), который лежит в основе всего многообразия проявлений и превращений химических веществ. По мере развития науки закон совершенствуется и видоизменяется, открываются новые вещества и возможности их применения [6]. В начале 2019 г. в Париже по инициативе ООН под эгидой ЮНЕСКО состоялся Съезд, посвященный 150-летию публикации Периодической системы химических элементов.

О Таблице Д.И.Менделеева написано большое количество статей и монографий. На ее

основе в Международной практике широко используется длиннопериодная таблица IUPAC, которая более удобна для понимания химических процессов, происходящих в электронных оболочках (табл. 1 (Периодическая таблица Д.И.Менделеева) и табл. 2 (длиннопериодная периодическая система химических элементов IUPAC)). Однако, по мнению Нобелевского лауреата академика Н.Н. Семенова, главные недостатки этих табличных форм состоят в незаполненных клетках таблиц, их асимметричности, а также вынесенные за пределы таблиц лантаноиды и актиноиды [5], [8].

Таблица 1

Таблица 2

Авторы согласны с этим и считают, что совершенство матричных форм и повышение мерности может стать основным элементом завершенности модели периодической системы материального мира [1], [2]. Представляется целесообразным стремиться к симметричности при дальнейшем развитии модели периодического закона в виде таблиц или матриц. Объемная матрица химических элементов найдет широкое применение при создании различных органических материалов [9].

Объемная матрица химических элементов

При изучении проблем периодичности в качестве авторской идеи были сформулированы достаточно очевидные положения. Мир многомерен и, как правило, рассматривается в пространственных измерениях, а таблица – двумерная. Далее была сформулирована более убедительная идея рассмотрения химических элементов с позиции их происхождения в качестве материалов Вселенной (атомы – это звездная материя) [3]. При образовании и развитии Вселенной на первом этапе существовали только водород (H) и гелий (He), и они должны быть во главе таблицы или, что более образно, объемной матрицы. Затем возникли легкие элементы, и только звезды с их высокими температурами и давлениями могли синтезировать тяжелые ядра. В качестве следующего предположения было принято, что создание элементов так же происходило по спирали, как развивается Вселенная [4].

На объемно-каркасной матрице представлены номера химических элементов в виде непрерывного ряда натуральных чисел от 1 до 118 и далее, равномерно распределенных по спирали сверху вниз. Порядковый номер элемента совпадает с величиной заряда ядра и таким же суммарным количеством энергетически уравнивающих электронов на орбиталях оболочек. Подход универсален как по отношению к короткопериодной таблице Д.И. Менделеева, так и длиннопериодной таблице IUPAC.

3D-спирально пространственная расходящаяся система каркаса матрицы химических элементов имеет 4 блока периодичности:

□ первый блок А химических элементов образуют всего два химических элемента – водород-H¹ и гелий-He²;

□ второй блок В составляют химические элементы от лития-Li³ до аргона-Ar¹⁸;

□ третий блок С состоит из элементов от калия-K¹⁹ до ксенона-X⁵⁴;

□ четвертый блок химических элементов D имеет элементы от цезия-Cs⁵⁵ до оганесона Og¹¹⁸ (рис. 1 – объемная периодическая матрица химических элементов).

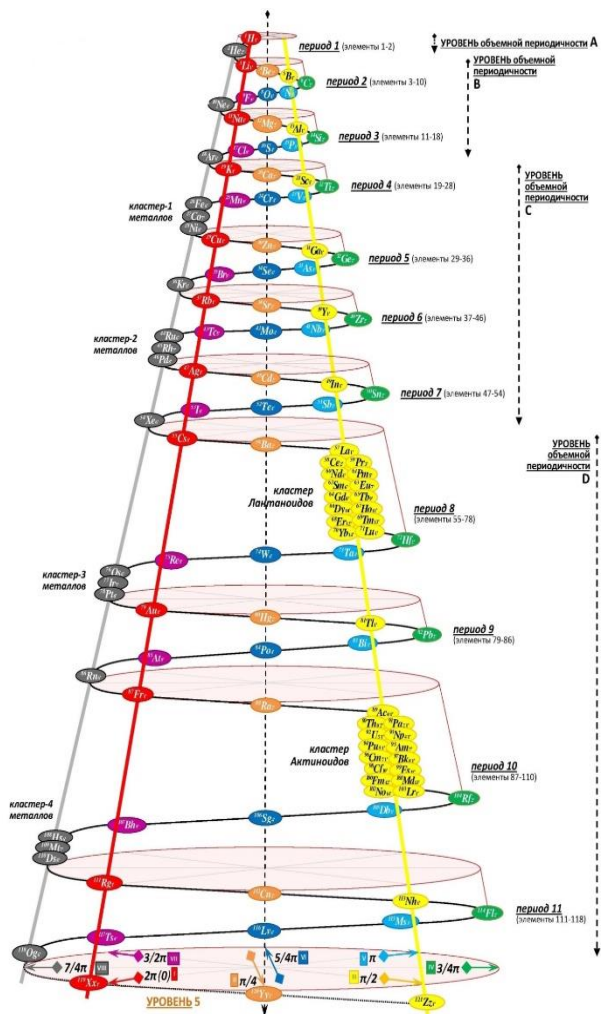


Рис. 1

Из рис. 1 следует, что в первом блоке А представлены первые элементы народившейся Вселенной водород (H) и гелий (He).

Второй блок В образуют два одинаковых периода из восьми элементов от лития (Li) до неона (Ne) и от натрия (Na) до аргона (Ar).

В блоке С появились два дополнительных кластерных образования: железо (Fe), кобальт (Co), никель (Ni) и рутений (Ru), родий (Rh), палладий (Pd).

В блок D дополнительно включились семейства лантаноидов (La) и актиноидов (Ac), а также два кластера: осмий (Os), иридий (Ir), платина (Pt) и хассий (Hs), майтнерий (Mt), дармштадтий (Ds).

Матрица поливалентностей блочной структуры химических элементов

Свойства элементов и соединений, помимо связи с порядковым номером (величиной заряда ядра атома), находятся в существенной зависимости от распределения электронов и активности электронных, особенно валентных, орбиталей оболочек ядер атомов химических элементов [7]. Блочная структура поливалентной матрицы сформулирована на основе периодической длиннопериодной таблицы IUPAC.

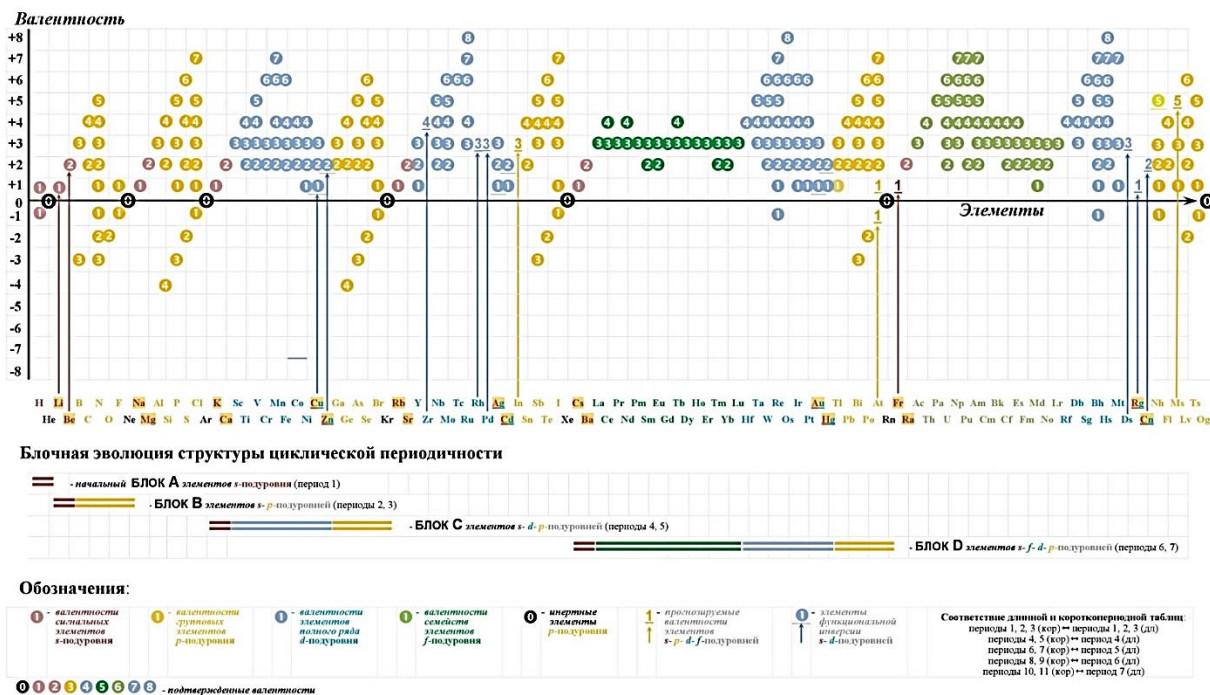


Рис. 2

Структура периодичности представлена в Сводной Матрице Поливалентностей (рис. 2 – валентность химических элементов в зависимости от заряда ядра и структуры электронной оболочки атома). Структурирование энергетических уровней матрицы поливалентностей выполнено следующим образом:

- периоду 1 соответствует одноуровневый блок А;
- периодам 2 и 3 соответствует блок В;
- периодам 4 и 5 соответствует блок С;
- периодам 6 и 7 соответствует блок D.

При этом циклическая периодичность просматривается в электронном строении оболочек атомов химических элементов, ее максимальных и минимальных валентнос-

тей по каждому блоку. Так, для блока А имеет место одна максимальная валентность, для блока В – две максимальные валентности, для блока С – четыре, а для блока D – шесть максимальных валентностей. Имеют место также отрицательные валентности от -4 и -3.

Закономерности заполнения электронных уровней и орбиталей электронной оболочки по мере удаления от ядра атома усложняются, что приводит к сбоям в заполнении уровней и подуровней. Причиной может быть выравнивание энергетических уровней соседних подуровней, при которых электроны начинают перескакивать между подуровнями и даже на соседний уровень без изменения их общего количества в атоме.

Универсальность объемной матрицы состоит в том, что помимо обязательного порядкового номера и строгой координатной привязки химических элементов по группам появляются широкие возможности структурного анализа физико-химических свойств элементов и закономерностей их взаимодействий. Описание элементов в системе координат может характеризоваться набором аналитических параметров в представленной структуре матрицы.

ВЫВОДЫ

1. Предложенная авторами Объемная Периодическая Матрица имеет вид расходящейся спирали и непрерывную последовательность в расположении элементов от водорода (1) и гелия (2) до оганесона (118) с включением в нее лантаноидов и актиноидов и даже с возможностью включения изотопов или другой информации с сохранением расположения групп элементов относительно каркаса матрицы. Это обеспечит возможность цифрового описания новых структур в химии и материаловедении.

2. Сформулирована закономерность о наличии 4-х уровней блочной периодичности структуры в пространственной системе химических элементов, которое очевидно соответствует периодам развития Вселенной. По отдельным блокам включены дополнительные кластерные образования, а также семейства лантаноидов и актиноидов. Получены новые закономерности циклической периодичности по увеличению количества максимальных валентностей в блочной матричной структуре химических элементов от блока А до блока D.

3. Пространственная матрица химических элементов, помимо дополнительной информации о структуре (строении) электронных оболочек для известных элементов 4-х блоков, позволяет в виде электронно-орбитальных формул проектировать структуры неизвестных пока элементов 5-го и последующих блоков периодической системы в пределах 119 – 168 элементов 8-го периода и в пределах 169 – 218 элементов 9-го периода блока E.

4. Основы нового подхода найдут широкое применение при цифровом описании и

изучении как неорганических, так и органических материалов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гусев Б.В., Галушкин Ю.А., Иен Ин Самуэл, Сперанский А.А. Законы объемной периодичности в строении физико-химических элементов и адаптивное материаловедение // Техника и технология силикатов. – 2016, №2. С. 23...31.
2. Гусев Б.В., Иен Ин Самуэл, Галушкин Ю.А., Сперанский А.А. Исследование проблем периодичности в строении химических элементов // Строительные материалы, оборудование, технологии XXI века. – 2016, №7-8. С. 46...49.
3. Стивен Хокинг. О Вселенной в двух словах / Пер. с англ. – М.: АСТ, 2017.
4. Сэм Кин. Исчезающая ложка или Удивительные истории из жизни периодической таблицы Менделеева. – М.: Эксмо, 2015.
5. Семенов Н.Н. Химия и электронные явления. (УФН, 4.1924, 357 с.). Избранные труды, Т.2. – М.: Наука, 2005.
6. Кораблев Д.В., Корольков Д.В. Теория Периодической Системы. – С.-П.: Изд-во Санкт-Петербургского ун-та, 2005.
7. Корольков Д.В. Основы неорганической химии. – М.: Просвещение, 1982.
8. Храмов Ю.А. Физики. Биографический справочник. – М.: Наука, 1983.
9. Гусев Б.В., Сперанский А.А. Новые представления об объемной периодической матрице химических элементов // Инвестиции и инновации. – 2018, №4. С. 3...12.

REFERENCES

1. Gusev B.V., Galushkin Yu.A., Ien In Samuel, Speranskiy A.A. Zakony ob"emnoy periodichnosti v stroenii fiziko-khimicheskikh elementov i adaptivnoe materialovedenie // Tekhnika i tekhnologiya silikatov. – 2016, №2. S. 23...31.
2. Gusev B.V., Ien In Samuel, Galushkin Yu.A., Speranskiy A.A. Issledovanie problem periodichnosti v stroenii khimicheskikh elementov // Stroitel'nye materialy, oborudovanie, tekhnologii XXI veka. – 2016, №7-8. S. 46...49.
3. Stiven Khoking. O Vselennoy v dvukh slovakh / Per. s angl. – M., AST, 2017.
4. Sem Kin. Ischezayushchaya lozhka ili Udivitel'nye istorii iz zhizni periodicheskoy tablitsy Mendeleeva. – M.: Eksmo, 2015.
5. Semenov N.N. Khimiya i elektronnyye yavleniya. (UFN, 4.1924, 357 s.). Izbrannyye trudy, T.2. – M.: Nauka, 2005.
6. Korablev D.V., Korol'kov D.V. Teoriya Periodicheskoy Sistemy. – S.-P.: Izd-vo Sankt-Peterburgskogo un-ta, 2005.
7. Korol'kov D.V. Osnovy neorganicheskoy khimii. – M.: Prosveshchenie, 1982.

8. Khramov Yu.A. Fiziki. Biograficheskiy spravochnik. – M.: Nauka, 1983.

9. Gusev B.V., Speranskiy A.A. Novye predstavleniya ob ob"emnoy periodicheskoy matritse khimicheskikh elementov // Investitsii i innovatsii. – 2018, №4. S.3...12.

Рекомендована заседанием Президиума ООО "Российская инженерная академия". Поступила 22.05.19.
