

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ПОСТРОЕНИЕ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ ЭЛЕМЕНТОВ НА ОСНОВЕ ТЕОРИИ ГРУПП СИММЕТРИИ

А.Л. Гурский, Л.И. Гурский

Кафедра защиты информации, Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, П. Бровки, 6, Минск, Республика Беларусь, 220013
E-mail: gurskii@bsuir.by, lhur@bsuir.by

В статье дан обзор идей и подходов к систематизации химических элементов и теоретическому построению Периодической системы элементов Д.И. Менделеева. Дан краткий анализ исследований, обусловивших современную формулировку периодической зависимости свойств элементов, а также краткий обзор применений групп симметрии и уравнений квантовой механики в науке. Выражена взаимосвязь состояний водородоподобных атомов и группы симметрии $SO(4,2)$. Показано, каким образом с использованием динамической симметрии и теории групп Ли может быть теоретически построена Периодическая система элементов.

Ключевые слова: периодическая система, теория групп, динамическая симметрия, группа $SO(4,2)$

THEORETICAL CONSTRUCTION OF A PERIODIC SYSTEM OF ELEMENTS BASED ON THE THEORY OF SYMMETRY GROUPS

A.L. Gurskii, L.I. Hurski

Department of information security, Bealrusian state university of informatics and redioelectronics, P. Brovki 6, Minsk, Republic of Belarus, 220013
E-mail: gurskii@bsuir.by, lhur@bsuir.by

The paper provides an overview of ideas and approaches to the systematization of chemical elements and the theoretical construction of the Periodic System of elements by D.I. Mendeleev. A brief analysis of the studies that led to the modern formulation of the periodic dependence of the properties of elements, as well as a brief overview of the applications of symmetry groups and equations of quantum mechanics in science, is given. The relationship between the states of hydrogen-like atoms and the symmetry group $SO(4,2)$ is expressed. It is shown how a periodic system of elements can be theoretically constructed using dynamic symmetry and the theory of Lie groups.

Key words: Periodic system, group theory, dynamical symmetry, group $SO(4,2)$

Для цитирования:

Гурский А.Л., Гурский Л.И. Теоретическое построение периодической системы элементов на основе теории групп симметрии. *Рос. хим. ж. (Ж. Рос. хим. об-ва)*. 2022. Т. LXVI. № 2. С. 57–70. DOI: 10.6060/rcj.2022662.10.

For citation:

Gurskii A.L., Hurski L.I. Theoretical construction of a periodic system of elements based on the theory of symmetry groups. *Ros. Khim. Zh.* 2022. V. 66. N 2. P. 57–70. DOI: 10.6060/rcj.2022662.10.

ВВЕДЕНИЕ

Симметрию выдающийся математик Герман Вейль (Hermann Klaus Hugo Weyl) определяет, как красоту объекта, обусловленную пропорциональностью, равновесием, подобием, гармонией, согласованностью [1]. Алгебраической системой, как известно, называется объект, состоящий из

трех множеств A , Ω_F , Ω_R , где A – непустое множество, Ω_F – множество алгебраических операций, определенных на A , Ω_R – множество отношений, определенных на A . При определенном преобразовании объект, имеющий точную симметрию, совмещается сам с собой. [2]

Алгебраическая система характеризуется автоморфизмом. Автоморфизм – изоморфизм, отображающий алгебраическую систему на себя. Совокупность всех автоморфизмов некоторой алгебраической системы с операцией композиции и тождественным отображением в качестве нейтрального элемента образует группу [3].

Различают статическую и динамическую симметрии. В статической симметрии рассматриваются равновесие и покой. Объектами изучения в динамической симметрии являются движение и распределение. Динамическая симметрия квантовой системы – это симметрия полного пространства векторов состояния системы, образующих одно неприводимое представление некоторой группы или алгебры Ли (Marius Sophus Lie), операторы которой объединяют в одно семейство все состояния системы и включают в себя операторы переходов между различными состояниями [4].

Периодическая система элементов представляет собой классификацию элементов на основе зависимости их свойств от их атомной массы (зарядов их атомных ядер). Ее изображают в виде аналитических зависимостей, в виде таблиц, в виде геометрических фигур и т. п. При этом за единицу измерения атомных и молекулярных масс элементов принимается $1/12$ часть массы нейтрального атома изотопа углерода ^{12}C , находящегося в основном состоянии [5].

Исследования по систематизации химических элементов начинаются в начале XIX века.

В 1817 г. немецкий химик Иоганн Вольфганг Деберейнер (Johann Wolfgang Döbereiner) предложен закон триад, согласно которому атомная масса ряда элементов близка к отношению среднего арифметического массы близких элементов к массе исходного элемента [6].

В 1843 г. немецкий химик Леопольд Гмелин (Leopold Gmelin) предложил таблицу эквивалентных весов элементов, содержащую триады, тетрады, пентады [6].

В 1863 г. французский химик Александр Эмиль Бегуйе Шанкуртуа (Alexandre-Emile Beguyer de Chancourtois) расположил элементы по увеличению атомного веса на винтовой линии, нанесенной на поверхность цилиндра, при этом оказалось циклическое повторение по вертикали их физико-химических свойств [6].

В 1864 г. английский химик Джон Александр Рейна Ньюлэндс (John Alexander Reina Newlands) классифицирует элементы с помощью музыкального «закона октав» (кратность 7) [6]. В том же году немецкий ученый Мейер Ю. Л. (Julius

Lothar von Meyer) опубликовал работу, в которой периодическое повторение свойств элементов связывается с валентностью [6].

В 1868 г. английский физик У. Одлинг (William Odling) опубликовал таблицу, содержащую 45 из 62 известных в то время элементов [6].

1 марта 1869 г (17 февраля по старому стилю). Д.И. Менделеев сдал в набор рукопись «Опыт системы элементов, основанный на их атомном весе и химическом сходстве». В этой работе предложена таблица, в которой впервые предусмотрены клетки для неизвестных в то время элементов. Классификация элементов основана на сформулированном Д.И. Менделеевым периодическом законе – «физические и химические свойства элементов, проявляющиеся в свойствах простых и сложных тел, ими образуемых, находятся в периодической зависимости от их атомного веса» [7].

6 марта 1869 г. (22 февраля по старому стилю) на заседании Русского химического общества заслушан подготовленный Д.И. Менделеевым доклад «Соотношение свойств с атомным весом элементов» [8].

В 1870 г. Д.И. Менделеев предсказал свойства трех элементов с названиями экаалюминий, экабор, экасилиций (в современной Периодической системе элементов это галлий (31), скандий (21), германий (32)). Затем были предсказаны еще 8 элементов, в их числе дивителлур, экаиод, экамарганец, экацезий (в современной Периодической системе элементов это полоний (84), астат (85), технеций (43), франций (87)). Для названий элементов Д.И. Менделеев использовал термины «эка», «двиг» и «три», которые на древнем литературном языке Индии обозначают числа «один», «два» и «три» [9].

Первым подтверждением предсказанных элементов было открытие в 1875 г. Полем Эмилем Лекоком де Буабодраном (Paul-Emile Lecoq de Boisbaudran) галлия, свойства которого и место в Периодической системе элементов под названием экаалюминий были определены Д.И. Менделеевым [10]. Все предсказанные Д.И. Менделеевым элементы в последующие годы были открыты [11].

В литературных источниках содержится довольно много различных версий относительно открытия Д.И. Менделеевым Периодического закона, в их числе и экзотических. Не будем их приводить, а сошлемся на текст Д.И. Менделеева, относящийся к открытию Периодического закона. Д.И. Менделеев писал: «Посвятив свои силы изучению вещества, я вижу два таких признака или свойства: массу, занимающую пространство и проявляющуюся в притяжении, а яснее или реальнее

всего в весе и индивидуальность, выраженную в химических превращениях, а ясная всего формулированная в представлении о химических элементах. Когда думаешь о веществе, помимо всякого представления о материальных атомах, нельзя, для меня, избежать двух вопросов: сколько и какого дано вещества, чему и соответствуют понятия: массы и химизма... Невольно зарождается мысль о том, что между массой и химическими особенностями элементов необходимо должна быть связь, а так как масса вещества, хотя и не абсолютная, а лишь относительная, выражается окончательно в виде атомов, то надо искать функционального соответствия между индивидуальными свойствами элементов и их атомными весами...: Вот я и стал подбирать, написав на отдельных карточках элементы с их атомными весами и коренными свойствами сходные элементы и близкие атомные веса, что быстро и привело к тому заключению, что свойства элементов стоят в периодической зависимости от их атомного веса... Я старался основать систему на величине атомного веса элементов. Первая проба, сделанная в этом отношении, была следующая: я отобрал тела с наименьшим атомным весом и расположил их по порядку величины их атомного веса. При этом оказалось, что существует как бы период свойств простых тел, и даже по атомности элементы следуют друг за другом в порядке арифметической последовательности величины их пая: Li=7, Be=9,4, B=11, C=12, N=14, O=16, F=19, Na=23, Mg=24, Al=27,4, Si=28, P=31, S=32, Cl=35,5. В ряде элементов, имеющих пай более 100, встречаем аналогичный непрерывный ряд: Ag=108, Cd=112, Ur=116, Sn=118, Sb=122, Fe=128, J=127. Оказывается, что Li, Na, K, Ag так же относятся друг к другу, как C, Si, Ti, Sn или N, P, V, Sb, и т.д. (В словарях слово пай определяется как часть или доля). Родилось тотчас предположение: не выражаются ли свойства элементов в их атомном весе, нельзя ли на нем основать систему? ... Такова основная мысль, заставляющая расположить все элементы по величине их атомного веса. А при этом тотчас замечается повторение свойств в периодах элементов. Примеры этому мы уже знаем: галоиды – Fe=19, Cl=35,5, Br=80, J=127; щелочные металлы – Na=23, K=39, Rb=85, Cs=133; щелочноземельные металлы – Mg=24, Ca=40, Sr=87, Ba=137. В этих трех группах видна сущность дела. Галоиды обладают атомными весами, меньшими, чем щелочные металлы, а эти последние – меньшими, чем щелочноземельные элементы» [9].

Периодический закон Д.И. Менделеев формулировал следующим образом: «...если все элементы расположить в порядке по величине их атомного веса, то получится периодическое повторение свойств. Это выражается законом периодичности: свойства простых тел, также формы и свойства соединений элементов, находятся в периодической зависимости (или, выражаясь алгебраически, образуют периодическую функцию) от величины атомных весов элементов» [9]. Отметим, что с точки зрения математики речь может идти не о периодической, а скорее о квазипериодической функции, о чем подробнее будет сказано ниже.

В 1913 г. английским физиком Г. Мозли (Moseley Henry Gwyn-Jeffreys) экспериментально установлена зависимость $\sqrt{\nu/cR_\infty} = (Z - \sigma)\sqrt{1/n_1^2 - 1/n_2^2}$, которая связывает частоту ν спектральной линии характеристического рентгеновского излучения атома элемента и его порядковый номер Z , где ν – частота, c – скорость света, R_∞ – постоянная Ридберга, σ – константа экранирования электронов атома, n_1 – главное квантовое число внутренней орбитали, на которую осуществляется переход электрона, инициирующего излучение соответствующей линии, n_2 – главное квантовое число внешней орбитали, с которой осуществляется переход ($n_1 = 1, 2, 3, \dots, n_2 = n_1 + 1, n_1 + 2, n_1 + 3$). Зависимости от Z на диаграмме Г. Мозли представляют собой ряд прямых (K-, L-, M- и т.д. серии, соответствующих значениям $n_1 = 1, 2, 3, \dots$). Эти зависимости, известные как закон Мозли, имеют огромное значение для установления физического смысла Периодической системы элементов, атомных номеров Z и подтверждения модели планетарного атома [12, 13].

АНАЛИЗ ИССЛЕДОВАНИЙ, ОБУСЛОВИВШИХ СОВРЕМЕННУЮ ФОРМУЛИРОВКУ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ ЗАВИСИМОСТИ СВОЙСТВ ЭЛЕМЕНТОВ

С учетом результатов исследований многих ученых, особенно Нильса Бора (Niels Henrik David Bohr) и Арнольда Зоммерфельда (Arnold Johannes Wilhelm Sommerfeld) сегодня периодический закон формулируется следующим образом: «...периодическая зависимость свойств элементов определяется числом положительных зарядов ядра атома или же числом электронов в свободном атоме» [12, 13].

Периодическая система элементов, установленная на основе гениальных обобщений Д.И. Менделеева, Н. Бора, А. Зоммерфельда [7–13] в течение более 150 лет является объектом исследований химиков, физиков и учёных других специальностей в ее фундаментальных и прикладных аспектах.

Термин «периодическая зависимость» (или по Д.И. Менделееву – «...выражаясь алгебраически, образуют периодическую функцию...») с математической точки зрения требует пояснений.

Пусть M есть абелева группа (обычно считают $M = \mathbb{R}, +$ где $\mathbb{R}, +$ вещественные числа с операцией сложения или $\mathbb{C}, +$ – комплексные числа с операцией сложения). Как известно, функция $f: M \rightarrow \mathbb{N}$, (где \mathbb{N} произвольное множество её значений) называется периодической функцией с периодом $T \neq 0$, если справедливо условие $f(x) = f(x \pm nT)$. При любом $x \in X \subset \mathbb{R}$ (или $x \in X \subset \mathbb{C}$) числа $x \pm nT$ также принадлежат множеству X и выполняется равенство $f(x) = f(x \pm nT)$. Числа $\pm nT$, где n – натуральное число, также являются периодом функции $f(x)$. Периодическую функцию можно представить в виде ряда Фурье: $\sum_{k=0}^{\infty} (a_k \cos(2k\pi/T)x + b_k \sin(2k\pi/T)x)$. Для тригонометрических рядов коэффициенты определяются по формулам Эйлера – Фурье через $f(x)$. С этих позиций понятие периодическая функция, определяющая расположение веществ в Периодической системе элементов, не выполняется. Не удалось это сделать и используя, например, функцию $\cos x + \cos \sqrt{2}x$. Для функции $\cos x + \cos \sqrt{2}x$ периоды являются несоизмеримыми и периодам сопоставляется ряд Фурье: $f(x) \sim \sum_n e^{i\lambda_n x}$, где $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ – любая последовательность действительных чисел \mathbb{R}^n , $R_n = M \{f(x)e^{-i\lambda_n x}\}$, при этом M определяется равенством Парсеваля $\sum_{-\infty}^{\infty} |c_n|^2 = (1/2\pi) \int_{-\pi}^{\pi} f^2(x) dx$, являющимся аналогом теоремы Пифагора в векторном пространстве со скалярным произведением [14]. Поэтому в нашем случае можно говорить лишь о некоторой квазипериодической зависимости.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ УРАВНЕНИЙ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ В НАУКЕ

С использованием уравнений квантовой механики даны объяснения следующим законам:

- законам динамики Исаака Ньютона (Isaac Newton);
- законам статических электрических полей Джеймса Клерка Максвелла (James Clerk Maxwell);
- законам электромагнитного поля;
- законам теплопроводности, развитыми Жаном-Батистом Жозефом Фурье (Jean-Baptiste Joseph Fourier), Максом Карлом Эрнстом Людвигом

Планком (Max Karl Ernst Ludwig Planck), Адрианом Фоккером (Adriaan Daniël Fokker), Андреем Николаевичем Колмогоровым и основанным на них законам стохастической диффузии;

- уравнению Эрвина Рудольфа Джексона Александра Шрёдингера (Erwin Rudolf Josef Alexander Schrödinger);
- соотношению Вернера Карла Гейзенберга (Werner Karl Heisenberg);
- вторичному квантованию Владимира Александровича Фока;
- и ряду других основополагающих законов современной теоретической физики [15].

Как известно, стационарное уравнение Шрёдингера $\hat{H}\psi = E\psi$ [15], где ψ – собственная волновая функция системы электронов и атомов, E – полная энергия рассматриваемой системы, \hat{H} – гамильтониан, определяемый выражением, $\hat{H} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \frac{\partial^2}{\partial r_i^2} - \frac{\hbar^2}{2M_j} \sum_j \frac{\partial^2}{\partial R_j^2} + \frac{1}{2} \sum_{j \neq n} \frac{Z_j Z_n e^2}{R_{jn}} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq k} \frac{e^2}{r_{ik}} - \sum_{i,j} \frac{Z_j e^2}{r_{ij}} \right\}$, в котором m и M соответственно массы электронов и ядер; r_i и R_j – радиус-векторы i -го электрона и j -го ядра; Z_j и Z_n – атомные номера ядер; R_{jn} , r_{ik} , r_{ij} – расстояния между соответствующими ядрами и электронами и с учетом пространственной части имеет вид:

$$\Delta\psi + (2m/\hbar^2)[E - U(r)]\psi = 0, \quad (1)$$

Полная волновая функция имеет вид:

$$\Psi(r,t) = \exp((-i/\hbar)Et)\psi(r) \quad (2)$$

АНАЛИЗ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ГРУПП СИММЕТРИИ В НАУКЕ

В разное время и при решении различных задач в науке применялись группа вращений, группа Галилея, группа Лоренца и группа Пуанкаре. Инвариантность (свойства величин оставаться неизменными при различных преобразованиях) относительно группы вращений позволила установить закон сохранения углового момента J [16]. В.А. Фок использовал группу $O(4)$ для определения состояний атома водорода [17]. Основной принцип классической механики – инвариантность законов механического движения относительно замены инерционных систем отсчетов, известный как принцип относительности Галилея, – сформулирован с использованием группы Галилея [18]. Группа Лоренца описывает симметрию пространства - времени без учета гравитации [19]. Группа Пуанкаре позволяет с использованием неприводимого унитарного представления описывать свойства частиц, а именно, значения массы m , спина s и

знака энергии при $m^2 > 0$. Представления об однородности и изотропии пространства - времени приводят к тому, что для любой замкнутой системы действие должно быть инвариантно относительно преобразований группы Пуанкаре. Это с учетом теоремы Нётер приводит к существованию 10 фундаментальных сохраняющихся величин: энергии, 3-х компонент импульса и 6-и компонент 4-момента [20].

Для определения состояний атома используются дискретные значения 4-х физических величин: главного квантового числа n , принимающего значения $n = 1, 2, 3, \dots$ и определяющего энергию электрона $E_n = -13.6 / n^2$ эВ); орбитального квантового числа l , принимающего значения ($l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$) и определяющего величину L орбитального момента количества движения электрона ($L = \hbar[l(l + 1)]^{1/2}$); магнитного квантового числа m , имеющего значения ($m < \pm l$) и определяющего направление вектора орбитального момента; и квантового числа m_s , имеющего два значения ($m_s = \pm 1/2$) и определяющего направление вектора спина электрона [12, 13].

Известны четыре вида взаимодействий – гравитационное, электромагнитное, слабое и сильное. Сильное взаимодействие элементарных частиц, рассмотренное на примере октета барионов, является первым семейством элементарных частиц, описанным Гелл-Маном и Нейманом с помощью группы симметрии $SU(3)$ [21 – 23]. По данным 1961 г. экспериментально было обнаружено девять частиц. В работах [21 – 23] рассматривается 10 частиц, при этом для десятой гипотетической частицы предсказаны ее параметры. Десятая гипотетическая частица является синглетом, т.е. не имеет «изотопически родственных частиц», и ее заряд равен (-1) . В 1964 г. эта частица была экспериментально обнаружена, и ее свойства соответствовали предсказанным. Эта частица обозначается символом Ω^- и представляет собой барион со странностью -3 и изотопическим спином 0. Частица Ω^- состоит из трёх s -кварков. Успешное использование теории линейных представлений групп Ли при классификации элементарных частиц позволяют предположить и перспективность использования такого подхода при поиске теоретического обоснования закономерностей Периодической системы элементов.

Поиски групп симметрии для классификации элементов начались в 70-х годах XIX века. В 1971 г. Ю.Б. Румер и А.И. Фет использовали

группу $SO(4)$ для описания Периодической системы элементов [24]. В 1972 г. конформная группа $SO(4,2)$ была независимо предложена для описания элементов А.О. Барутом [25] и О.А. Новаро, М. Баррондо [26]. В этом же году Б.Г. Конопельченко [27] применил группу $SO(4,2)$ в качестве группы симметрии для описания Периодической системы элементов, Г.В. Жувикин и Р. Гефферлин также использовали группу $SO(4,2)$ [28]. И.А. Малкиным и В.И. Манько такой подход был впервые применен к атому водорода [29], при этом группой, содержащей $SO(4)$, оказалась так называемая конформная группа, или $SO(4,2)$ группа.

В работе [24] для построения Периодической системы элементов вводятся новые квантовые числа ($\nu, \delta, \lambda, \iota_\lambda, \alpha$) и на их основе строится новое лексикографическое правило описания электронных конфигураций атомов элементов, практически не отличающееся от правила Маделунга-Клечковского. В работе [24] утверждается следующее: «...в принципе невозможно описывать многоэлектронные атомы по образцу атома водорода «водородными» квантовыми числами n, l, m, m_s . Вместо многоэлектронного атома мы имеем дело с его неадекватной боровской моделью образца 1921 года, которая без каких-либо оснований выдается за истинное устройство атома...». Авторами данной статьи не разделяется приведенная точка зрения, и такой подход не используется.

Группа $SO(4,2)$ конформных сохраняющих углы преобразований пространства Минковского – это 15-параметрическая группа непрерывных ортогональных преобразований с детерминантом, равным единице, оставляющих инвариантными «квадраты расстояния» в шестимерном пространстве: $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2 - x_5^2 - x_6^2$. В работах [28 – 35] показано, что группа $SO(4,2)$ является группой динамической симметрии изовалентных водороду квантовых систем. Это позволяет утверждать, что все решения уравнения Шрёдингера для водородоподобного атома, принадлежащие дискретному спектру, должны переходить друг в друга под действием генераторов этой группы.

Точное описание электронного строения атомных систем из «первых принципов» с использованием уравнения Шрёдингера даже для сравнительно простых случаев является практически неразрешимой задачей, несмотря на достижения современной вычислительной техники. Поэтому в исследованиях [30 – 36] волновая функция определяется по волновому уравнению Шрёдингера в рамках одноэлектронного приближения Хартри-

Фока, при этом учитывается, что численные решения уравнения Шредингера в приближении Хартри-Фока оставляют открытой проблему систематизации одноэлектронных состояний. Если же предположить, что численное решение уравнения Шредингера с достаточно высокой точностью удастся найти, то это решение будет являться принципиально ограниченным в приложении к анализу реальных физических систем. Это обусловлено следующими причинами: а) численные решения не позволяют исследовать свойства физических систем в широком диапазоне параметров, б) численные решения не позволяют выявлять в различных внешних условиях качественные закономерности реальных физических систем.

При обсуждении строения атомов обычно используются представления модели независимых частиц [18, 38]. В соответствии с правилом Паули при классификации элементов для них указываются значения главного n и орбитального l квантовых чисел, где $2l + 1$ – число проекций орбитального момента на заданное направление, удвоение $2(2l + 1)$ обусловлено числом возможных ориентаций спина электрона.

Энергии этих электронов при сферической симметрии самосогласованного поля будут одинаковыми, вследствие чего $2l + 1$ клеток в предлагаемой Периодической системе элементов располагаются на одном уровне и указывают атомный номер элемента Z и равное номеру элемента количество электронов. Расположение элемента определяется занятостью электронами последнего и всех предшествующих состояний, стрелками « \uparrow и \downarrow » указывается ориентация спина. Электронные оболочки элементов разделяются горизонтальными линиями, а расположение на разной высоте электронных состояний элементов обусловлено различием в энергиях этих состояний. Атомы, размещенные в одном вертикальном столбце, обладают подобными химическими свойствами. Например, атомы, размещенные в столбцах для элементов: ${}_{10}\text{Ne}$, ${}_{18}\text{Ar}$, ${}_{36}\text{Kr}$, ${}_{54}\text{Xe}$, ${}_{86}\text{Rn}$ – инертные газы; для элементов: ${}_{3}\text{Li}$, ${}_{11}\text{Na}$, ${}_{19}\text{K}$, ${}_{37}\text{Rb}$, ${}_{55}\text{Cs}$, ${}_{87}\text{Fr}$ – щелочные металлы; для элементов: ${}_{29}\text{Cu}$, ${}_{47}\text{Ag}$, ${}_{79}\text{Au}$ – благородные металлы; и т.д.

Наборы состояний водородоподобной системы, т.е. представления группы $SO(4,2)$, и наборы состояний электронных оболочек атомов, приведенные во всех вариантах Периодической системы элементов, – это наборы, между которыми можно установить некоторое соответствие. Соответствие можно улучшить с помощью правила Ма-

делунга-Клечковского [37, 38], если произвести реорганизацию мультиплетов, на которые расщепляется представление группы $SO(4,2)$, исключив группу $O(4)$ из списка подгрупп этой группы [30–36]. Однако полного совпадения количества и состава мультиплетов, образующих электронную оболочку, с экспериментальными результатами не получилось, потому что в такой таблице имеются два периода, содержащие два элемента с электронной структурой $1s$ в первом периоде и два элемента с электронной структурой $2s$ во втором периоде. Отказ от использования при классификации состояний квантовых чисел, относящихся к одному электрону, и переход на формальную точку зрения с оставлением проблемы интерпретации квантовых чисел будущему, не устранил уже упоминавшегося удвоения первого периода. Одна из основных причин, объясняющая эти особенности, заключается в том, что у эмпирических правил, с помощью которых изменялось представление группы $SO(4,2)$, нет теоретического обоснования и, более того, его не может быть потому, что квантовое число n является собственным значением одного из генераторов группы $SO(4,2)$, а квантовое число l и сумма чисел $n+l$ не могут быть собственными значениями каких-либо эрмитовых операторов потому, что число l используется только при определении собственных значений оператора квадрата орбитального момента $l(l+1)$.

РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА В РАМКАХ ОДНОЭЛЕКТРОННОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ ХАРТРИ-ФОКА

При обсуждении закономерностей симметрии Периодической системы элементов, классификации электронных состояний и их отношений к представлениям группы динамической симметрии водородоподобного атома не рассматривались волновые функции, какими в рамках модели независимых частиц описываются электроны в атомах. В многоэлектронном атоме движение электрона происходит не только в кулоновском поле ядра, но и в поле остальных электронов. В результате энергия электрона определяется не только главным квантовым числом n , но и орбитальным l , что и объясняет структуру Периодической системы элементов.

Для определения явного вида наиболее оптимальной волновой функции в модели независимых частиц необходимо найти решение уравнения Шредингера. При решении уравнения Шредингера для рассматриваемых атомов используется одноэлектронное приближение Хартри-Фока. В при-

ближении Хартри-Фока волновые функции электрона в многоэлектронном атоме значительно отличаются от водородоподобных волновых функций, а, следовательно, состояния, принадлежащие представлению группы $SO(4,2)$, могут и не иметь отношения к состояниям электронов в атомах, отличных от атома водорода [39]:

$$\langle r^k \rangle = \int_0^\infty dr r^{k+2} |R_{nl}(r)|^2. \quad (3)$$

В этой важной проблеме такое заключение оказывается не соответствующим действительности. В работах М. Крегара [40, 41] при рассмотрении эффективных зарядов $Z_{\text{эфф}}$ электронных состояний в 55Cs^+ показано, что «водородоподобные» волновые функции являются удивительно хорошим приближением к волновым функциям метода Хартри-Фока. Этот вывод основан на вычислении эффективных зарядов для поля, действующего на электрон, из значений моментов волновых функций Хартри-Фока и показано, что моменты водородоподобных радиальных волновых функций определяются эффективным зарядом данного состояния, табл. 1 [41, 42].

Эффективные заряды $Z_{\text{эфф}}$ однозначно определяются моментами $a)$, $b)$, $c)$, $d)$:

$$\begin{aligned} a) Z_{\text{эфф}} &= n\sqrt{5n^2 + 1 - 3l(l+1)/2} \langle r^2 \rangle; \\ b) Z_{\text{эфф}} &= 3n^2 - l(l+1)/2 \langle r \rangle; \\ c) Z_{\text{эфф}} &= n^2 \langle 1/r \rangle; \\ d) Z_{\text{эфф}} &= n\sqrt{(l+1/2) \langle 1/r^2 \rangle} \end{aligned} \quad (4)$$

Если волновые функции Хартри-Фока действительно хорошо представляются водородоподобными волновыми функциями, то вычисленные через моменты одной и той же волновой функции Хартри-Фока эффективные заряды $Z_{\text{эфф}}$ ($a)$ -($d)$ не должны сильно отличаться. Это подтверждается для различных s -, p - и d - состояний атомов 55Cs^+ , табл. 1 [40, 41].

Для теоретического обоснования Периодической системы элементов необходимо изменить характер вырождения собственных значений одноэлектронного гамильтониана водородоподобной системы, но: без изменения его собственных функций, с сохранением близости эффективных

зарядов почти вырожденных состояний и с использованием группы $SO(4,2)$ в качестве группы динамической симметрии.

Таблица 1

Эффективные заряды электронных состояний в 55Cs^+ [40, 41]

$Z_{\text{эфф}}$	(a) (r^{-2})	(б) (r^{-1})	(в) (r^{-1})	(г) (r^{-2})	($Z_{\text{эфф}}$ средние значения)
Z_{1s}	54,2	54,30	54,47	54,55	54,38±0,10
Z_{2s}	50,4	50,60	50,22	50,58	50,56±0,10
Z_{2p}	49,1	49,49	50,15	50,51	49,83±0,40
Z_{3s}	43,2	43,42	41,70	42,13	42,62±0,75
Z_{3p}	41,2	41,36	40,97	42,02	41,05±0,16
Z_{3d7}	37,8	38,44	39,73	40,45	39,12±0,60
Z_{4s9}	33,1	33,20	30,45	30,31	31,79±1,3
Z_{4p2}	30,6	30,62	28,87	29,91	30,00±0,06
Z_{4d8}	25,0	25,26	25,25	26,74	25,33±0,20
Z_{5s5}	20,3	20,39	17,48	16,13	18,58 ±1,8
Z_{5p1}	17,3	17,37	15,21	15,12	16,25±1,0

Решение этой проблемы требует ввода в гамильтониан члена, выражающегося через операторы группы $SO(4,2)$ и нарушающего симметрию относительно преобразований из подгруппы $O(4)$ этой группы. Для этого достаточно включить в гамильтониан член, содержащий оператор квадрата орбитального момента, т.е. сделать допущение, что состояния электронов в многоэлектронных атомах моделируется уравнением

$$(\omega/2)(2 + N + 2f(\hat{I}^2)) |\psi\rangle = Z_{\text{эфф}} |\psi\rangle, \quad (5)$$

где $f(\hat{I}^2)$ – функция, максимально приближенная к

эмпирическому характеру вырождения одноэлектронных состояний в многоэлектронных атомах. Идея внесения в гамильтониан нарушающих симметрию членов доказала свою эффективность при классификации элементарных частиц [21–23].

Предлагаемый способ нарушения симметрии относительно преобразований из подгруппы $O(4)$ впервые указывает на возможность остаться в рамках представления группы динамической симметрии $SO(4,2)$, используя операторы Казимира подгрупп этой группы в качестве нарушающих симметрию операторов. Оператор Казимира является центральным элементом специального вида в

универсальной обертывающей алгебре при квантовомеханических расчетах с использованием групп симметрии С. Ли.

Представим уравнение 5 в обычных трёхмерных координатах и в результате получим для «физических состояний» уравнение в виде:

$$\{-(1/2)\Delta + (\omega/r)f(\hat{I}^2) - (Z_{\text{eff}}/r)\} \psi(r) = E\psi(r). \quad (6)$$

В этом уравнении необычная зависимость в члене $(\omega/r)f(\hat{I}^2)$ от r обусловлена тем, что вышеприведенное одночастичное уравнение получается обычно в предположении, заключающемся в том, что влияние поля ядра и влияние поля других электронов отображаются с помощью введения операторов одночастичных потенциалов $\varphi(r_i)$ в виде:

$$(-(1/2)\Delta_i + \varphi(r_i))\psi_i(r_i) = E_i\psi_i(r_i), \quad (7)$$

где i – номер электрона.

Для систем частиц с кулоновским взаимодействием имеет место тождество

$$W = \sum_i r_i F_i = U, \quad (8)$$

где U – полная потенциальная энергия системы:

$$U = -\sum_i Z/r_i + (1/2)\sum_{i \neq j} 1/|r_i - r_j| \quad (9)$$

и сила, действующая на i -й электрон, F_i :

$$F_i = -(\partial U/\partial r_i) = -(\partial \varphi_i/\partial r_i). \quad (10)$$

Вириал W выглядит формально как сумма одночастичных слагаемых [30] и даёт возможность

моделировать одночастичное уравнение Шредингера выражением

$$(-(1/2)\Delta_i + r_i F_i)\psi_i(r_i) = E_i\psi_i(r_i). \quad (11)$$

Сравнивая уравнения (7) и (11) в предположении, что сила определяется как:

$$F_i = -(\partial \varphi_i/\partial r_i), \quad (12)$$

получаем уравнение:

$$(-r_i(\partial \varphi_i/\partial r_i) = \varphi_i). \quad (13)$$

С учётом того, что оператор \hat{I}_i^2 коммутирует с оператором $r_i(\partial/\partial r_i)$, среди решений уравнений (13) имеются и решения вида:

$$\varphi_i = -(Z_{\text{eff}}/r_i) + (1/r_i)f(\hat{I}_i^2). \quad (14)$$

Из приведенных эффективных зарядов в уравнениях (4) следует, что линейные комбинации состояний в уравнении (14), отвечающие заданным значениям квадрата орбитального момента, по-прежнему являются собственными состояниями оператора $2 + N$ и, если собственное значение последнего равно $2n$, принадлежат энергии E :

$$E = -(Z_{\text{eff}}^2)/(2[n + f(l(l+1))]^2). \quad (15)$$

Согласно уравнению (15) энергии состояний определяются числами $n^*(n, l) = n + f(l(l+1))$, значения которых приведены в табл. 2. Значения этих чисел могут быть близкими для состояний со значениями чисел N и l .

Таблица 2

Состояния, принадлежащие последовательным значениям $n^*(n, l)$ при значениях $\Delta_d \ll 1, 0 \quad \Delta_f \ll 1$

№ п/п	n^* из $n^*(n, l) = n + f(l(l+1))$, $f(l(l+1)) = \alpha l(l+1) - \beta l^2(l+1)^2$, $\alpha = 1/6 + (1/12)(4\Delta_d - \Delta_f)$, $\beta = (1/72)(2\Delta_d - \Delta_f)$.	nl состояния	№ п/п	n^* из (5)	nl состояния
1.	1	1s	5.	$5,5 + \Delta_d$ $16/3 + (5\Delta_d - \Delta_f)/9$	5s, 4d 5p
2.	2 $7/3 + (5\Delta_d - \Delta_f)/9$	2s 2p	6.	$6,6 + \Delta_f, 6 + \Delta_d$ $19/3 + (5\Delta_d - \Delta_f)/9$	6s, 4f, 5d, 6p
3.	3 $10/3 + (5\Delta_d - \Delta_f)/9$	3s 3p	7.	$7,7 + \Delta_f, 7 + \Delta_d$ $22/3 + (5\Delta_d - \Delta_f)/9$	7s, 5f, 6d, 7p
4.	$4,4 + \Delta_d$ $13/3 + (5\Delta_d - \Delta_f)/9$	4s, 3d, 4p			

Если считать, что

$$f(l(l+1)) = \alpha l(l+1) - \beta l^2(l+1)^2, \quad (16)$$

где $\alpha = 1/6 + (1/12)(4\Delta_d - \Delta_f)$,

$\beta = (1/72)(2\Delta_d - \Delta_f)$, Δ_d и Δ_f – малые

числа, удовлетворяющие условиям $\Delta_d > \Delta_f > 0$, то данные табл. 2 показывают, какие состояния для этого случая являются почти вырожденными.

Если объединить эти состояния с ближайшими к ним по значениям чисел $n^*(n, l)$ p -состояниями и образовать оболочки, которые обозначены цифрами 1–7, табл. 2, то после сравнения их содержания с содержанием оболочек многоэлектронных атомов, обнаруживаем их полное соответствие между собой.

Таким образом, данные, приведенные в табл. 2, согласно уравнениям $n^*(n, l) = n + f(l(l+1))$ и $f(l(l+1)) = \alpha l(l+1) - \beta l^2(l+1)^2$, где $\alpha = 1/6 + (1/12)(4\Delta_d - \Delta_f)$, $\beta = (1/72)(2\Delta_d - \Delta_f)$ и содержание электронных оболочек в многоэлектронных атомах согласно современной Периодической системе элементов (табл. 3) по определенности состояний и значениям их энергий, находятся в полном соответствии между собой.

Отметим, что выделение по энергиям p – состояний, определенное из уравнения (15), также находится в соответствии с экспериментальными данными: при увеличении атомного номера p – состояния при наступлении их очереди закономерно заполняются. Далее будут рассмотрены эти закономерности.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВЗАИМОЗАВИСИМОСТЕЙ СОСТОЯНИЙ ВОДОРОДОПОДОБНЫХ АТОМОВ И ГРУППЫ $SO(4,2)$

В качестве математического дополнения к полученным результатам приведем формулировку задачи об изовалентной водороду квантовой системе, которая в компактном и явном виде демонстрирует все свойства симметрии этой системы. Рассмотрим уравнение Шредингера для изотропного гармонического осциллятора в двухмерном пространстве с комплексными координатами $\xi_s = (s = 1, 2)$, которые представляют собой компоненты спинора:

$$\hat{H}\psi = \left(-(1/2)(\partial^2/\partial\xi_s^*\partial\xi_s) + (1/2)\omega^2\xi_s^*\xi_s \right) \psi = K\psi \quad (17)$$

В этом уравнении звёздочка * обозначает операцию комплексного сопряжения, под дважды повторяющимся индексом подразумевается суммирование, ω – вещественное положительное число, K – собственное значение оператора. Из свойств симметрии данного уравнения, помимо тех, что заключены в определении (ξ_s – двухкомпонентный спинор), отметим существенную для дальнейшего инвариантность относительно преобразований

$$\xi_s \rightarrow \xi_s e^{i\varphi} \text{ и } \xi_s^* \rightarrow \xi_s^* e^{-i\varphi}, \quad (18)$$

следствием которой, является равенство нулю коммутатора оператора \hat{H} с оператором

$$Q = \xi_s^* \partial/\partial\xi_s^* - \xi_s \partial/\partial\xi_s \quad (19)$$

Введем новые переменные:

$$x_\lambda = \xi_s^* (\sigma_\lambda)_{st} \xi_t \quad (\lambda = 1, 2, 3),$$

$$\chi = \arctg(\xi_1^*/\xi_1'), \quad (20)$$

где $(\sigma_\lambda)_{st}$ обозначают элементы матриц Паули

$$\sigma_\lambda, \xi_s' = \text{Re } \xi_s \text{ и } \xi_s'' = \text{Im } \xi_s, \quad (21)$$

где вследствие заданных свойств ξ_s вещественные числа, σ_λ являются

компонентами трехмерного вектора r . В этих переменных вышеприведенное уравнение (21) принимает вид:

$$-(1/2) \left[r\Delta - (1/r+x_3)\chi(\partial/\partial\chi) - x_3(\partial/\partial\chi) \partial/\partial\chi + (1/2)\chi(r+x_3)(\partial^2/\partial\chi^2) \right] \psi + (1/2)\chi(\omega^2 r\psi) = Z\psi, \quad (22)$$

где $r = |r|$, Δ – оператор Лапласа. К «физическим решениям» этого уравнения относятся только те решения, которые не зависят от χ , и принадлежат нулевому собственному значению оператора Q . Оператор Q имеет в переменных уравнения (22) вид

$$Q = i(\partial/\partial\chi). \quad (23)$$

Согласно уравнению (22), эти «физические решения» являются решениями трёхмерного уравнения Шредингера для частицы, движущейся в кулоновском поле ядра с зарядом Z и энергией $E = -(1/2)(\omega^2)$. Здесь используются атомные единицы: масса частицы, ее заряд и постоянная Планка \hbar приняты за единицы измерения.

Устанавливаемая таким образом связь между уравнением Шредингера, описывающим водородоподобный атом, и уравнением Шредингера для изотропного гармонического осциллятора в двухмерном комплексном пространстве, позволяет придать решениям этих уравнений простую алгебраическую форму, делающую очевидными свойства их симметрии. Будем считать, что скалярное произведение волновых функций в ξ – пространстве определяется соотношением

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int d^4\xi \phi^*(\xi_1^*, \xi_2^*, \xi_1, \xi_2) \psi(\xi_1^*, \xi_2^*, \xi_1, \xi_2), \quad (24)$$

где $d^4\xi = d\xi_1^* d\xi_1 d\xi_2^* d\xi_2$.

Введем операторы $a_s = \sqrt{\omega/2}(\xi_s + (1/\omega)(\partial/\partial\xi_s^*))$, и $b_s = \sqrt{\omega/2}(\xi_s^* + (1/\omega)(\partial/\partial\xi_s))$ и эрмитово-сопряженные с ними относительно скалярного произведения (24) операторы $a_s^+ = \sqrt{\omega/2}(\xi_s^* - (1/\omega)(\partial/\partial\xi_s))$, $b_s^+ = \sqrt{\omega/2}(\xi_s - (1/\omega)(\partial/\partial\xi_s^*))$.

Эти операторы удовлетворяют перестановочным соотношениям $[a_s, a_t^+] = \delta_{st}$, $[b_s, b_t^+] = \delta_{st}$ (не равные нулю коммутаторы опущены).

Выражая операторы, входящие в уравнение 3, с помощью операторов $a_s = \sqrt{\omega/2}(\xi_s + (1/\omega)(\partial/\partial\xi_s^*))$, $b_s = \sqrt{\omega/2}(\xi_s^* + (1/\omega)(\partial/\partial\xi_s))$ и $a_s^+ = \sqrt{\omega/2}(\xi_s^* - (1/\omega)(\partial/\partial\xi_s^*))$, $b_s^+ = \sqrt{\omega/2}(\xi_s - (1/\omega)(\partial/\partial\xi_s^*))$, получаем уравнение

$$(\omega/2)(2 + a_s^+ a_s + b_s^+ b_s) |\psi\rangle = Z |\psi\rangle. \quad (25)$$

Определяя состояния «вакуума» уравнениями $a_s |0\rangle = b_s |0\rangle = 0$ и используя перестановочные соотношения $[a_s, a_t^+] = \delta_{st}$, $[b_s, b_t^+] = \delta_{st}$, убеждаемся в том, что одночлены $|n_1^a n_1^b n_2^a n_2^b\rangle = (a_1^+)^{n_1^a} (b_1^+)^{n_1^b} (a_2^+)^{n_2^a} (b_2^+)^{n_2^b} |0\rangle$, где $n_1^a, n_1^b, n_2^a, n_2^b$ – неотрицательные целые числа, которые являются собственными векторами взаимно коммутирующих операторов $a_1^+ a_1, b_1^+ b_1, a_2^+ a_2, b_2^+ b_2$, принадлежат соответственно собственным значениям $n_1^a, n_1^b, n_2^a, n_2^b$. Отсюда следует, что состояния $|n_1^a n_1^b n_2^a n_2^b\rangle = (a_1^+)^{n_1^a} (b_1^+)^{n_1^b} (a_2^+)^{n_2^a} (b_2^+)^{n_2^b} |0\rangle$ будут решениями уравнения (25), если установить, что $\omega = 2Z/(2 + n_1^a + n_1^b + n_2^a + n_2^b)$. Тогда из уравнения для энергии (24) следует, что энергия E равна:

$$E = -2Z^2/(2 + n_1^a + n_1^b + n_2^a + n_2^b)^2. \quad (26)$$

«Физические решения» отбираются условием равенства нулю собственного значения интеграла движения Q , который с использованием операторов $a_s = \sqrt{\omega/2}(\xi_s + (1/\omega)(\partial/\partial\xi_s^*))$, $b_s = \sqrt{\omega/2}(\xi_s^* + (1/\omega)(\partial/\partial\xi_s))$ и $a_s^+ = \sqrt{\omega/2}(\xi_s^* - (1/\omega)(\partial/\partial\xi_s^*))$, $b_s^+ = \sqrt{\omega/2}(\xi_s - (1/\omega)(\partial/\partial\xi_s^*))$, выражается следующим образом:

$$Q = a_s^+ a_s - b_s^+ b_s. \quad (27)$$

Это значит, что значения чисел $n_1^a, n_1^b, n_2^a, n_2^b$, которые удовлетворяют условию $n_1^a + n_2^a = n_1^b + n_2^b$, являются «физическими значениями». Определяя операторы $m_\lambda = (\sigma_\lambda)_{st} a_t b_s$, и $m_\lambda^+ = (\sigma_\lambda)_{st} a_s^+ b_t^+$; $n_\lambda^a = (\sigma_\lambda)_{st} a_s^+ a_t$ и $n_\lambda^b = (\sigma_\lambda)_{st} b_t^+ b_s$; $M = a_s b_s$, и $M^+ = a_s^+ b_s^+$; $2 + N = 2 + a_s^+ a_s + b_s^+ b_s$, коммутирующие с оператором Q , и, используя перестановочные соотношения $[a_s, a_t^+] = \delta_{st}$, $[b_s, b_t^+] = \delta_{st}$, приходим к заключению, что эти пятнадцать операторов образуют замкнутую алгебру, изоморфную алгебре Ли группы $SO(4,2)$ [38].

Под действием операторов $m_\lambda = (\sigma_\lambda)_{st} a_t b_s$,

и $m_\lambda^+ = (\sigma_\lambda)_{st} a_s^+ b_t^+$; $n_\lambda^a = (\sigma_\lambda)_{st} a_s^+ a_t$ и $n_\lambda^b = (\sigma_\lambda)_{st} b_t^+ b_s$; $M = a_s b_s$, и $M^+ = a_s^+ b_s^+$; $2 + N = 2 + a_s^+ a_s + b_s^+ b_s$ состояния $|n_1^a n_1^b n_2^a n_2^b\rangle = (a_1^+)^{n_1^a} (b_1^+)^{n_1^b} (a_2^+)^{n_2^a} (b_2^+)^{n_2^b} |0\rangle$, удовлетворяющие условию $n_1^a + n_2^a = n_1^b + n_2^b$, переходят друг в друга, образуя бесконечномерное унитарное представление $SO(4,2)$.

Связь состояний

$|n_1^a n_1^b n_2^a n_2^b\rangle = (a_1^+)^{n_1^a} (b_1^+)^{n_1^b} (a_2^+)^{n_2^a} (b_2^+)^{n_2^b} |0\rangle$ с принятой в спектроскопии классификацией состояний водородоподобного атома устанавливается следующим образом.

Значения энергии определяются главным квантовым числом n :

$$n = 1 + n_1^a + n_2^a = 1 + n_1^b + n_2^b. \quad (28)$$

Число n может принимать значения 1, 2, 3, ... С увеличением n энергия увеличивается. Заданному значению орбитального момента принадлежат состояния: $l=0: (M^+)^k |0\rangle$, $k=0, 1, 2, \dots$,

$l=1: m_\lambda^+ (M^+)^k |0\rangle$, $\lambda=1, 2, 3$, $k=0, 1, 2, \dots$, которые являются линейными комбинациями состояний $a_s |0\rangle = b_s |0\rangle = 0$. (нормировочные множители не указаны). Операторами проекций орбитального момента в рассматриваемом представлении являются операторы $l_\lambda = (n_\lambda^a - n_\lambda^b)/2$ квантового числа l , которое при заданном n определяется как $l=0, 1, \dots, n-1$. Обычно значения орбитального квантового числа $l: l=0, 1, 2, 3, 4$ обозначаются буквами: s, p, d, f, g . Далее, подводя итоги обсуждению связей состояний водородоподобного атома с представлением группы $SO(4,2)$, будут рассмотрены эти закономерности.

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ПОСТРОЕНИЕ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ ЭЛЕМЕНТОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ БЕСКОНЕЧНОМЕРНОГО УНИТАРНОГО ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ГРУППЫ $SO(4,2)$

Подводя итог обсуждению связи состояний водородоподобного атома с представлением группы $SO(4,2)$, являющейся группой динамической симметрии водородоподобных атомов, приведём табл. 3, на которой изображено это представление с указанием доступных для атома состояний с учётом спина электрона [36].

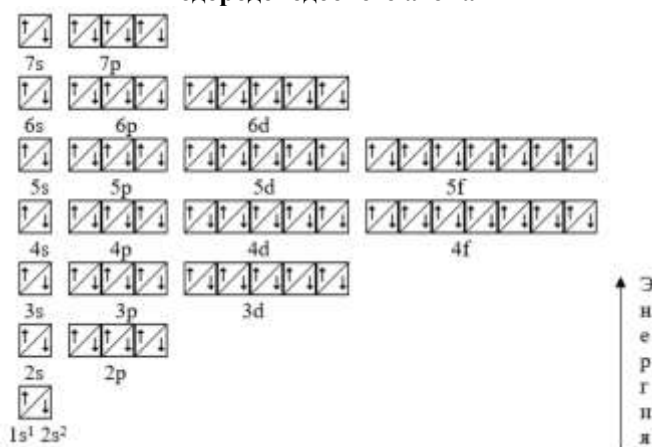
Табл. 3 демонстрирует еще одну особенность водородоподобной системы – набор ее состояний расщеплен на мультиплеты, принадлежащие заданной энергии.

Эти мультиплеты – конечномерные представления группы $O(4)$, являющейся подгруппой группы $SO(4,2)$ и группой симметрии уравнения Шредингера. Наличие такой симметрии очевидно при представлении состояний электронов в атомах, отличных от атома водорода в виде (3) [38]

$$\langle r^k \rangle = \int_0^\infty dr r^{k+2} |R_{nl}(r)|^2.$$

Таблица 3

Теоретически построенная Периодическая система элементов с использованием бесконечномерного унитарного представление группы $SO(4,2)$ – группы динамической симметрии водородоподобного атома



С использованием динамического обоснования осуществлено расщепление бесконечномерного унитарного представления группы $SO(4,2)$ на конечномерные мультиплеты, определяющиеся квантовыми числами, описывающими состояния электронов.

Табл. 3 является результатом построения с использованием бесконечномерного унитарного представления группы динамической симметрии водородоподобного атома $SO(4,2)$ конечномерных мультиплетов, определяющихся квантовыми числами, описывающими состояния электронов.

В результате достигнута основная цель, заключающаяся в научно обоснованном использовании группы симметрии $SO(4,2)$ с применением динамического правила для теоретического обоснования свойств симметрии Периодической системы элементов.

В отличие от Периодической системы элементов, построенной с использованием лексикографического упорядочения энергетических уровней электронных оболочек элементов по правилам Маделунга-Клечковского [37, 38] в табл. 3 отсутствуют два периода, содержащие два элемента с электронной структурой $1s$ в первом периоде и два элемента с электронной структурой $2s$ во втором периоде.

Современная Периодическая система элементов показана в табл. 4.

Таблица 4

Одно из современных представлений Периодической системы элементов

1 H																2 He	
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
55 Cs	56 Ba	*	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
87 Fr	88 Ra	*	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Ch	113 Nh	114 Fl	115 Mc	116 Lv	117 Ts	118 Og

*57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
*89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

Современная Периодическая система элементов (табл. 4) приведена с целью ее сравнения с теоретически построенной Периодической системой элементов, табл. 3. Критерии совпадения теоретически построенной Периодической системы элементов с использованием группы динамической симметрии изовалентной водороду квантовой системы $SO(4,2)$ не являются случайными и могут эффективно использоваться при введении однопараметрического нарушения симметрии относительно подгруппы $O(4)$. Это позволяет сформировать мультиплеты, приведенные в табл. 3, содержание которых находится в полном соответствии с экспериментально наблюдаемым содержанием электронных оболочек всех атомов Периодической системы элементов, табл. 4.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Руководствуясь чрезвычайно большими успехами использования в математике и физике методов теории линейных представлений групп Ли при классификации элементарных частиц, можно предположить и перспективность их применения при поиске теоретического обоснования Периодического закона.

Предложено динамическое обоснование использованию представлений группы динамической симметрии изовалентной водороду квантовой системы $SO(4,2)$ для теоретического описания свойств симметрии Периодической системы элементов.

С использованием динамического обоснования осуществлено расщепление бесконечномерного унитарного представления группы $SO(4,2)$ на конечномерные мультиплеты, определяющиеся квантовыми числами, описывающими состояния электронов.

Показано, что критерии совпадения группы симметрии Периодической системы элементов и

группы $SO(4,2)$ динамической симметрии изовалентной водороду квантовой системы не являются случайными и могут эффективно использоваться при введении однопараметрического нарушения симметрии относительно подгруппы $O(4)$, что позволяет установить порядок заполнения электронных оболочек элементов в полном соответствии с экспериментальными результатами, обобщенными во всех известных вариантах Периодической системы элементов.

Подходы, применяемые для построения Периодической системы элементов различными учеными, в том числе и работа [32], рассматриваются в монографии [43]. Однако содержание статьи [32] не анализируется и то, что теоретическое построение Периодической системы элементов осуществлено строго в рамках современных представлений квантовой механики с использованием бесконечномерного унитарного представления группы $SO(4,2)$, являющейся группой динамической симметрии водородоподобных атомов, не приводится. В работе [32] показано, что критерии совпадения группы симметрии Периодической системы элементов и группы $SO(4,2)$ динамической симметрии изовалентной водороду квантовой системы не являются случайными и эффективно использованы при введении однопараметрического нарушения симметрии относительно подгруппы $O(4)$, что позволило установить порядок заполнения электронных оболочек элементов в полном соответствии с экспериментальными результатами, обобщенными во всех известных вариантах Периодической системы элементов.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов, требующего раскрытия в данной статье.

The authors declare the absence a conflict of interest warranting disclosure in this article.

ЛИТЕРАТУРА

1. Вейль Г. Симметрия. М.: Наука. 1968 г. 192 с.
2. Артамонов В.А., Словохотов Ю.Л. Группы и их приложения в физике, химии, кристаллографии: Учебное пособие для студентов высших учебных заведений. М.: Издательский центр «Академия» 2005. 512 с.
3. Понтрягин Л.С. Непрерывные группы. М.: УРСС. 2004. 520 с.
4. Шубников А.В., Копцик В.А. Симметрия в науке и искусстве. М.: Наука. 1972. 340 с.
5. Деньгуб В.М., Смирнов В.Г. Единицы величин. Словарь-справочник. – М.: Издательство стандартов. 1990. 240 с.
6. Биографии великих химиков. Перевод с нем. под редакцией Быкова Г.В. М.: Мир. 1981. 320 с.

REFERENCES

1. Weyl H. Symmetry. Moskva.: Nauka. 1968. 192 p. (in Russian).
2. Artamonov V.A., Slovokhotov Ju. L. Groups and their applications in physics, chemistry and crystallography: Textbook for students of higher educational institutions. Moskva: Publishing Center «Academija». 2005. 512 p. (in Russian).
3. Pontrjagin L.S. Continuous groups. Moskva. URSS. 2004. 520 p. (in Russian).
4. Shubnikov A.V., Koptsik V.A. Symmetry in science and in art. Moskva: Nauka. 1972. 340 p. (In Russian).
5. Den'gub V.M., Smirnov V.G. Units of values. Dictionary-reference. Moskva: Publishing House of standards. 1990. 240 p. (In Russian).

7. Менделеев Д.И. Основы химии. М.-Л.: Государственное научно-техническое изд-во химической литературы. В 2-х томах. 13-е издание. 1947. Т. 1. 624 с. Т. 2. 708 с.
8. Меншуткин Н.А. (от имени Д.И. Менделеева). Соотношение свойств с атомным весом элементов. Журнал Русского химического общества. 1869. Т. 1. С. 60–77.
9. Менделеев Д.И. Периодический закон. Ред., статья и примечания Б.М. Кедрова. М.: Изд-во Акад. наук СССР. 1958. 831с.
10. Eric R. Scerri. The Periodic Table—Its Story and its Significance. Oxford: Oxford University Press. 2007. 346 p.
11. Фигуровский Н.А. Открытие элементов и происхождение их названий. М.: Наука. 1970. 207 с.
12. Bohr N. Atomic Theory and the Description of Nature. Cambridge: Cambridge University Press. 1934. 120 p.
13. Зоммерфельд А. Строение атомов и спектры. В 2-х томах. М.: Гостехиздат, 1956. Т. 1. 593 с; Т. 2. 694 с.
14. Левитан Б.М. Почти периодические функции. М.: Государственное издательство технико-теоретической литературы. 1953. 396 с.
15. Давыдов А.С. Квантовая механика: учебное пособие. 3 изд., стереотипное. СПб.: БХВ-Петербург. 2011. 704 с.
16. Петрашень М.И., Трифонов Е.Д. Применение теории групп в квантовой механике. М.: Наука. 1967. 308 с.
17. Фок В.А. Атом водорода и неевклидова геометрия. Изв. АН СССР. Сер. VII. Отделение математических и естественных наук. 1935. № 2. С. 169–179.
18. Фок В.А. Теория пространства, времени и тяготения. Издание 2-е, дополненное. М.: Гос. изд. физ.-мат. лит., 1961. 568 с.
19. Федоров Ф.И. Группа Лоренца. М.: Наука. 1979. 384 с.
20. Эллиот Дж., Добер П. Симметрия в физике. В 2-х томах. М.: Мир, 1983. Т.1 368 с, Т.2. 410 с.
21. Gell-Mann M. The Eightfold Way: A Theory of Strong Interaction Symmetry. Report No. CTSL 20. California Institute of Technology. March 15. 1961.
22. Néeman Y. Derivation of Strong Interactions from a Gauge Invariance. Nucl. Phys. 1961. V. 26. N 2. P. 222–229.
23. Gell-Mann M. Symmetries of Barions and Mesons. Phys. Rev. 1962. V. 125. N 3. P. 1067–1084.
24. Фет А.И. Группа симметрии химических элементов. Новосибирск: «Наука». 2010. 238 с.
25. Barut A. O. Group Structure of the Periodic System. Structure of Matter, Rutherford Centennial Symposium. New Zealand. 1972. P. 169–179.
26. Novaro O.A., Barrondo M. Approximate Symmetry of the Periodic Table. Journal Phys. B. 1972. V. 5. N 6. P. 1104–1110.
27. Конопельченко Б. Г. Группа $SO(2,4)+R$ и таблица Менделеева. СО АН СССР. Институт ядерной физики. Препринт. Новосибирск. 1972.
28. Zhuvikin G.V., Hefferlin R. Symmetry principles for periodic systems of molecules. JR-PHYS-SC/SPBU 1 (Joint Report №1 of the Physics Departments Southern College, Colledate, USA, St. Petersburg University, St. Peterburg, Russia). 1994.
29. Малкин И.А., Манько В.И. Динамические симметрии и когерентные состояния квантовых систем. М.: Наука. 1979. 320 с.
30. Гурский Л.И., Комаров Л.И. Вирял в статистической модели атома. Доклады АН Беларуси. 1997. Т. 41. № 4. С. 49–52.
31. Гурский Л.И., Комаров Л.И., Солодухин А.М. Группа симметрии периодической системы химических элементов Д.И.Менделеева. Известия НАН Беларуси. Сер. физ.-мат.наук. 1998. № 2. С. 58–65.
6. Biografii velikikh khimikov. Transl. From German. Ed. by G.V.Bykov. Moskva: Mir. 1981. 320 p. (in Russian).
7. Mendeleev D.I. Osnovy khimii. Moskva-Leningrad: Gosudarstvennoe nauchno-technicheskoe izd-vo khimicheskoy literatury. In 2 Volumes. 13th ed. 1947. V. 1. 624 p., V.2. 708 p. (in Russian).
8. Menshutkin N. A. (ot imeni D.I. Mendeleeva). Sootnoshenie svojstv s atomnym vesom elementov. Jumal Russkogo khimicheskogo obschestva. 1869. V. 1. P. 60–77. (in Russian).
9. Mendeleev D.I. Periodicheskij Zakon. Redakcija, stat'ja i promechanija B.M. Kedrova. Moskva: Publishing House of Acad. Sci. Of USSR. 1958. 831 p. (in Russian).
10. Eric R. Scerri. The Periodic Table—Its Story and its Significance. Oxford: Oxford University Press. 2007. 346 p.
11. Figurovskij N.A. Otkrytie elementov I proiskhozhdenie ikh nazvanij. Moskva: Nauka. 1970. 207 p. (in Russian).
12. Bohr N. Atomic Theory and the Description of Nature. Cambridge: Cambridge University Press. 1934. 120 p.
13. Sommerfeld A. Stroenie atomov i spectry. In 2 Volumes. Moskva: Gostekhizdat, 1956. V. 1. 593 p., V.2. 694 p. (in Russian).
14. Levitan B.M. Pochti periodicheskie funkicii. Moskva: Gosudarstvennoe izdatel'stvo tekhniko-teoreticheskoy literatury, 1953. 396 p. (in Russian).
15. Davydov A.S. Kvantovaja mekhanika: textbook. 3rd edition. St. Peterburg: BHW-Peterburg. 2011. 704 p. (in Russian).
16. Petrashen' M.I., Trifonov E.D. Primenenie teorii grupp v kvantovoj mekhanike. Moskva: Nauka. 1967. 308 p. (in Russian).
17. Fok V.A. Atom vodoroda I neevklidova geometrija. Izvestija Acad. Sci. of USSR. Ser. VII. Otdelenije matematicheskikh i estestvennykh nauk. 1935. N 2. P. 169–179. (in Russian).
18. Fok V.A. Teorija prostranstva, vremeni i tjagotenija. 2nd edition. Moskva: Gosudarstvennoe izd-vo fiz.-mat. Literatury. 1961. 568 p. (in Russian).
19. Fedorov F.I. Gruppa Lorentsa. Moskva: Nauka. 1979. 384 p. (in Russian).
20. Elliot J., Dober P. Simmetrija v fizike. In 2 Vols. Moskva: Mir. 1983. V. 1. 368 p. V. 2. 410 p. (in Russian).
21. Gell-Mann M. The Eightfold Way: A Theory of Strong Interaction Symmetry. Report No. CTSL 20. California Institute of Technology. March 15. 1961.
22. Néeman Y. Derivation of Strong Interactions from a Gauge Invariance. Nucl. Phys. 1961. V. 26. N 2. P.222–229.
23. Gell-Mann M. Symmetries of Barions and Mesons. Phys. Rev. 1962. V. 125. N. 3. P. 1067–1084.
24. Fet A.I. Gruppa simmetrii khimicheskikh elementov. Novosibirsk: «Nauka». 2010. 238 p. (in Russian).
25. Barut A.O. Group Structure of the Periodic System. Structure of Matter, Rutherford Centennial Symposium. New Zealand. 1972. P. 169–179.
26. Novaro O.A., Barrondo M. Approximate Symmetry of the Periodic Table. Journal Phys. B. 1972. V. 5. N 6. P. 1104–1110.
27. Konopelchenko B.G. Gruppa $S0(2,4) + R$ i tablica Mendeleeva. Siberian Branch of Acad. Sci. of USSR. Institute of nuclear physics. pre-print. Novosibirsk, 1972. (In Russian).
28. Zhuvikin G.V., Hefferlin R. Symmetry principles for periodic systems of molecules. JR-PHYS-SC/SPBU 1 (Joint Report №1 of the Physics Departments Southern College, Colledate, USA, St. Petersburg University, St. Peterburg, Russia). 1994.
29. Malkin I.A., Man'ko V.I. Dinamicheskie simmetrii i kogerentnye sostojanija kvantovykh system. Moskva: Nauka. 1979. 320 p. (in Russian).

32. *Gurskii L.I., Komarov L.I., Solodukhin A.M.* Group of Symmetry of the Periodic System of Chemical Elements. *International Journal of Quantum Chemistry*. 1999. V. 72. N 5. P. 499–508.
33. *Гурский Л.И.* Группа динамической симметрии изовалентных водороду квантовых систем и симметричные свойства многоэлектронных атомов. *Вестник Фонда фундаментальных исследований*. 2004. № 3 (29). С. 61–79.
34. *Гурский А.Л., Гурский Л.И.* Групповая классификация элементов и периодический закон Д.И. Менделеева. *Доклады БГУИР*. 2015. № 8 (94). С. 38–43.
35. *Гурский А.Л., Гурский Л.И.* Группа $SO(4,2)$ и симметричные свойства Периодической системы элементов Д.И. Менделеева. *Доклады БГУИР*. 2016. № 48(98). С. 73–79.
36. *Гурский А.Л., Гурский Л.И.* К 150-летию создания Периодической системы элементов. *Известия НАН Беларуси. Сер. физ.-мат. наук*. 2019. V. 55. №. 2. С. 242–254.
37. *Маделунг Э.* Математический аппарат физики. М.: Физматгиз. 1961. 620 с.
38. *Клечковский В.М.* Распределение атомных электронов и правило последовательного заполнения $(n + 1)$ - групп. М.: Атомиздат. 1968. 433 с.
39. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теоретическая физика. Т.5. Ч.1. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. 4 изд., М.: Наука. 1989. 768 с.
40. *Kregar M.* The Virial and the Independent Particle Models of the Atom. *Physica Scripta*. 1984. V. 29. N 5. P. 438–447.
41. *Kregar M.* The Virial as the Atomic Model Potential Energy Operator. *Physica Scripta*. 1985. V. 31. N 4. P. 246–254.
42. *Komarov L.I., Romanova T.S.* The algebraic method of solution of the Dirac equation for a particle in a Coulomb potential. *J.Phys.B: At.Mol.Phys*. 1985. V. 18. N 5. P. 859–865.
43. *Thyssen P., Ceulemans A.* Shattered Symmetry Group Theory from the Eightfold Way to the Periodic Table. New York: Oxford University Press. 2017. 511 p.
30. *Hurski L.I., Komarov L.I.* Virial v statisticheskoj model atoma. *Doklady AN Belarusi*. 1997. V.41. N 4. P. 49–52. (in Russian).
31. *Hurski L.I., Komarov L.I., Solodukhin A.M.* Gruppya simmetrii periodicheskoj sistemy khimicheskikh elementov D.I. Mendeleeva. *Izvestija NAN Belarusi. Ser. fiz.-mat. nauk*. 1998. N 2. P. 58–65. (In Russian).
32. *Gurskii L.I., Komarov L.I., Solodukhin A.M.* Group of Symmetry of the Periodic System of Chemical Elements. *International Journal of Quantum Chemistry*. 1999. V. 72. N 5. P. 499–508.
33. *Hurski L.I.* Gruppya dinamicheskoj simmetrii izovalentnykh vodorodu kvantovykh system i simmetrijnye svojstva mnogoelektronnykh atomov. *Vestnik fonda fundamental'nykh issledovanij*. 2004. N 3(29). P. 61–79. (in Russian).
34. *Gurskii A.L., Hurski L.I.* Gruppyovaja klassifikacija elementov I periodicheskij zakon D.I.Mendeleeva. *Doklady BSUIR*. 2015. N 8(94). P. 38–43. (in Russian).
35. *Gurskii A.L., Hurski L.I.* Gruppya $SO(4,2)$ i simmetrijnye svojstva Periodicheskoj sistemy elementov D.I.Mendeleeva. *Doklady BSUIR*. 2016. N 48(98). P. 73–79. (in Russian).
36. *Gurskii A.L., Hurski L.I.* To the 150th anniversary of the creation of the Periodic System of Elements. *Izvestija NAN Belarusi. Ser. fiz.-mat. Nauk*. 2019. V. 55. N 2. P. 242–254. (in Russian).
37. *Madelung E.* *Matematicheskij apparat fiziki*. Moskva: Fizmatgiz. 1961. 620 p. (in Russian)
38. *Klechkovskij V.M.* *Raspredelenie atomnykh elektronov I pravilo posledovatel'nogo zapolnenija (n + 1)- grupp*. Moskva: Atomizdat. 1968. 433 p. (in Russian).
39. *Landau L.D., Lifshits E.M.* *Teoreticheskaja fizika*. V. 5. part 2. *Kvantovaja mekhanika. Nereljativistskaja teorija*. 4th Ed. Moskva: Nauka. 1989. 768 p. (in Russian).
40. *Kregar M.* The Virial and the Independent Particle Models of the Atom. *Physica Scripta*. 1984. V. 29. N 5. P. 438–447.
41. *Kregar M.* The Virial as the Atomic Model Potential Energy Operator. *Physica Scripta*. 1985. V. 31. N 4. P. 246–254.
42. *Komarov L.I., Romanova T.S.* The algebraic method of solution of the Dirac equation for a particle in a Coulomb potential. *J.Phys.B: At.Mol.Phys*. 1985. V. 18. N 5. P.859–865.
43. *Thyssen P., Ceulemans A.* *Shattered Symmetry Group Theory from the Eightfold Way to the Periodic Table*. New York: Oxford University Press. 2017. 511 p.

*Поступила в редакцию 26.11.2021
Принята к опубликованию 27.12.2021*

*Received 26.11.2021
Accepted 27.12.2021*