

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕННОСТИ ЭЛЕМЕНТОВ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ КАК ФУНКЦИИ ИХ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ С ПОМОЩЬЮ ЭВМ

Кутюлин С. А., Котюков В. И., Котлевская Н. Л.

Доказано, что распространенность элементов периодической системы в природе, например литосфере, подчиняется классификации, построенной на квантовомеханических принципах, определяющих электронное строение элементов и их положение в периодической системе. Информационными параметрами такой классификации являются: номер группы, порядковый номер элемента и число подуровней, заполненных в M - и P -уровнях соответственно. Показано, что порядок содержания элемента в масс. % моделируется как функция преимущественно орбитальных и спиновых магнитных квантовых чисел. Оценка остаточной дисперсии модели для различных областей классификации распространенности 85 элементов лежит в пределах $0,4 \div 3,6$.

В работе [1] показана возможность моделирования физико-химических свойств элементов, в том числе и с большими значениями порядковых номеров (атомный вес, потенциал ионизации, плотность, температура плавления), как функции 16 информационных параметров: x_1 — номера элемента, x_2, x_3, x_4, x_5 — квантовых чисел n, l, m_l, m_s соответственно; x_6 — номера периода; x_7 — номера группы; x_8 — типа элемента (s, p, d, \dots); x_9, x_{10}, x_{11} и x_{12} — числа подуровней, заполненных в уровне (M, N, O и P соответственно); $x_{13}, x_{14}, x_{15}, x_{16}$ — число электронов подуровня внешнего уровня (s, p, d, f). При этом физическим представлениям о существовании «островков стабильности» для элементов с большими значениями порядковых номеров был противопоставлен физико-химический критерий, приводящий к аналогичным результатам. В геохимии известны классификации [2] распространенности элемен-

Таблица 1

Элемент	x_1^*	x_2^*	x_4^*	x_5^*	x_7	x_9	x_{12}	x_{13}	x_{15}
Be	40	20	00	00	2	0	0	2	0
Na	110	30	00	10	1	0	0	1	0
K	190	40	00	10	1	2	0	1	0
Ca	200	40	00	10	2	2	0	2	0
Sc	210	30	-20	10	3	2	0	2	1
Cu	290	30	10	00	1	2	0	1	10
Zn	300	30	20	00	2	2	0	2	10
Zr	400	40	-10	10	4	3	0	2	2
Nb	410	40	00	10	5	3	0	1	4
Sn	500	50	00	10	4	3	0	0	0
Sb	510	50	10	10	5	3	0	0	0
Ta	730	50	00	10	5	3	0	2	3
Pb	820	60	00	10	4	3	1	0	0
Bi	830	60	10	10	5	3	1	0	0
Rn	860	60	10	00	8	3	1	0	0
W	740	50	10	10	6	3	0	2	4
Pt	780	50	00	00	8	3	0	1	9
Te	520	50	-10	00	6	3	0	0	0
I	530	50	00	00	7	3	0	0	0
Po	840	60	-10	00	6	3	1	0	0

Таблица 2

Элемент	C, масс. %		Элемент	C, масс. %		Элемент	C, масс. %	
	расчет	данные [2]		расчет	данные [2]		расчет	данные [2]
Li	-3,25	-2,6	Ge	-2,77	-3,3	Ta	-2,86	-3,2
Be	-3,41	-3,6	As	-3,97	-3,3	Pb	-2,77	-2,1
Na	1,05	1,3	Zr	-2,03	-1,3	Bi	-3,97	-4,2
K	1,83	1,3	Nb	-2,49	-2,0	Pt	-6,12	-6,5
Ca	1,64	1,4	Sn	-2,77	-2,4	Rn	-14,71	-15,7
Cu	-1,35	-1,0	Sb	-3,97	-4,4	Po	-14,63	-13,3
Zn	-2,63	-2,5	Hf	-2,03	-3,1	H	0,05	0,1

тов периодической системы, например в литосфере. Тем не менее в научной литературе отсутствуют какие-либо даже полуколичественные корреляции, устанавливающие связь между распространенностью элементов, например в литосфере, и квантовомеханическим электронным строением элементов, которые, как было показано компьютерным экспериментом работы [1], дают достаточно строгое количественное описание физико-химических свойств и области существования элементов периодической системы.

Компьютерный эксперимент осуществлялся путем установления корреляционных зависимостей между порядком распространенности каждого из 85 элементов периодической системы (масс. %), приводимых, например в работе [2], и 16 информационными параметрами x_1-x_{16} . Расчеты проводились на ЭВМ ЕС-1022 (табл. 1).

Для удобства операций с памятью машины коэффициенты со звездочкой увеличены в 10 раз. Если параметр x_5 равен 10, то для расчетов по корреляционным формулам берется значение: $-3,504$; а если x_5 оказывается равным 00, то для расчетов принимается величина $-4,359$. Информационные параметры для остальных элементов периодической системы могут быть легко построены по аналогии с приведенными в данной таблице параметрами при использовании периодической таблицы (рисунков).

Комбинаторный анализ вариации 16 параметров для всех 85 элементов периодической системы позволил установить наибольшее влияние отдельных «информационных» параметров, влияющих на классификацию, группирование элементов. Число таких параметров оказалось ограниченным номером группы, порядковым номером элемента и числом подуровней, заполненных в M - и P -уровнях соответственно. Число параметров, входящих в полученные корреляционные уравнения, предсказывающие порядок распространенности элемента (масс. %) периодической системы (рисунков), не превышало 2-4; ими преимущественно оказались x_4 , x_5 , x_7 , x_{12} , численные значения для которых приведены в табл. 1. Корреляционные уравнения компьютерного моделирования распространенности элементов периодической системы, например в литосфере, приведены ниже: (C - показатель степени распространенности элемента, масс. %).

Область 1. Если $x_7 > 3$ и $x_4 \leq 260$, то $C = -0,120x_4 + 1,388x_5 + 4,973$.

Область 2. Если $x_7 > 3$ и $x_4 > 260$ и $x_7 \leq 5$, то $C = -1,200x_7 + 0,367x_{15} + 2,027$.

H	He
1	2

1s

B	C	N	O	F	N
5	6	7	8	9	10

2p

Al	Si	P	S	Cl	Ar
13	14	15	16	17	18

3p

Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36

4p

Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54

5p

Cs	Ba	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
55	56	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86

6p

Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr	Ku
87	88	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103	104

7p

119	120	121	122	141	142	143	144	145	146	147	148	149	150	151	152	153	154	155	156	157	158	159	160	161	162	163	164	165	166	167	168
-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----

8p

169	170	171	172	191	192	193	194	195	196	197	198	199	200	201	202	203	204	205	206	207	208	209	210	211	212	213	214	215	216	217	218
-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----

9p

* 123	124	125	126	127	128	129	130	131	132	133	134	135	136	137	138	139	140
-------	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----

5g

* 173	174	175	176	177	178	179	180	181	182	183	184	185	186	187	188	189	190
-------	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----

6g

Форма периодической таблицы, лежащая в основе компьютерного эксперимента

Область 3. Если $x_7 > 3$ и $x_1 > 260$ и $x_7 > 5$, то $C = -0,004x_1 - 11,272x_{12} + B$ ($B = -2,352$; при $x_{12} = 0$ значение $B = 3,00$).

Область 4. Если $x_1 \leq 3$ и $x_9 \leq 2$, то $C = +0,433x_2 - 1,759x_9 - 1,277x_{13} - 1,296x_5 - 15,125$.

Область 5. Если $x_7 \leq 3$ и $x_9 > 2$, то $C = -0,065x_4 - 5,086x_{12} + B$, где $B = -3,16$; если $x_3 = 20$, то $B = -6,2$.

Следует отметить, что классификация группирования элементов по их параметрам: x_1, x_7, x_9, x_{12} соответствует их классификации по физико-химическим свойствам:

Область 1:	H, C, N, O, F, Si, P, S, Cl; Ti, V, Cr, Mn, Fe.
Область 2:	Ge, As, Sn, Sb, Pb, Bi; Zr, Nb, Hf, Ta.
Область 3:	Co, Ni; Br, I; Se, Te; Mo, W; Ru, Rh, Pd, Os, Ir, Pt; Po, At, Rn.
Область 4:	Li, Na, K; Be, Mg, Ca; B, Al, Sc; Cu, Zn.
Область 5:	Rb, Cs; Sr, Ba, Ra, Ag, Au, Hg, Cd; Ga, In, Tl; Y, La - Lu; Fr, Pa, Ac, Th, Np, Pu.

Предсказываемый порядок распространенности элементов (табл. 2) для различных областей классификации оценивается остаточной дисперсией для различных областей модели 0,4-3,6.

Как показывает анализ сопоставления по критерию Колмогорова - Смирнова, наблюдаемая расхожимость между расчетными и литературными данными для распространенности элементов периодической системы с большей степенью вероятности может быть признана случайной.

ЛИТЕРАТУРА

1. Куголин С. А., Котюков В. И., Котлевская Н. Л. Ж. физ. химии, 1980, т. 54, № 3, с. 633.
2. Виноградов А. П. Геохимия. Краткая химическая энциклопедия. М.: Советская энциклопедия, 1961, т. 1, с. 843.

Новосибирский институт инженеров
железнодорожного транспорта

Поступила в редакцию
5.XI.1981