

УДК 539.183.3

UDC 539.183.3

**ИНФОРМАЦИОННО-СИНЕРГЕТИЧЕСКИЙ  
АНАЛИЗ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ АТОМОВ  
ХИМИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ**

**INFORMATION-SYNERGISTIC ANALYSIS OF  
ELECTRONIC SYSTEMS OF ATOMS OF  
CHEMICAL ELEMENTS**

**Часть 1. Структурная организация электронных  
систем в плоскости подоболочек**

**Part 1. Structured organization of electronic sys-  
tems in planes of subshell**

Вяткин Виктор Борисович  
к.т.н.

*Vyatkin Victor Borisovich*  
*Cand. Tech. Sci*

*Екатеринбург, Россия*

*Ekaterinburg, Russia*

С помощью синергетической теории информации проведен анализ электронных систем атомов химических элементов в плоскости подоболочек. На основе полученных материалов сделан вывод, что периодическое изменение свойств химических элементов является отражением периодического изменения значений R-функции структурной организации электронных систем

Analysis of electronic systems of atoms of chemical elements in planes of sub-shell with help synergetic information theory is conducted. It is found that periodic change of properties of chemical elements is reflection of periodic change of values R-functions of structured organization of electronic systems

Ключевые слова: ЭЛЕКТРОННАЯ СИСТЕМА,  
ХИМИЧЕСКИЙ ЭЛЕМЕНТ, СТРУКТУРНАЯ  
ОРГАНИЗАЦИЯ, ИНФОРМАЦИОННО-  
СИНЕРГЕТИЧЕСКАЯ ФУНКЦИЯ

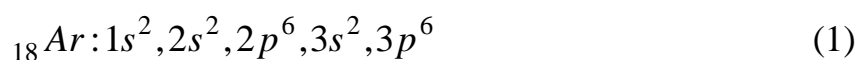
Keywords: ELECTRONIC SYSTEM, CHEMICAL  
ELEMENT, STRUCTURAL ORGANIZATION,  
INFORMATION-SYNERGISTIC FUNCTION

*«Может случиться так, что будущая физика  
включит как первичное, простейшее явление  
"способность сходную с ощущением" и на ее  
основе будет объяснять многое другое.»*

*Вавилов С.*

*Проект статьи "Физика" для БСЭ, 1935.*

Структура электронных систем атомов химических элементов обычно характеризуется со стороны их деления на оболочки (*K, L, M, N, O, P, Q*) и подоболочки (*s, p, d, f*), выделяемые, соответственно, по значениям главного ( $n = 1, 2, \dots$ ) и орбитального ( $l = 0, 1, \dots, n-1$ ) квантовых чисел. Формализованным выражением такого деления являются электронные формулы, отражающие распределение электронов по отдельным оболочкам и подоболочкам. Например, электронная формула атома аргона имеет вид:



Здесь, цифры перед символом подоболочек обозначают номер соответствующей электронной оболочки, а верхний индекс говорит о числе электронов в составе данной подоболочки. Левый нижний индекс у символа элемента, в свою очередь, показывает общее число электронов в нейтральном атоме, равное порядковому номеру ( $Z$ ) химического элемента в периодической системе Д.И.Менделеева или заряду ядра атома.

Такое представление электронных систем атомов позволяет использовать для анализа их структуры синергетическую теорию информации [1,2,3], в которой исследуются информационно-количественные аспекты отражения дискретных систем через совокупность своих частей.

В данной теории установлено, что информация ( $I_0$ ), отражаемая системой с конечным множеством элементов через совокупность своих частей, разделяется на отраженную и неотраженную части, равные, соответственно, аддитивной негэнтропии ( $I_\Sigma$ ) и энтропии ( $S$ ) отражения. То есть:

$$I_0 = I_\Sigma + S \quad (2)$$

Функции  $I_0$ ,  $I_\Sigma$ ,  $S$  в своей совокупности именуется как информационно-синергетические, а их формулы имеют вид:

$$I_0 = \log_2 M \quad (3)$$

$$I_\Sigma = \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{M} \log_2 m_i \quad (4)$$

$$S = - \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{M} \log_2 \frac{m_i}{M} \quad (5)$$

где:  $M$  – общее количество элементов системы,  $N$  – число частей,  $m_i$  – количество элементов в  $i$ -й части. Причем основание логарифма в формулах

(3) – (5) может быть равно только двум<sup>1</sup>, а единицей измерения является *бит отражения*<sup>2</sup>.

По отношению к структуре отражаемой системы аддитивная негэнтропия и энтропия отражения выступают в качестве мер упорядоченности ( $I_0$ ) и хаотичности ( $S$ ), а их отношение, называемое  $R$ -функцией, характеризует в целом структурную организацию системы [2]:

$$R = \frac{I_{\Sigma}}{S} = \frac{\text{порядок}}{\text{хаос}} \quad (6)$$

То есть значения  $R$ -функции говорят о том, что и в какой мере преобладает в структуре системы: хаос или порядок. Так, если  $R > 1$ , то в структуре системы преобладает порядок, в противном случае, когда  $R < 1$  – хаос. При  $R = 1$  хаос и порядок уравнивают друг друга, и структурная организация системы является равновесной.

Так как в соответствии с выражением (2)  $S = I_0 - I_{\Sigma}$ , то  $R$ -функция может быть представлена также в ином, более удобном для расчетов, виде:

$$R = \frac{\sum_{i=1}^N m_i \log_2 m_i}{M \log_2 M - \sum_{i=1}^N m_i \log_2 m_i} \quad (7)$$

С помощью аддитивной негэнтропии и энтропии отражения в синергетической теории информации также оценивается и общий уровень структурного развития систем, представляемый в виде так называемой  $D$ -функции развития [4]:

$$D = I_{\Sigma} \cdot S = \text{порядок} \cdot \text{хаос} \quad (8)$$

---

<sup>1</sup> В работе [1] показано, что при основании логарифма больше двух нарушается принятая в синергетической теории информации аксиома монотонного возрастания отражаемой информации при увеличении числа элементов системы.

<sup>2</sup> В традиционной (вероятностной) теории информации за единицу количества информации принят бит управления, который равен биту отражения, но отличается от последнего содержательным смыслом.

При этом учитывается тот факт, что согласно выражению (2) при фиксированном количестве элементов системы всегда выполняется равенство  $I_{\Sigma} + S = const$ , а произведение двух неотрицательных чисел с постоянной суммой является максимальным, когда числа равны.

В своей совокупности информационно-синергетические функции (4) – (8) исчерпывающе описывают структурные особенности дискретных систем со стороны их деления на части и соотношения последних по количеству элементов или, иначе говоря, – количественно выражают такие характеристики структуры систем, как упорядоченность, хаотичность, организация и развитие. Покажем оценку этих характеристик на примере приведенной электронной формулы атома аргона (1) при ее рассмотрении в плоскости подболочек:

$$M = Z = 18; \quad N = 5;$$

$$m_1 = m_{1s} = 2; \quad m_2 = m_{2s} = 2; \quad m_3 = m_{2p} = 6; \quad m_4 = m_{3s} = 2; \quad m_5 = m_{3p} = 6;$$

$${}_{18}I_{\Sigma}^{n,l} = \frac{3 \cdot 2 \log_2 2 + 2 \cdot 6 \log_2 6}{18} = 2,057;$$

$${}_{18}S^{n,l} = -\left( 3 \frac{2}{18} \log_2 \frac{2}{18} + 2 \frac{6}{18} \log_2 \frac{6}{18} \right) = 2,113;$$

$${}_{18}R^{n,l} = \frac{2,057}{2,113} = 0,973;$$

$${}_{18}D^{n,l} = 2,057 \cdot 2,113 = 4,346.$$

Наибольший интерес из приведенных информационно-синергетических функций представляет  $R$ -функция структурной организации, так как, с одной стороны, эта функция одновременно учитывает хаотичность и упорядоченность структуры, а с другой стороны, позволяет объективно сопоставлять между собой системы с различным количеством элементов. Поэтому, в дальнейшем изложении, будем акцентировать свое внимание на значениях  $R$ -функции.

Проведем теперь информационно-синергетический анализ структуры электронных систем атомов химических элементов, пользуясь таблицей 1, где даны распределения электронов по оболочкам и подоболочкам.<sup>3</sup> При этом предварительно отметим, что традиционное рассмотрение структуры электронных систем осуществляется, как правило, посредством визуального анализа распределения электронов и внимание, главным образом, акцентируется на внешних оболочках и подоболочках, периодическое повторение электронных конфигураций которых согласуется с периодическим изменением свойств химических элементов. То есть, при традиционном рассмотрении электронных систем распределение электронов по внутренним оболочкам и подоболочкам находится в тени и воспринимается как некий пройденный этап системного развития. Иначе говоря, с гносеологической точки зрения, внутренние и внешние электроны атома при традиционном анализе структуры электронных систем находятся в неравноправном положении. Информационно-синергетические функции, в свою очередь, безразличны к особенностям расположения в атоме электронных оболочек и подоболочек и, соответственно, воспринимают электронную систему как единое целое, учитывая все электроны на общих основаниях. Поэтому, выявление тех или иных особенностей изменения значений данных функций с увеличением порядкового номера элементов, которые проявляли бы корреляцию с периодическим изменением свойств химических элементов, представляет большой интерес.

---

<sup>3</sup> Таблица составлена на основе распределения электронов в атомах, приведенного в справочнике по физике Яворского Б.М. и Детлафа А.А.[5].

**Таблица 1 – Распределение электронов в атомах**

№	Эл-т	K			L			M			N				O				P			Q	
		1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f	5s	5p	5d	5f	6s	6p	6d	7s	7p			
1	H	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
2	He	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
3	Li	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
4	Be	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
5	Be	2	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
6	C	2	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
7	N	2	2	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
8	O	2	2	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
9	F	2	2	5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
10	Ne	2	2	6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
11	Na	2	2	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
12	Mg	2	2	6	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
13	Al	2	2	6	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
14	Si	2	2	6	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
15	P	2	2	6	2	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
16	Si	2	2	6	2	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
17	Cl	2	2	6	2	5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
18	Ar	2	2	6	2	6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
19	K	2	2	6	2	6	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
20	Ca	2	2	6	2	6	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
21	Sc	2	2	6	2	6	1	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
22	Ti	2	2	6	2	6	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
23	V	2	2	6	2	6	3	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
24	Cr	2	2	6	2	6	4	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
							(5)	(1)															
25	Mn	2	2	6	2	6	5	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
26	Fe	2	2	6	2	6	6	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
27	Co	2	2	6	2	6	7	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
28	Ni	2	2	6	2	6	8	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
29	Cu	2	2	6	2	6	10	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
30	Zn	2	2	6	2	6	10	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
31	Ga	2	2	6	2	6	10	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
32	Ge	2	2	6	2	6	10	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
33	As	2	2	6	2	6	10	2	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
34	Se	2	2	6	2	6	10	2	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
35	Br	2	2	6	2	6	10	2	5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
36	Kr	2	2	6	2	6	10	2	6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
37	Rb	2	2	6	2	6	10	2	6	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0			
38	Sr	2	2	6	2	6	10	2	6	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0			
39	Y	2	2	6	2	6	10	2	6	1	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0			
40	Zr	2	2	6	2	6	10	2	6	2	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0			
41	Nb	2	2	6	2	6	10	2	6	4	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0			
42	Mo	2	2	6	2	6	10	2	6	5	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0			
43	Tc	2	2	6	2	6	10	2	6	6	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0			
									(5)		(2)												
44	Ru	2	2	6	2	6	10	2	6	7	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0			
45	Rh	2	2	6	2	6	10	2	6	8	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0			
46	Pd	2	2	6	2	6	10	2	6	10	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
47	Ag	2	2	6	2	6	10	2	6	10	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0			
48	Cd	2	2	6	2	6	10	2	6	10	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0			
49	In	2	2	6	2	6	10	2	6	10	0	2	1	0	0	0	0	0	0	0			
50	Sn	2	2	6	2	6	10	2	6	10	0	2	2	0	0	0	0	0	0	0			
51	Sb	2	2	6	2	6	10	2	6	10	0	2	3	0	0	0	0	0	0	0			
52	Te	2	2	6	2	6	10	2	6	10	0	2	4	0	0	0	0	0	0	0			
53	In	2	2	6	2	6	10	2	6	10	0	2	5	0	0	0	0	0	0	0			
54	Xe	2	2	6	2	6	10	2	6	10	0	2	6	0	0	0	0	0	0	0			
55	Cs	2	2	6	2	6	10	2	6	10	0	2	6	0	0	1	0	0	0	0			
56	Ba	2	2	6	2	6	10	2	6	10	0	2	6	0	0	2	0	0	0	0			
57	La	2	2	6	2	6	10	2	6	10	0	2	6	1	0	2	0	0	0	0			
58	Ce	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	2	6	0	0	2	0	0	0	0			
59	Pr	2	2	6	2	6	10	2	6	10	3	2	6	0	0	2	0	0	0	0			
60	Nd	2	2	6	2	6	10	2	6	10	4	2	6	0	0	2	0	0	0	0			

Продолжение таблицы 1

№	Эл-т	K			L			M			N				O				P			Q	
		1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f	5s	5p	5d	5f	6s	6p	6d	7s	7p			
61	Pm	2	2	6	2	6	10	2	6	10	5	2	6	0	0	2	0	0	0	0			
62	Sm	2	2	6	2	6	10	2	6	10	6	2	6	0	0	2	0	0	0	0			
63	Eu	2	2	6	2	6	10	2	6	10	7	2	6	0	0	2	0	0	0	0			
64	Gd	2	2	6	2	6	10	2	6	10	7	2	6	1	0	2	0	0	0	0			
65	Tb	2	2	6	2	6	10	2	6	10	8	2	6	1	0	2	0	0	0	0			
66	Dy	2	2	6	2	6	10	2	6	10	10	2	6	0	0	2	0	0	0	0			
67	Ho	2	2	6	2	6	10	2	6	10	11	2	6	0	0	2	0	0	0	0			
68	Er	2	2	6	2	6	10	2	6	10	12	2	6	0	0	2	0	0	0	0			
69	Tm	2	2	6	2	6	10	2	6	10	13	2	6	0	0	2	0	0	0	0			
70	Yb	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	0	0	2	0	0	0	0			
71	Lu	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	1	0	2	0	0	0	0			
72	Hf	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	2	0	2	0	0	0	0			
73	Ta	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	3	0	2	0	0	0	0			
74	W	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	4	0	2	0	0	0	0			
75	Re	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	5	0	2	0	0	0	0			
76	Os	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	6	0	2	0	0	0	0			
77	Ir	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	7	0	2	0	0	0	0			
78	Pt	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	9	0	1	0	0	0	0			
79	Au	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	0	1	0	0	0	0			
80	Hg	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	0	2	0	0	0	0			
81	Tl	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	0	2	1	0	0	0			
82	Pb	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	0	2	2	0	0	0			
83	Bi	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	0	2	3	0	0	0			
84	Po	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	0	2	4	0	0	0			
85	At	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	0	2	5	0	0	0			
86	Rn	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	0	2	6	0	0	0			
87	Fr	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	0	2	6	0	1	0			
88	Ra	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	0	2	6	0	2	0			
89	Ac	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	0	2	6	1	2	0			
90	Th	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	0	2	6	2	2	0			
91	Pa	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	2	2	6	1	2	0			
92	U	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	3	2	6	1	2	0			
93	Np	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	4	2	6	1	2	0			
94	Pu	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	6	2	6	0	2	0			
95	Am	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	7	2	6	0	2	0			
96	Cm	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	7	2	6	1	2	0			
97	Bk	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	8	2	6	1	2	0			
98	Cf	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	10	2	6	0	2	0			
99	Es	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	11	2	6	0	2	0			
100	Fm	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	12	2	6	0	2	0			
101	Md	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	13	2	6	0	2	0			
102	No	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	0	2	0			
103	Lr	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	1	2	0			
104	Rf	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	2	2	0			
105	Db	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	3	2	0			
106	Sg	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	4	2	0			
107	Bh	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	5	2	0			
108	Hs	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	6	2	0			
109	Mt	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	7	2	0			
110	Ds	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	9	1	0			
111	Rg	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	10	1	0			
112		2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	10	2	0			
113		2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	10	2	1			
114		2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	10	2	2			
115		2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	10	2	3			
116		2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	10	2	4			
117		2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	10	2	5			
118		2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	10	2	6			

Также отметим, что аддитивная негэнтропия является первичной функцией по отношению к энтропии отражения [2], а теоретические значения ее слагаемых при  $m = 0$  и  $m = 1$  не отличаются друг от друга и равны нулю.<sup>4</sup> В то же самое время появление в структуре электронных систем оболочек или подоболочек с одним электроном имеет принципиальное значение. Поэтому, чтобы учитывать в расчетах данный факт, при  $m = 1$  аргумент логарифма в формуле негэнтропии отражения (4) будем увеличивать на единицу, а чтобы при этом не нарушалось соотношение (2) для оценки энтропии отражения будем пользоваться формулой  $S = I_0 - I_\Sigma$ . То есть, например, расчет аддитивной негэнтропии отражения электронной системы атома натрия ( ${}_{11}\text{Na} : 1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^1$ ) в плоскости подоболочек будет выглядеть следующим образом:

$${}_{11}I_\Sigma = \frac{2 \cdot 2 \log_2 2 + 6 \log_2 6 + 1 \log_2 2}{11} = 1,865$$

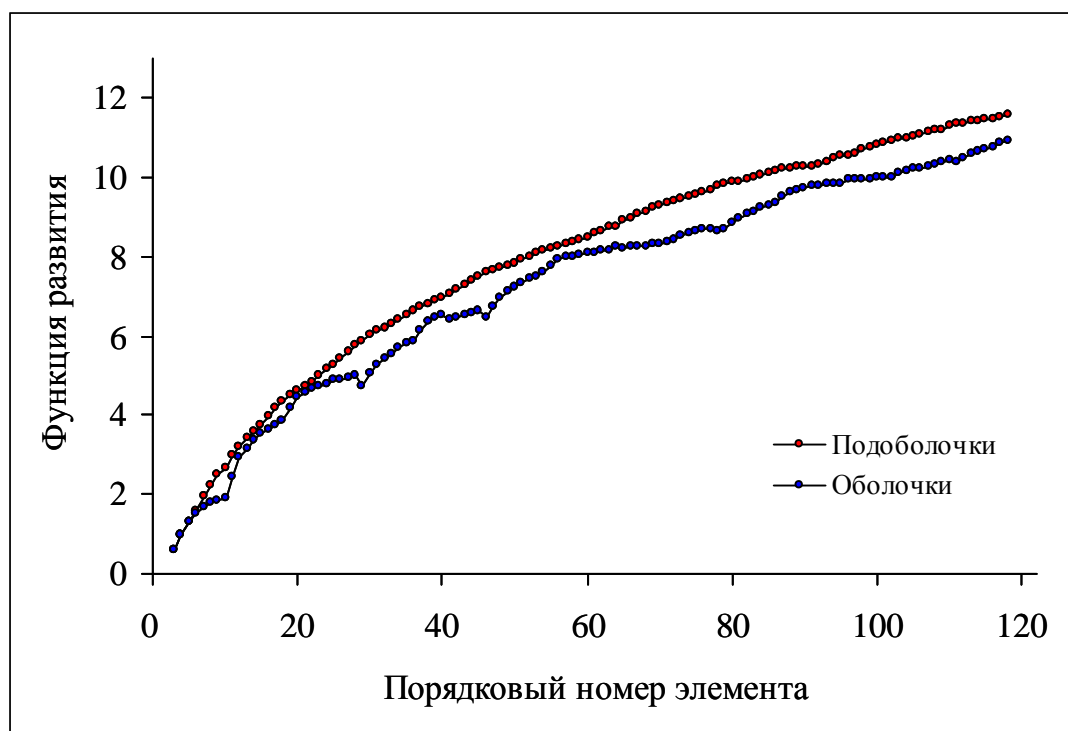
Ранее [4], при сравнительном анализе структурной организации дискретных систем различной природы, в общих чертах уже были охарактеризованы информационно-синергетические особенности электронных систем атомов в плоскости оболочек и подоболочек. При этом, без расчета значений  $D$ -функции развития, было обосновано, что электронные системы атомов в плоскости подоболочек являются более развитыми, чем в плоскости оболочек. Сейчас такой расчет выполнен, а его результаты представлены в виде графиков на рисунке 1.

Из графиков видно, что электронные системы атомов всех химических элементов в плоскости подоболочек являются более развитыми, чем в плоскости оболочек, что подтверждает ранее сделанный вывод.

---

<sup>4</sup> Анализ негэнтропийного противоречия при  $m = 0$  и  $m = 1$  и пути его преодоления см. в работе [1].





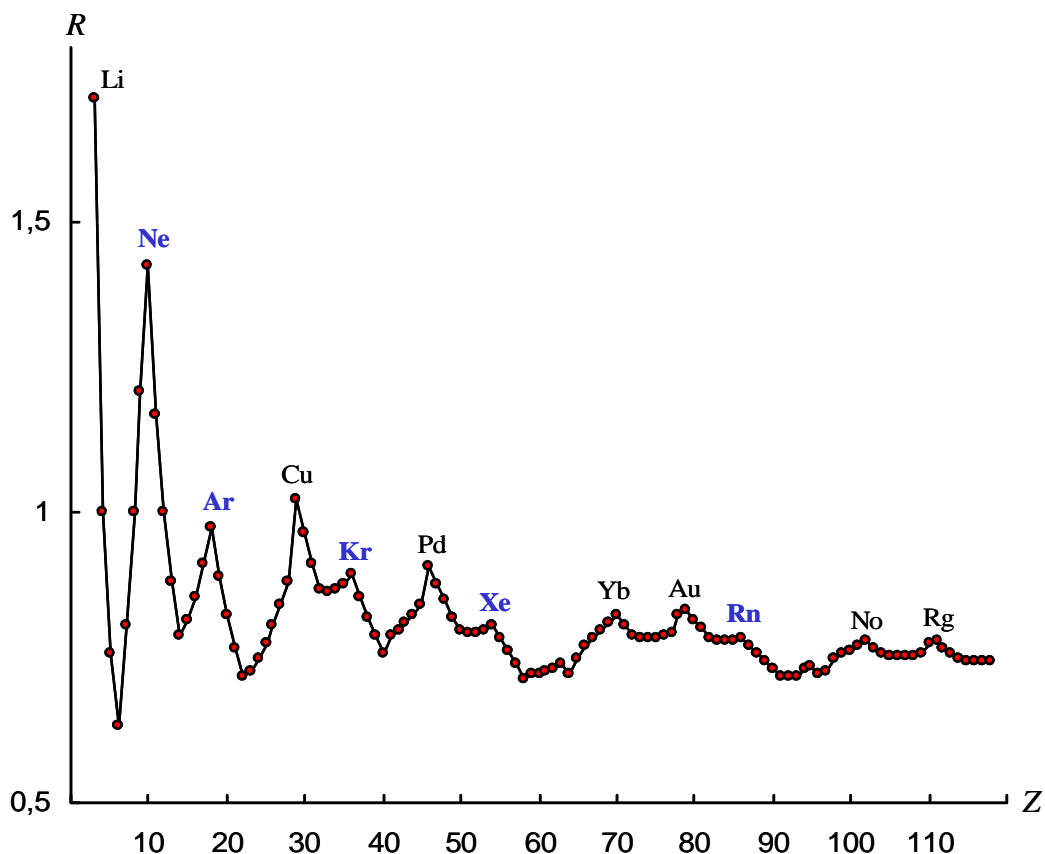
**Рисунок 1. Графики  $D$ -функции развития электронных систем атомов химических элементов в плоскости оболочек и подоболочек**

Кроме того, график  $D$ -функции развития в плоскости подоболочек имеет более монотонный возрастающий характер, что в большей степени согласуется с монотонным увеличением общего числа электронов в атомах, равного заряду их ядра. По этой причине, при дальнейшем анализе электронных систем, ограничимся их рассмотрением в плоскости подоболочек.

Перейдем теперь к непосредственному анализу структурной организации электронных систем атомов химических элементов с помощью информационно-синергетической  $R$ -функции.

На рисунке 2 представлен график зависимости  $R$ -функции систем электронных подоболочек атомов от порядкового номера элементов, а на

рисунке 3 приведена периодическая таблица Д.И. Менделеева с указанием соответствующих конкретных значений.<sup>5</sup>



**Рисунок 2. R-функция электронных систем атомов химических элементов в плоскости подоболочек**

<sup>5</sup> При расчете R-функции электронные системы атомов хрома и технеция показали аномальные отклонения, нарушающие общую закономерность изменения значений ( $R_{Cr} = 0,822$ ,  $R_{Tc} = 0,768$ ). Поэтому, в отличие от принятого в настоящее время распределения электронов по А.Зоммерфельду [6], в атоме хрома при расчетах было взято распределение по Н.Бору ( $3d^4 4s^2$ ) [7], а в атоме технеция один электрон с подоболочки 5s перенесен на подоболочку 4d. В связи с этим уместно привести высказывание автора известного учебного пособия по общей химии, Н.Л.Глинки, относительно принимаемых распределений электронов в атомах: «Нужно, однако, иметь в виду, что все эти схемы отнюдь не являются чем-то законченным, твердо установленным; они представляют собой лишь более или менее достоверную гипотезу, позволяющую объяснить многие физические и химические свойства элементов» [8, с.108].

ПЕРИОД	РЯД	Г Р У П П А Э Л Е М Е Н Т О В										Обозначение элемента Атомный номер	
		I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII				
1	I	(H)							1 Н Водород	2 He Гелий	U 92 Уран 0,715		
2	II	Li 3 Литий 1.710	Be 4 Бериллий 1.000	5 B Бор 0.758	6 C Углерод 0.631	7 N Азот 0.803	8 O Кислород 1.000	9 F Фтор 1.208	10 Ne Неон 1.423	Значение R-функции системы электронных подоболочек			
3	III	Na 11 Натрий 1.169	Mg 12 Магний 1.000	13 Al Алюминий 0.879	14 Si Кремний 0.789	15 P Фосфор 0.812	16 S Сера 0.856	17 Cl Хлор 0.911	18 Ar Аргон 0.973				
4	IV	K 19 Калий 0.891	Ca 20 Кальций 0.823	Sc 21 Скандий 0.766	Ti 22 Титан 0.719	V 23 Ванадий 0.726	Cr 24 Хром 0.746	Mn 25 Марганец 0.773	Fe 26 Железо 0.806	Co 27 Кобальт 0.842	Ni 28 Никель 0.88		
	V	29 Cu Медь 1.023	30 Zn Цинк 0.964	31 Ga Галлий 0.912	32 Ge Германий 0.866	33 As Мышьяк 0.861	34 Se Селен 0.865	35 Br Бром 0.876	36 Kr Криптон 0.892				
5	VI	Rb 37 Рубидий 0.853	Sr 38 Стронций 0.818	Y 39 Иттрий 0.787	Zr 40 Цирконий 0.757	Nb 41 Ниобий 0.787	Mo 42 Молибден 0.796	Tc 43 Технеций 0.808	Ru 44 Рутений 0.822	Rh 45 Родий 0.839	Pd 46 Палладий 0.909		
	VII	47 Ag Серебро 0.877	48 Cd Кадмий 0.847	49 In Индий 0.82	50 Sn Олово 0.795	51 Sb Сурьма 0.791	52 Te Теллур 0.792	53 I Иод 0.796	54 Xe Ксенон 0.804				
6	VIII	Cs 55 Цезий 0.781	Ba 56 Барий 0.760	La * 57 Лантан 0.741	Hf 72 Гафний 0.788	Ta 73 Тантал 0.784	W 74 Вольфрам 0.783	Re 75 Рений 0.785	Os 76 Осьмий 0.788	Ir 77 Иридий 0.793	Pt 78 Платина 0.823		
	IX	79 Au Золото 0.831	80 Hg Ртуть 0.814	81 Tl Таллий 0.799	82 Pb Свинец 0.783	83 Bi Висмут 0.779	84 Po Полоний 0.778	85 At Астат 0.779	86 Rn Радон 0.782				
7	X	Fr 87 Франций 0.768	Ra 88 Радий 0.755	Ac ** 89 Актиний 0.742	Rf 104 Резерфордий 0.755	Db 105 Дубний 0.752	Sg 106 Сиборгий 0.751	Bh 107 Борий 0.751	Hs 108 Гассий 0.753	Mt 109 Мейтнерий 0.755	Ds 110 Дармштадтий 0.774		
	XI	111 Rg Рентгений 0.778	112 ... ... 0.767	113 ... ... 0.757	114 ... ... 0.747	115 ... ... 0.744	116 ... ... 0.743	117 ... ... 0.743	118 ... ... 0.744				

\* ЛАНТАНОИДЫ

Ce 58 Церий 0.714	Pr 59 Прозеодим 0.720	Nd 60 Неодим 0.721	Pm 61 Прометий 0.725	Sm 62 Самарий 0.732	Eu 63 Европий 0.740	Gd 64 Гадолиний 0.723	Tb 65 Тербий 0.748	Dy 66 Диспрозий 0.771	Ho 67 Гольмий 0.783	Er 68 Эрбий 0.796	Tm 69 Тулий 0.810	Yb 70 Иттербий 0.824	Lu 71 Лютеций 0.805
-------------------------	-----------------------------	--------------------------	----------------------------	---------------------------	---------------------------	-----------------------------	--------------------------	-----------------------------	---------------------------	-------------------------	-------------------------	----------------------------	---------------------------

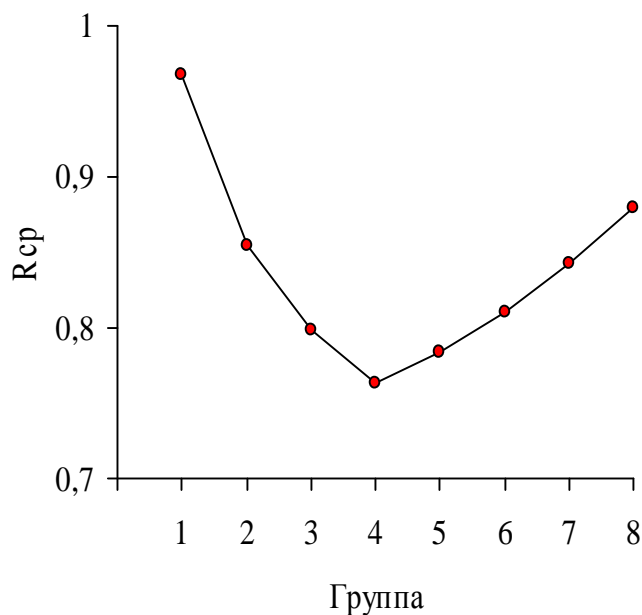
\*\* АКТИНОИДЫ

Th 90 Торий 0.730	Ra 91 Протактиний 0.718	U 92 Уран 0.715	Np 93 Нептуний 0.715	Pu 94 Плутоний 0.730	Am 95 Америций 0.734	Cm 96 Кюрий 0.723	Bk 97 Берклий 0.727	Cf 98 Калифорний 0.750	Es 99 Эйнштейний 0.756	Fm 100 Фермий 0.763	Md 101 Менделевий 0.770	No 102 Нобелий 0.778	Lr 103 Лоуренсий 0.766
-------------------------	-------------------------------	-----------------------	----------------------------	----------------------------	----------------------------	-------------------------	---------------------------	------------------------------	------------------------------	---------------------------	-------------------------------	----------------------------	------------------------------

Рисунок 3. Периодическая таблица Д.И.Менделеева со значениями R-функции электронных систем атомов в плоскости подоболочек

Из приведенных материалов видно, что изменение структурной организации электронных систем в плоскости подболочек имеет периодический, в целом затухающий характер. При этом в горизонтальном направлении периодической таблицы во всех рядах наблюдается одна и та же закономерность: последовательное понижение значений  $R$ -функции в начале ряда и повышение их значений по мере приближения к его концу. Это согласуется с общим характером ослабления металлических свойств химических элементов в начале периодов и усилением металлоидных свойств в их конце. Иначе говоря, в горизонтальном направлении таблицы Д.И.Менделеева периодическому изменению свойств химических элементов соответствует периодическое изменение структурной организации электронных систем, как целостных образований, которое заключается в регулярном чередовании участков нарастания в структуре систем хаотичности и участков, где электронные системы структурно упорядочиваются. При этом локальные максимумы  $R$ -функции наблюдаются у инертных газов (Ne, Ar, Kr, Xe, Rn) и элементов, отвечающих серединам больших периодов (Cu, Pd), как с учетом лантаноидов и актиноидов (Yb, No), так и без их учета (Au, Rg). Наиболее острые минимумы, в свою очередь, проходят по элементам четвертой вертикальной группы (C, Si, Ti, Zr).

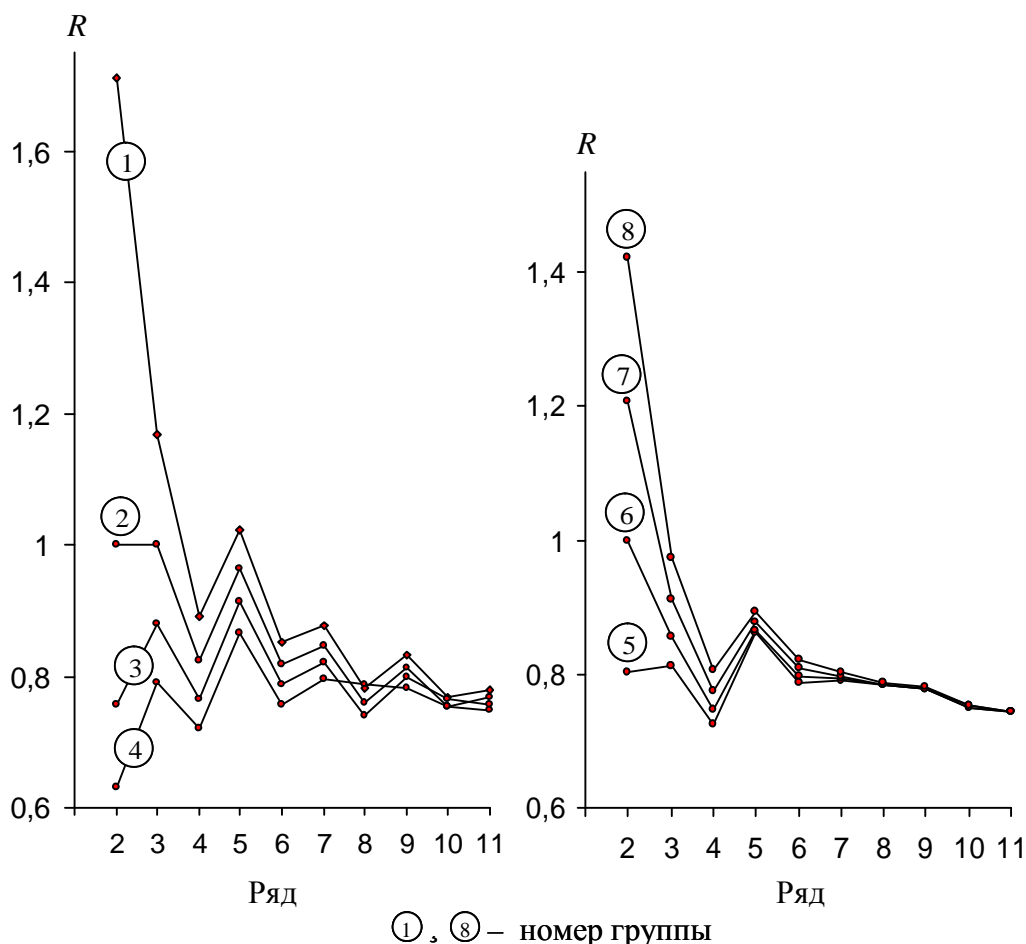
Обобщенной наглядной иллюстрацией сказанного является график средних значений  $R$ -функции по группам таблицы Д.И.Менделеева (рисунок 4), глубокий минимум которого соответствует четвертой группе. При этом обращает на себя внимание тот факт, что типические элементы четвертой группы – углерод и кремний – занимают главенствующее положение по разнообразию соединений с другими элементами, соответственно в живой и неживой природе, причем углерод обладает минимальным значением  $R$ -функции среди всех химических элементов.



**Рисунок 4. Средние значения  $R$ -функции электронных систем в плоскости подоболочек по группам таблицы Д.И. Менделеева**

В пределах вертикальных групп таблицы Д.И. Менделеева также наблюдается устойчивая взаимосвязь изменения значений  $R$ -функции и свойств химических элементов, проявляющаяся в частности в том, что усилению металлических свойств в главных подгруппах элементов с увеличением номера больших периодов, соответствует понижение значений  $R$ -функции. Анализ графиков по группам периодической таблицы (рисунок 5) показывает, что по характеру изменения значений  $R$ -функции и согласованности поведения графиков все группы элементов довольно отчетливо делятся на три типа. К первому типу (металлическому) относятся первая, вторая и третья группы, в пределах которых, начиная с третьего ряда и до конца таблицы, происходит последовательное чередование повышенных и пониженных значений  $R$ -функции. Элементы четных рядов больших периодов фиксируются при этом пониженными значениями, а элементы нечетных рядов соответственно повышенными. Второй тип (металлоидный) составляют шестая, седьмая и восьмая группы, характеризующиеся двумя последовательными понижениями значений со второго по четвертый и с

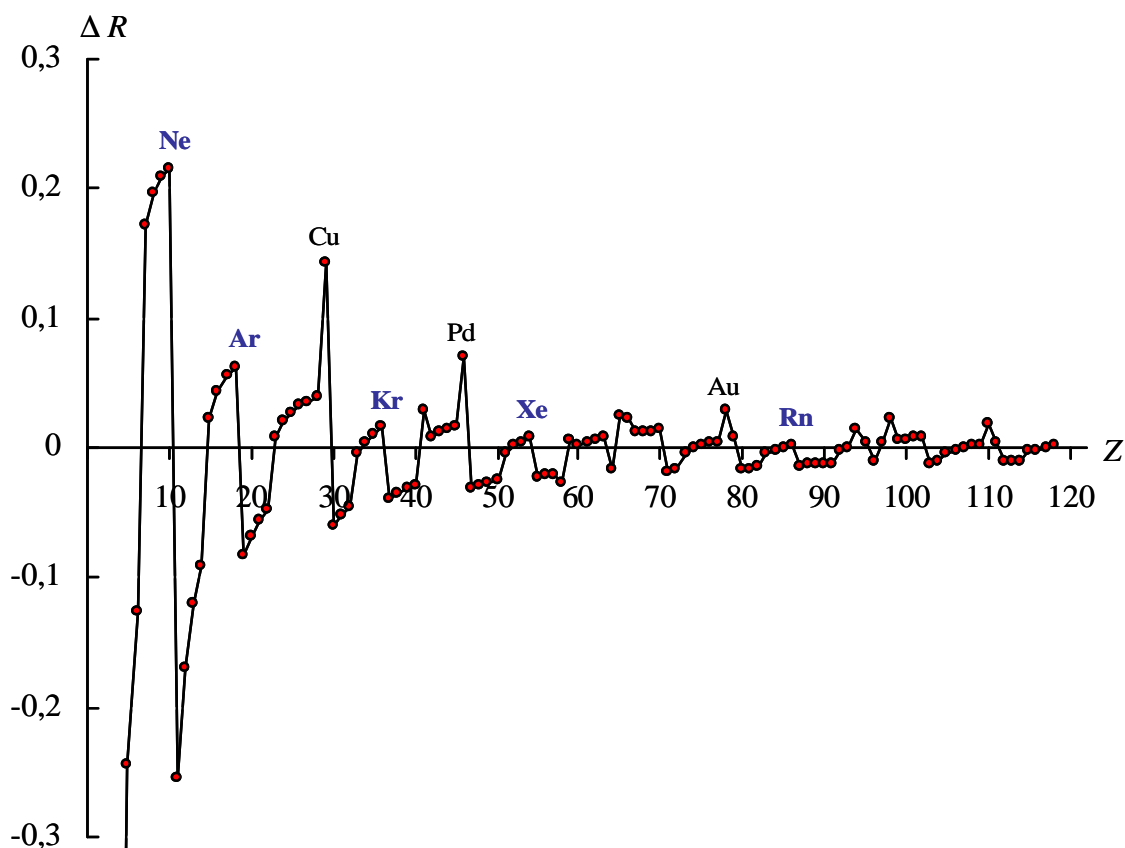
пятого по одиннадцатый ряды. Третий тип является переходным между первыми двумя и включает в себя четвертую и пятую группы, графики которых обладают чертами как первого, так и второго типа. При этом общий характер графика четвертой группы более соответствует первому типу, а пятой группы – второму.



**Рисунок 5. Графики  $R$ -функции электронных систем в плоскости подболочек по группам таблицы Д.И. Менделеева**

В целом общее понижение значений  $R$ -функции в вертикальных группах хорошо согласуется с усилением металлических свойств элементов внизу периодической таблицы.

Особый интерес представляет график приращения значений  $R$ -функции  $\Delta R_Z = R_Z - R_{Z-1}$ , представленный на рисунке 6.



**Рисунок 6. Приращение значений  $R$ -функции электронных систем атомов в плоскости оболочек**

Периодический характер этого графика особенно отчетливо согласуется с периодическим изменением свойств химических элементов в горизонтальном направлении периодической таблицы: в пределах практически каждого ряда, на всем его протяжении, значения  $\Delta R$  последовательно увеличиваются, а при переходе в начало следующего ряда резко падают. При этом типичские элементы малых периодов по знаку  $\Delta R$  отчетливо делятся на две равные группы (1-4 и 5-8), переход между которыми осуществляется скачком. То есть, уменьшение значений  $R$ -функции в начале рядов и периодов и увеличение значений в их конце, идет таким образом, что нарастание хаотичности (рост энтропии отражения) в структуре электронных систем все время уменьшается, а после четвертой группы электронные системы скачкообразно начинают упорядочиваться (возрастает аддитивная негэнтропия отражения).

Отмеченное поведение  $\Delta R$  хорошо согласуется с последовательным увеличением валентности элементов по кислороду, при движении от щелочных металлов к галогенам. При этом валентности по водороду соответствуют положительные значения  $\Delta R$ . В связи с этим можно предполагать, что величина  $\Delta R$  является обобщенной количественной характеристикой изменения свойств химических элементов при их последовательном рассмотрении. В пользу сделанного предположения говорят, в частности, рисунки 7-9, где приведены графики зависимости от порядкового номера таких фундаментальных свойств химических элементов, как энергия ионизации, электроотрицательность и ковалентный радиус атома.<sup>6</sup>



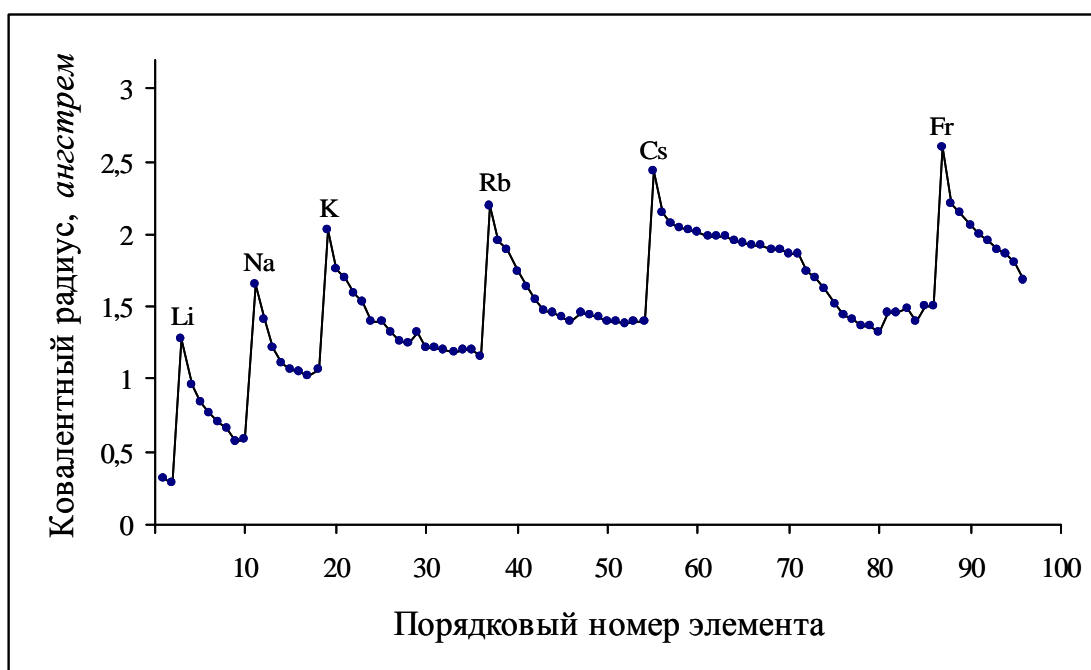
Рисунок 7. Энергия ионизации атомов

<sup>6</sup> При построении графиков использовались данные, взятые из следующих источников: энергия ионизации – [9], электроотрицательность – [10], ковалентный радиус атома – [11].





**Рисунок 8. Электроотрицательность атомов (по Полингу)**



**Рисунок 9. Ковалентный радиус атомов**

Проводя сравнительный анализ этих рисунков с рисунком б, на примере типических элементов малых периодов, к которым обычно обращаются при демонстрации периодического изменения свойств химических

элементов, можно сказать следующее. – На протяжении каждого периода возрастание значений  $\Delta R$  сопровождается последовательным ростом электроотрицательности элементов и общим увеличением энергии ионизации атомов. Ковалентный радиус атомов, в свою очередь, по отношению к  $\Delta R$  изменяется прямо противоположным образом, то есть на протяжении периода все время уменьшается, а при переходе в следующий период резко возрастает. Иначе говоря, чем более структурно упорядочиваются электронные системы, как целостные образования, тем меньше становятся их размеры, несмотря на общее увеличение числа электронов.

Таким образом, мы убедились, что изменение свойств химических элементов, как в горизонтальном, так и в вертикальном направлении периодической таблицы Д.И.Менделеева, согласуется с изменением значений  $R$ -функции электронных систем атомов в плоскости подболочек. Это подводит нас к принципиально важному выводу. – *Периодическое изменение свойств химических элементов является отражением периодического изменения значений  $R$ -функции электронных систем их атомов в плоскости подболочек.*

Сделанный вывод по своей сущности является информационно-синергетической интерпретацией периодического закона Д.И.Менделеева, количественная форма которой, на основе выражения (7), имеет вид:

$$\boxed{Z R^{n,l} = \frac{\sum m_{n,l} \log_2 m_{n,l}}{Z \log_2 Z - \sum m_{n,l} \log_2 m_{n,l}}} \quad (9)$$

Выражение (9) соответствует традиционным представлениям о количественной интерпретации периодичности [12], как о нахождении функциональных зависимостей типа

$$y = f(x), \quad (10)$$

где  $y$  – некоторое свойство химического элемента,  $x$  – фундаментальные характеристики атома, в качестве которых могут выступать  $Z$ , отдельные квантовые числа или их комбинации.

Обычной практикой попыток установления конкретного вида зависимости (10) является эмпирическое конструирование приближенных уравнений для вычисления того или иного отдельно взятого свойства химических элементов, точное значение которого заранее известно [12,13]. В отличие от этого, выражение (9) в отношении свойств химических элементов имеет комплексный характер и, представляя собой результат аналитических исследований, не является специально созданной математической конструкцией, изначально ориентированной на функциональную зависимость (10).

Заканчивая информационно-синергетический анализ электронных систем атомов в плоскости подболочек, необходимо остановиться на взаимосвязи синергетической теории информации со статистической термодинамикой в лице энтропии Больцмана ( $E$ ), имеющей вид:

$$E = k \ln W, \quad (11)$$

где:  $k = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/град}$  – постоянная Больцмана,  $W$  – термодинамическая вероятность, представляющая собой число возможных микросостояний системы, посредством которых может быть реализовано ее данное макросостояние.

В работе [3] установлено, что каждая из трех информационно-синергетических функций  $I_0$ ,  $I_\Sigma$ ,  $S$  имеет определенную, асимптотически линейную, взаимосвязь с энтропией Больцмана (11):

$$I_0 \approx \frac{E_2}{c}, \quad I_\Sigma \approx \frac{E_1}{c}, \quad S \approx \frac{\Delta E}{c}, \quad (12)$$

где:  $E_1$  - энтропия системы в структурно-упорядоченном состоянии,  $E_2$  - энтропия системы в состоянии термодинамического равновесия,

$\Delta E = E_2 - E_1$  - энтропия смешения,  $c = kM \ln 2$ .

Из формул (12) следует, что  $R$ -функция структурной организации систем в термодинамическом отношении имеет вид:

$$R \approx \frac{E_1}{\Delta E} = \frac{E_1}{E_2 - E_1} \quad (13)$$

Данный факт, по-видимому, позволяет говорить о том, что между периодическим законом Д.И.Менделеева и статистической термодинамикой существует определенная взаимосвязь, роль переходного мостика в которой играют выражения (9) и (13). Термодинамическая вероятность  $W$ , фигурирующая в энтропии Больцмана (11), при этом может быть проинтерпретирована следующим образом. – Если свободные электроны, из которых образовалась электронная система атома, мысленно пронумеровать, то термодинамическая вероятность будет представлять собой число микросостояний системы свободных электронов, посредством которых могло быть реализовано данное макросостояние (конфигурация) электронной системы атома.

Также следует отметить, что на возможность установления взаимосвязи периодического закона и термодинамики, с иных позиций, указывалось учеными еще в середине прошлого века [14].

Подводя итог сделанному в настоящей статье, прежде всего отметим, что проведенный информационно-синергетический анализ структурной организации электронных систем позволяет по новому смотреть на причины периодического изменения свойств химических элементов, не ограничиваясь, как обычно, акцентированием внимания на конфигурациях наружных электронных оболочек атомов, а рассматривая также распределение электронов в целом по всей электронной системе. Информационно-синергетическая формула количественной интерпретации периодического закона (9), в свою очередь, представляет несомненный интерес и требует проведения дополнительных исследований в рамках анализа взаимосвязи

изменения свойств химических элементов и значений  $R$ -функции при последовательном переходе от одного элемента к другому. В целом же изложенный материал может рассматриваться как принципиально новый вклад в развитие учения о периодичности химических элементов.

### Литература

1. Вяткин В.Б. Синергетическая теория информации. Часть 1. Синергетический подход к определению количества информации / В.Б. Вяткин // Научный журнал КубГАУ [Электронный ресурс]. – Краснодар: КубГАУ, 2008. – №10(44). – Шифр Информрегистра: 0420800012\0137. – Режим доступа: <http://ej.kubagro.ru/2008/10/pdf/12.pdf>
2. Вяткин В.Б. Синергетическая теория информации. Часть 2. Отражение дискретных систем в плоскости признаков их описания / В.Б. Вяткин // Научный журнал КубГАУ [Электронный ресурс]. – Краснодар: КубГАУ, 2009. – №01(45). – Шифр Информрегистра: 0420900012\0001. – Режим доступа: <http://ej.kubagro.ru/2009/01/pdf/12.pdf>
3. Вяткин В.Б. Синергетическая теория информации. Часть 3. Информационные функции и энтропия Больцмана / В.Б. Вяткин // Научный журнал КубГАУ [Электронный ресурс]. – Краснодар: КубГАУ, 2009. – №02(46). – Шифр Информрегистра: 0420900012\0015. – Режим доступа: <http://ej.kubagro.ru/2009/03/pdf/08.pdf>
4. Вяткин В.Б. Хаос и порядок дискретных систем в свете синергетической теории информации / В.Б. Вяткин // Научный журнал КубГАУ [Электронный ресурс]. – Краснодар: КубГАУ, 2009. – №03(47). – Режим доступа: <http://ej.kubagro.ru/2009/03/pdf/08.pdf>
5. Яворский Б.М., Детлаф А.А. Справочник по физике. – М.: Наука, 1974. – 943с.
6. Зоммерфельд А. Строение атома и спектры. Том 1. – М.: Гос. изд. технико-теор. лит., 1956. – 591с.
7. Михайленко Я.М. Периодическая система элементов Менделеева в оформлении Бора-Томсена как классификация атомов по их моделям. – М.: ЕМХТИ, 1931.
8. Глинка Н.Л. Общая химия. – М.: Химия, 1965. – 688с.
9. Сайт <http://www.mozarina.ru/index.htm>
10. Сайфуллин Р., Сайфуллин А. Современная форма таблицы Менделеева. // Наука и жизнь. – №7, 2004. – [Электронная версия] – Режим доступа: [http://www.nkj.ru/archive/articles/2172/?phrase\\_id=3020663](http://www.nkj.ru/archive/articles/2172/?phrase_id=3020663)
11. Beatriz Cordero, Verónica Gómez, Ana E. Platero-Prats, Marc Revés, Jorge Echeverría, Eduard Cremades, Flavia Barragán and Santiago Alvarez. COVALENT RADIUS REVISITED // Dalton Trans., 2008, 2832 – 2838, DOI: 10.1039/b801115j. – Режим доступа: <http://www.rsc.org/Publishing/Journals/DT/article.asp?doi=b801115j>
12. Трифонов Д.Н. О количественной интерпретации периодичности. – М.: Наука, 1971. – 158с.
13. Периодический закон // Википедия – свободная энциклопедия. – [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://ru.wikipedia.org>
14. Спицин В.И. Периодическая система и современная неорганическая химия. // Глазами ученого. – М.: Изд. АН СССР, 1963. – С. 280 – 317.