

ОРБИТАЛЬНО-ГРУППОВАЯ ОБЪЁМНАЯ МАТРИЦА ПЕРИОДИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ ХИМИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ

Анатолий Алексеевич Сперанский,

Вице-президент Российской инженерной академии по науке, председатель Совета Генеральных конструкторов РИА, Президент Международного института антропогенной безопасности в Белграде, DExpert, профессор, академик РИА, МИА, ИАА

Татьяна Геннадьевна Сперанская,

Полномочный академический советник президента РИА, секретарь по персоналу Международного координационного комитета совместных научных исследований и делового сотрудничества Федерации системы Гражданского общества России

Химия и искусство имеют общность, которая коренится в их творческой природе.

Основоположник оргсинтеза П.Э. Бергло

АННОТАЦИЯ

Гениальное открытие Д.И. Менделеевым периодичности химических элементов, наравне с гениальным обобщением И. Ньютоном фундаментальных физических законов классической механики **состояний** и движения, заложили основы миропонимания материального микромира бытия, макромира Космоса и мегамира Вселенной.

В контексте нашего исследования, всеобщая взаимосвязанность и неограниченность фундаментальных научных знаний о материальных **свойствах**, энергетических **состояниях** и их взаимной **трансформации** под влиянием внутренних и внешних факторов, позволяет раскрывать **феномены** непознанных человеком знаний. При этом, в исследованиях чрезвычайно важно придерживаться пространственно-временной **Lt**-мерности гомеостаза неживых и живых систем, которая, по всеобщему признанию, является одной из мировых констант.

Доведенный авторами до цифрового **4D**-уровня интеллектуальный инструментарий квантово-волнового спектрального наблюдения **состояний**, траекторного векторно-фазового энергетического **анализа** процессов реального времени и причинно-следственного предиктивного анализа (**прогноза**) гомеостатических состояний в механике упругих систем, позволяет **в порядке фундаментальной междисциплинарности** перенести знания и умения из физической области исследований, испытаний и диагностики конструкционных материалов в химическую область изучения, систематизации и природного синтеза новых конструкционных материалов с заданными и управляемыми свойствами.

Развитие **структурно-аналитической химии** в цивилизационном мире многомерных естественнонаучных фундаментальных знаний с применением универсального метода **Структурного порядкового анализа** (СПА) позволяет, как с позиций философской общности, так и с позиций креативной междисциплинарности, выстроить системно **понятийный аппарат** (глоссарий) упорядочения чрезвычайно важных для жизнедеятельности глубинных знаний физической химии Д.И. Менделеева и химической физики Н.Н. Семенова. В преддверии революционной эпохи интеллектуальной оцифровки эмерджентного синтеза материи будущего.

ВВЕДЕНИЕ

Химия как фундаментальная область естественнонаучных (точных) знаний о веществе - составе и строении, свойствах химических элементов, их соединений и превращениях в результате химических реакций, а также законах и закономерностях этих трансформаций, пронизывает все без исключения процессы жизнедеятельности Земной цивилизации.

Своими корнями химия обязана физике - науке о наиболее общих законах природы, структуре материи, движении и энергетических трансформациях. Современное общество в своем агрессивном противостоянии среде обитания столкнулось с новейшим феноменом экспоненциального роста Глобальных угроз антропогенного характера, преодоление которых системно и однозначно ведет к пониманию несовершенства существующих знаний в области прикладной химической кинетики, как в минеральных, так и органических веществах.

Основные проблемы техногенной, экотехнологической, био-эпидемической, водно-продовольственной, коммунальной и даже климатической безопасности ожидают креативных решений в конструкционном и биологическом материаловедении. Преодоление Глобальных угроз, деформирующих мировые экономики, как это впечатляюще продемонстрировала вирусная пандемия планетарного характера, становится необходимым условием Устойчивого развития.

Как всегда бывает, к катастрофам приводят три главные причины: отсутствие инструментов наблюдения, прогноза и предотвращения чрезвычайных ситуаций (1), недостаточный по отношению к проблеме уровень научно-профессиональных знаний в обществе (2), беспечное или некомпетентное отношение к угрозам со стороны властных, административных и исполнительных структур всех уровней управления (3).

И традиционно, во времена мировых социально-экономических потрясений, общество связывает свои надежды на преодоление невзгод с научно-инженерными профессиональными соображениями, единственно способными проявить возможности интеллекта для противодействия угрозам и устранения их причин в последствии. Более того, критическим событиям, как правило, предшествуют предостережения наиболее талантливых, прозорливых и социально ответственных ученых.

В области материаловедения, ставшего в XXI веке стержнем Индустрии 4.0 и VI технологического уклада, одним из таких уникальных пророков оказался выдающийся русский ученый, Нобелевский лауреат по химии академик Н.Н. Семенов, зачинатель Химической физики и руководитель Атомного проекта СССР.

ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОЕ ЗАВЕЩАНИЕ АКАДЕМИКА Н.Н. СЕМЕНОВА

В постановочной лекции перед студентами Физико-технического института (1951) академик Н.Н. Семёнов озвучил важный перечень вопросов, требующих совершенствования знаний о периодичности химических элементов табличных форм Д.И. Менделеева (1869) и международной ассоциации химиков IUPAC (1919):

- незаполненность отдельных периодов и рядов, свободные клетки таблиц (а);
- неопределенность размещения элементов в первом периоде, асимметричность (б);
- вынесение семейств элементов III группы за пределы табличных форм (в),
- системное несоответствие валентности элементов групповому принципу (г),
- длиннопериодная таблица IUPAC проблемы семейственности не решает (д), и др.

Признавая гениальность творения Д.И. Менделеева, к разрешению провозглашённых академиком Н.Н. Семёновым проблем приложили усилия многие ученые и практики из разных стран мира, от известных химиков-лауреатов до настойчивых увлеченных практиков. Однако бесчисленное множество представленных вариантов Периодических таблиц, геометрических фигур и аналитических кривых (более 750) в разных системах координат, подчас обнадеживающе оригинальных, поставленной задачи не решают. Как показала мировая практика, устранить в отдельности какой-

либо из приведенных выше недостатков оказалось весьма сложно, что охладило пыл желающих конкурировать в гениальности.

Несмотря на полуторавековой юбилей "научного марафона без победителей", общепризнано, что молекулообразование из однородных и разнородных атомов вещества в каждом равновесно-устойчивом физическом состоянии модельно демонстрирует синтетический атомно-молекулярный **гомеостаз** - пространственно-временное подвижное энергетическое равновесие в фундаментальном стремлении к минимуму энергии состояний.

Такой сложный механизм синтеза описывается полипараметрическими тензорными *Lt*-матрицами (динамическими графами), реализующими вариационный принцип энергетической самоорганизации материи. При этом, цифровая модель химических реакций может быть инструментом кибернетического синтеза в прикладной области интеллектуального конструкционного и биологического материаловедения. Мерность наблюдения (измерения, сбора и хранения метрологической информации) должна строго соответствовать мерности реконструкции (дисплейно-виртуальной визуализации), обработки и анализа информации как необходимое и достаточное условие достоверности гомеостатической модели и её адекватности природному синтезу вещества, как в общей, так и в органической химии.

Для предстоящих химических исследований напрашивается модель энерго-динамического **ядерно-оболочечного равновесия соединений** (реакций), в согласии со всеми законами и закономерностями периодических таблиц. С другой стороны, она соответствует фундаментальному природному принципу достаточности квантованного минимума потенциальной энергии устойчиво-равновесных **атомно-молекулярных упругих состояний**, научно подтверждаемого кристаллографией.

СТРУКТУРНЫЕ ПРОБЛЕМЫ ТАБЛИЧНЫХ ФОРМ

Известные элементы занимают в периодической системе элементов Д.И. Менделеева (короткопериодной таблицы) определенные места в соответствии с зарядом ядра их атомов и строением электронной оболочки. Первые варианты Периодической таблицы оказались весьма запутанными, что выражается в разделении периодов на ряды, подгрупп на главные и побочные, необоснованное вынесение семейств элементов за пределы таблицы, но, самое главное, несовершенна логика плоского отображения многомерности свойств элементов.

Положение некоторых элементов в периодической системе до сих пор однозначно не установлено и по этому вопросу продолжаются дискуссии. К таким элементам относятся водород, благородные газы, элементы триад металлов VIII группы, лантаноиды и актиноиды.

Таблица состоит из десяти горизонтальных рядов (семь периодов, с четвертого по шестой состоят из двух рядов, включающих *d*-элементы) и из восьми вертикалей, называемых группами. Важное значение имеет функциональное несоответствие свойств *d*-металлов первых рядов свойствам *p*-элементов с III по VIII групп. 1-й период, в отличие от всех остальных, состоит из элементов только двух типов - неметаллического, газообразного в естественных условиях водорода и инертного газа гелия. Структурные недостатки 1-го периода явно указывают на то, что периодическая система, независимо от рвения увлеченных новаторов, до настоящего времени - первой четверти XXI века остается незавершенной.

Остальные периоды содержат все четыре известных типа элементов: металлы, элементы с промежуточными свойствами, неметаллы и инертный газ. Но, водород является единственным элементом, который не может быть однозначно отнесен к какой-либо определенной группе системы и должен быть представлен, как самостоятельный элемент над периодом.

Короткая форма таблицы (7 периодов, 8 групп, *f*-элементы вынесены за пределы таблицы) была официально отменена Международным союзом теоретической и прикладной химии IUPAC в 1989 году. В длиннопериодном варианте Периодической системы

- 18 групп, имеющих те же обозначения, что и в короткопериодном. Подгруппы *s*- и *p*-элементов называют "главными", а подгруппы с *d*-элементами - "побочными" подгруппами. Различие между главными и побочными подгруппами ярко проявляется в крайних группах таблицы, прежде всего в группах I и VII.

Электронное строение и химические свойства элементов главных и побочных подгрупп могут не иметь ничего общего, совпадения носят случайный характер. У элементов побочных подгрупп валентными являются электроны двух внешних уровней, в чем и состоит основное различие в свойствах элементов главных и побочных подгрупп (*d*-элементы, переходные металлы - мостик от металлических *s*-элементов к *p*-элементам с преобладанием неметаллов).

Структура VIII группы предельно противоречива - подгруппа VIIIb с "триадой металлов" против здравого смысла совмещена с подгруппой VIIIa благородных газов. Семейства *f*-элементов также вынесены за пределы системы и на практике используются две таблицы. Можно считать, что короткопериодная таблица построена по принципу групповой периодичности, а длиннопериодная по принципу особой последовательности образования энергетических подуровней - **орбиталей**.

В длинной форме таблицы все подуровни идут строго один за другим сверху вниз при понятной последовательности заполнения энергетических уровней любого элемента, даже еще не открытого. По сомнительной традиции, *f*-элементы вынесены за пределы таблицы, во избежание образования "сверхдлинных" периодов и разрушая оказавшийся временным полиатив IUPAC.

В научной конкуренции пальму первенства Д.И. Менделееву уступили признанные авторитеты химической науки Ю.-Л. Майер, А. Шанкуртуа, Д. Ньюлендс, В. Олдинг и Г. Хиприкс. К "химической революции" на рубеже XIX-XX веков причастны Т. Бейли, Ю. Томсен, А. Вернер, А. Ван-ден Брук, Г. Мозли и даже Н. Бор. В основном, идеи дидактического характера не позволили получить ответ на вопрос о границе периодической системы и в чем причины повторающегося "спонтанного нарушения порядка и симметрии".

Н.Н. Семенов ещё в середине XX века прозорливо предвидел: "...по устранении недостатков обнаружатся новые свойства и взаимосвязи элементов, что позволит проводить большинство научных исследований на новом, более высоком уровне и решать стоящие инженерные задачи не только ... инженерам-физикам, а всем ученым, инженерам и практикам". Творчество пределов не имеет.

РАСКРЫТИЕ ФЕНОМЕНОВ - ЦЕЛЬ И МЕТОД ПОЗНАНИЯ

Характерный для Человека опыт наблюдений природных явлений, процессов и состояний порождает интуитивное видение закономерностей и формирует новые знания о природном синтезе, которые позволяют сформулировать теоретические предпосылки фундаментальных знаний, создавать более совершенные инструменты исследований и наблюдений в рамках информационной модели развития знаний.

В современном контексте рассмотрения лингвистических трансформаций, понятие **феномен** обозначает предметы, события, явления, процессы, свойства, сущности, состояния, виды и личности, касающиеся Природы, Общества и Человека, малоизвестные, редкие, необычайные, неизученные, неподдающиеся объяснению или противоречащие общепринятым знаниям и закономерностям факты, парадоксы, отличающиеся уникальными, необычными, неповторимыми или выдающимися качествами, характеристиками, талантами, поступками и прочими проявлениями, а также универсальное общее обозначение всего, что может стать объектом научного рассмотрения или исследования с целью получения фундаментальных (прорывных) научных и опережающих (креативных) технологических знаний. Как сказал авторитетный экономист Лестер Туроу: "Сегодня знания и умения - единственный источник конкурентного преимущества... Сегодня оно там, где находятся лучшие мозги. Все остальное - не считается".

Идеи и теории, подтверждаемые опытами, экспериментами, исследованиями и наблюдениями, подлежат осмыслению и обра-

зуют жизненный цикл научного процесса ради обретения новых ожидаемых Обществом знаний. Достоверность наблюдений и адекватность их анализа позволяют раскрывать научные тайны и постигать основы природной физики явлений, процессов и состояний в **электромагнетизме, механике упругих систем, космическом термояде, тонких химических взаимодействиях** в конструкционных наноструктурированных материалах и биологических тканях.

Открытие, изучение, описание и практическое применение каждой из них в свое время кардинально изменило ход истории человечества, сформировав базовые законы Природы. Эти четыре фундаментальные силы с их природными взаимодействиями образуют естественнонаучные области лидерства в технологических знаниях, в полной мере продолжают влиять на социально-экономическое развитие социума, являясь основой для формирования и коммерциализации их эффективных антропогенных приложений.

Знания и представления Общества о единой **всеобщей модели строения и синтеза вещества (I)**, о единой **всеобщей теории проявления и трансформации энергии полей (II)** и о единой **неограниченной мерности информации** в качестве универсального **It-инструмента наблюдения (III)** с целью объективного познания и глубинного понимания **феномена** их пространственно-временного системно связанного **гомеостаза**.

ПЕРИОДИЧНОСТЬ - ФЕНОМЕН МАТЕРИАЛЬНОГО МИРА

По мнению Нобелевского лауреата в области химии академика И.Р. Пригожина, автора Теории феноменов, *"до конца века общество узнает об окружающем мире во много раз больше, чем за всю историю человечества. Человек обретет могущество, достойное древних богов, которым он когда-то поклонялся и перед которыми трепетал"*. Научные и природные феномены будут трансформироваться из загадок Природы в новые обычные знания.

Компьютерная революция позволит мысленно управлять материальными объектами и трансформацией энергии и материи; **биотехнологическая революция** продлит жизнь Человека и его активное творческое долголетие, научит создавать живые ткани, органы и существа с заданными свойствами; **нанотехнологическая революция** даст возможность управлять свойствами конструкционных материалов и формой объектов и даже создавать их "из ничего". Это "революционная" технологическая триада.

Существует множество феноменов, обойденных вниманием ученых, проявляющих локальное свойство или явление Природы, но некоторые из них носят междисциплинарный и даже фундаментальный характер. К феноменам относится и **периодичность** системы химических элементов, образование которых, в соответствии с законами ядерно-орбитального синтеза, демонстрирует **непрерывный линейный квантованный порядок** - увеличение скалярного заряда (и массы протонов) ядра определяет количество объёмных и пространственно ориентированных электронов орбитальных структур атома. При этом, гомеостаз атомных структур, в стремлении к минимуму энергии устойчивых состояний, демонстрирует **нелинейный, циклически повторяющийся порядок** структуры и физико-химических свойств элементов.

Феномен как непознанное знание в полной мере относится к табличным формам периодических систем химических элементов. Помимо пяти проблемных вопросов, озвученных академиком Н.Н. Семёновым, за полтора века после открытия Периодического закона, ни одно из предложений не приблизило к пониманию физической **модели** периодической системы. Это привело к отставанию структурной химии от общего развития естественных наук с позиции "от хаоса знаний к порядку". *"Переход от хаоса к порядку поддается математическому моделированию при ограниченном наборе моделей такого перехода - универсальных, которые работают на всех уровнях природного целого"* (И.Р. Пригожин).

Как перспективный способ формирования множества природоподобных процессов в сфере жизнедеятельности человека, изучение **феноменов** может быть **реальным инструментом мотивации научной среды к познанию, освоению и коммерциализации**

областей Знаний, которые могут сокращать научно-технологическое отставание, повышать импортнезависимость и конкурентоспособность.

Мировые социально-экономические кризисы также являются непознанным **феноменом**, породившим **Глобальные антропогенные угрозы**. Изучение прикладных и фундаментальных особенностей феноменов позволяет формировать новые опережающие технологические решения, устраняющие пробелы и отставание в развитии предшествующих периодов освоения знаний. Глубокий смысловой анализ позволяет раскрыть значительный философский потенциал понятия **феномен** для *"выравнивания диспропорции критических областей отставания"* Знаний, создающих глобальные антропогенные угрозы среде обитания, жизнедеятельности Человека и устойчивому развитию Общества в целом.

АКТУАЛЬНОСТЬ ВЫХОДА ИЗ ПОЛУТОРАВЕКОВОГО ЗАСТОЯ

Еще один глубинный посыл научному сообществу сделал на рубеже XIX и XX веков соавтор теории системного анализа, выдающийся русский математик академик А.М. Ляпунов, распространивший биологическое понятие **гомеостаз** на сложные неживые и природно-технические системы. Открыта эпоха междисциплинарности между двумя важнейшими фундаментальными областями знаний о жизнедеятельности Человека - живой и неживой природе.

Гомеостаз - это всеобщее свойство саморегуляции сложных систем различной природы (физических, технических, химических, биологических, социальных и иных) к поддержанию подвижного динамического равновесия в обмене энергией с внешней средой с сохранением стабильности внутреннего состояния.

В биологии понятие **гомеостаз** сформировалось в контексте системной способности живых организмов к **сохранению иммунитета** - поддержанию своей биологической индивидуальности путём распознавания, нейтрализации и удаления чужеродных полей, веществ и клеток (болезнетворных бактерий и вирусов).

В механике понятие **гомеостаз** сформировалось в контексте системной способности неживых конструкций, механизмов и силовых машин к **сохранению прочности** - поддержанию конструкционной ресурсной индивидуальности путём наблюдения (мониторинга), распознавания (диагностики), устранения и предупреждения причин и обстоятельств неисправностей, аварий, катастроф и ЧС.

В химии/материаловедении понятие **гомеостаз** может быть инструментом наблюдения, анализа и/или **целенаправленного синтеза вещества** (формирования устойчивых или управляемых физико-химических структурно-функциональных свойств) в условиях энергетических факторов и воздействий.

В научно-инженерных сообществах сложилась устойчивая понятийность энергетических знаний в части показателей состояния вещества. **Энтальпия H** (теплосодержание) является аддитивной тепловой функцией термодинамического состояния вещества как сумма внутренней энергии **U** и потенциальной упругой энергии внутренней работы (произведение давления **p** на объём **V**) **$\Delta H = \Delta U + p\Delta V$** . Тепловой эффект химической реакции, равный изменению энтальпии (внутренней энергии **U** и работы расширения **$Q_p = |\Delta H|$**). При эндотермических реакциях **$Q < 0$** , при экзотермических реакциях **$Q > 0$** . Удельная энтальпия вещества **h** является параметрической справочной константой.

Энтропия S (неупорядоченность) является термодинамической функцией (макропоказателем) состояния вещества, которая служит мерой (выражает степень) беспорядка системы для определения направления химических реакций и изменения химического равновесия **$\Delta S = Q/T > 0$** . Энтропийный анализ помогает изучать данные и находить связи между явлениями, определять направления физических и химических процессов и состояний.

Величину энтропии принято вычислять по формуле **$S = K \cdot \ln(n)$** , где **K** - постоянная Больцмана, а **n** - количество микросостояний, реализующих макросостояние. Для обратимых процессов общее изменение **энтропии** равно нулю, для необратимых процессов степень энтропии увеличивается. Особую актуальность инстру-

менты наблюдения термодинамических состояний вещества имеют для изотопов, аллотропных и полиморфных образований.

УНИВЕРСАЛЬНАЯ МОДЕЛЬ СИСТЕМЫ ЭЛЕМЕНТОВ

Целью проведения исследований является интеграция знаний мирового научно-инженерного химического сообщества в области системного всеобъемлющего научного анализа структур и табличных форм периодического представления физико-химических элементов для формирования обоснованных предложений интеллектуального уровня к созданию универсальных оцифрованных физических моделей синтеза конструкционных материалов и биотканей для органов.

Стратегия научных исследований предполагает создание аргументированной многопараметрической формы объёмного представления непрерывной системы 118 известных и ещё не открытых химических элементов на основе общепринятых законов, закономерностей и правил, обобщённых короткопериодной таблицей Периодической системы химических элементов Д.И. Менделеева и длиннопериодной таблицей Международного союза химиков IUPAC. Безусловно, с учетом справедливых критических замечаний Нобелевского лауреата по химии академика Н.Н. Семёнова и новейших междисциплинарных знаний в физике, механике, биологии, материаловедении, информационных технологиях и химическом синтезе.

Новый подход должен вобрать в себя достижения фундаментальных научных знаний в области ЭНЕРГИИ - ВЕЩЕСТВА - ИНФОРМАЦИИ с позиции пространственно-временной **мерности** Земной цивилизации, Учений о физико-химическом **дуализме**, **симметрии**, **гомеостазе** неживых систем, **периодичности**, энергетического **уровня**, теории **феноменов**, **энтальпии**, **энтропии** и **эмерджентности** знаний, интеллектуальных квантово-волновых инструментов наблюдения (**BigData**), дисплейно-виртуальной реконструкции (**Gybrid Twin**), модельного траекторного анализа **реального времени** (**Deep Data**), прогноза, оценки рисков и кибернетического управления (**ИскИн**) **состояниями**.

Стремление авторов к созданию универсальной Объёмной матрицы химических элементов открывает научную перспективу формирования функционалов структур на ядерно-электронном валентно-энергетическом уровне химических элементов с практическим использованием периодичности системы с предсказательных позиций открытия новых, еще неизвестных химических элементов и их соединений.

СТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ ОРБИТАЛЬНЫХ ФУНКЦИОНАЛОВ

Для изучения структуры периодичности системы химических элементов Д.И. Менделеева и укрепления позиции признания её фундаментальности, авторами разработан метод **Структурного порядкового анализа** (**СПА**), состоящий из трех функциональных частей: **Порядковый ретро-анализ** структур уже открытых 118 химических элементов; **Структурный анализ** группового образования **семейств** элементов с невалентными **орбиталями**; **Структурный порядковый фьючерс-анализ** (прогноз) ещё не открытых элементов.

В начале XX века наука о веществе сделала громадный скачок в связи с разработкой ядерной теории строения атомов, экспериментальным определением величин зарядов атомных ядер и **электрона** (Г. Мозли, Нобелевские лауреаты Д.Д. Томпсон, Э. Резерфорд, Н.Д. Бор и др.). Не случайно, что заряд атомного **ядра** совпадает с **порядковым номером** элемента в периодической системе. Если **атом** элемента находится в электронейтральном состоянии, атомное **ядро** с положительным зарядом **Z** окружено таким же количеством электронов, каждый из которых несёт единицу отрицательного заряда.

Заряд ядра определяет индивидуальность химических элементов, а атомный вес (атомная масса) элемента является величиной, зависящей от заряда ядра. Поэтому современная редакция Периодического закона звучит так: свойства простых веществ, а также формы и свойства их соединений находятся в периодической зависимости от порядковых номеров химических элементов. Именно

порядковый принцип является основой анализа и синтеза в химии.

Традиционно многогранный закон изображается в форме плоских таблиц, диаграмм и графиков. **Групповой** принцип **расположения элементов в периодах** является самым важным в смысле **образования химических соединений**, и его системные нарушения в угоду субъективным представлениям, послужили причиной отсутствия универсальной физической **модели** вещества.

Используя доступную порядковую информацию, **СПА** впервые в мировой научной практике позволил не только устранить недостатки, озвученные академиком Н.Н. Семёновым, но и создать универсальную прогнозную модель на основе признанных мировым научным сообществом фундаментальных законов и закономерностей построения **энергетических уровней** {**K, L, M, N, O, P, Q...**} и **орбитальных электронных подуровней** {**s-, p-, d-, f-, g-, h...**}, с учетом приоритетов заполнения электронных оболочек ядер.

Установлено устойчивое **блочное** соответствие **структур парных периодов** и энергетических уровней матрицы с **граничными химическими элементами**, завершающими периоды и энергетические уровни. Требуют особого внимания орбитальные структуры **валентного и невалентного функционалов**, а также основания выведения целых семейств химических элементов за пределы таблиц.

Порядковый анализ, в соответствии с орбитальными функциями, не только формализует положение **граничных элементов**, завершающих энергетические уровни, но и позволяет более обоснованно, с удвоенной достоверностью **прогнозировать структуры периодов и энергетических уровней** еще не открытых химических элементов новых парных периодов будущего.

Метод **СПА** является универсальным, научно и теоретически обоснованным инструментом не только анализа, но и прогнозирования существования еще неизвестных науке химических элементов. При этом следует понимать, что большинство элементов, стабильных и нестабильных в обычных природных условиях, могут существовать устойчиво в особых физических условиях, в том числе, высоких давлениях и температурах, сильных и слабых полях разной энергетической природы, значительно отличающихся от "нормальных" условий жизнедеятельности Земной цивилизации. А также открывать и демонстрировать ещё неизвестные науке **новые свойства** и энергетические устойчивые **состояния** элементарных частиц, химических элементов, материалов и биотканей на земле, в её недрах, в океанических глубинах, ближнем и дальнем космосе.

ПРЕДИКТИВНЫЙ ПОРЯДКОВЫЙ АНАЛИЗ В МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ

Инновационный метод **СПА** дает возможность анализа устойчивых периодических **Структур** и природного естественного **Порядка** образования химических элементов в форме **Обобщенной универсальной ядерно-орбитальной формулы (ЯОФ)** любого химического элемента в **каноническом** (образцовом) виде.

Многомерный энергоинформационный подход позволит создать цифровую динамическую **модель** для расчетов процессов взаимодействия химических элементов между собой и методы прогнозирования для получения новых веществ.

Объёмная матрица химических элементов может стать наиболее информативной всеобщей модельной формой для обобщения фундаментальных законов структур и закономерных устойчивых особенностей химических элементов в их природном системном дуализме: **Химизм "поливалентной периодичности"** в короткопериодной таблице Д.И. Менделеева и **Физичность "энергетических структур"** невалентных орбиталей энергетических подуровней в таблице IUPAC.

Периодический закон опирается на непрерывное групповое наращивание валентных электронов {с I по VIII группы} в двух внешних орбиталях {**s¹ - s²**} и {**p¹ - p² - p³ - p⁴ - p⁵ - p⁶**} с шагом **1e⁻** и максимальным разбросом поливалентности, равным восьми в пределах от (0 ÷ +8) до (-4 ÷ +4). Из этого можно сделать вывод о том, что, за исключением **"первородного"** (исходного) **блока А** из водорода **1s¹** (период 0) и гелия **1s²** (период № 1), полноценными с позиции **валентности** являются периоды № 2 и № 3 с пол-

ным разнообразием валентных структур $\{1\sigma + 8\sigma\}$, заполняющих электронами ровно 8 групп. Структуру этих периодов можно считать *канонической*, поскольку их валентный функционал присутствует во всех периодах (2 ÷ 7) во всех известных 118 химических элементах систем.

Фундаментальный Периодический закон отражает естественный природный *порядок* системного образования химических элементов и их соединений. Теория строения вещества в виде ядерно-оболочечной структуры системы элементов получила экспериментальное подтверждение. Строгое соответствие положительного заряда атомного ядра совокупному отрицательному заряду электронной оболочки и порядковому номеру в системе физико-химических элементов проявляется как в устойчивых стационарных состояниях элементов, так и в энергодинамических термохимических реакциях образования стабильных химических соединений.

Фундаментальное свойство *порядка* является многомерным информационным статическим скелетом структуры вещества, на котором, как в универсальной системе координат, целесообразно позиционировать статические и динамические энергетические характеристики фазовых состояний исходных компонентов химических реакций для дальнейшей задачи синтеза конечных ожидаемых продуктов.

Метод *СПА* в поставленной задаче играет технологическую роль обоснования *достаточной информативности для конструирования метода будущего синтеза*, вбирающий информацию обо всех известных законах, закономерностях, правилах, характеристиках, свойствах, процессах и состояниях элементов, соединенную с интеллектом, опытом и интуицией аналитика. Оцифровка опыта порядкового анализа, с учетом возникающих отклонений, особенностей и исключений, приближает не только к созданию универсальной физической *модели* вещества, но и к обоснованному прогнозированию новых, пока ещё не открытых химических элементов.

Важнейшим функционалом синтеза является валентность химического элемента есть фундаментальная способность его атомов образовывать определенное число химических связей (молекулообразование / присоединение или замещение) с однородными или разнородными атомами. Положительная валентность элемента соответствует количеству отданных атомом электронов (донор), а отрицательная - количеству забранных электронов для завершения внешнего энергетического уровня (акцептор). Природное свойство проявления избирательной активности с разными элементами называется *поливалентность*.

Принцип 8-группного расположения химических элементов с *валентным* функционалом внешних орбитальных структур, положенный в основу короткопериодных форм, структурно обоснован максимальным разбросом *поливалентности*. За исключением "особого" укороченного периода № 1 из водорода $1s^1$ и гелия $1s^2$ с внешней орбиталью $\{s^1 - s^2\}$, полноценными с позиции *валентности* являются периоды № 2 и № 3 блочной пары **В**. Разнообразие валентных структур $\{1\sigma + 8\sigma\}$ последовательно заполняет электронами все 8 групп, при этом все элементы "основные".

Образование в периодах № 4-5 блока **С** внутренних орбиталей $\{d^1 + d^{10}\}$ сподвигло Творца вставить их в виде дополнительных рядов перед внешними орбиталями $\{p^1 + p^6\}$. Эта вставка "побочных" элементов разрушила гармонию групповой периодичности, введя несоответствие свойств *d*-элементов групповому принципу. Структуру периодов блока **В** можно считать *канонической*, поскольку их валентнообразующий функционал присутствует во всех периодах. Достояна глубокого обсуждения обоснованность присутствия "побочных" элементов *d*-подуровня во всех группах периодичности, с 1 по VIII.

Научный подход *СПА* основан на использовании любых факторов и аргументов, упрощающих прогноз и расширяющих возможности синтеза новых химических элементов и их соединений. К числу таких факторов целесообразно отнести устойчивый фактор блочного образования парных периодов подобной структуры.

Поскольку в пределах открытых учеными 118 химических эле-

ментов фактор *блочности* наблюдается во всех периодах, начиная со второго, предлагается распространить его и на укороченный первый период, разбив его на условную пару одноэлементных периодов, в которых водород отнесен к нулевому периоду (s^1), а гелий отнесен к периоду № 1 (s^2), тогда *блочность* как парная идентичность орбитальных структур сопряженных периодов, не нарушая ни одного принятого химического закона и порядка, становится фундаментальным фактором периодичности.

Восемь периодов распадаются на четыре парных блока **{А, В, С и D}**, при этом, метод *СПА* показывает, что в четных *постканонических* периодах каждой блочной пары впервые появляется новая (наивысшая) электронная *орбиталь*, отсутствующая в предшествующих блоках. Еще одно новое наблюдение состоит в том, что каждому *блоку* соответствует только одно предельное заполнение электронной оболочки соответствующего энергетического *уровня*, при этом, смена энергетических уровней $\{K, L, M, N, O, P, Q, \dots\}$ в блочных периодах происходит в середине четных периодов, между полностью заполненной электронами новой (наивысшей) *орбиталью* и последующей за ней наивысшей орбиталью предшествующего блока.

Периодичность как фундаментальное свойство системы химических элементов, с позиций метода *СПА*, структурирована *каноническими периодами блока В* на основе принципа 8-группового расположения элементов с валентным функционалом внешних орбитальных *структур*. Форма материального проявления периодичности состоит в том, что каждый период начинается первым химическим элементом ns^1 - группы I (*n* - порядковый номер блочной структуры) и завершается последним химическим элементом np^6 группы VIII.

Закономерное образование в периодах № 6 и № 7 блока **D** еще одной пары внутренних орбиталей $\{f^1 + f^4\}$ сподвигло Творца впервые вынести их за пределы периодической таблицы, аналогично не очень обоснованному введению дополнительных рядов "побочных" элементов, начиная с периодов № 4-5 блока **С**. При этом, очевиден принципиально иной подход к размещению нового функционального типа электронных энергетических *подуровней* (орбиталей).

В дополнение к двум внешним *каноническим валентным* орбитальям типа $\{4s^2\}$ и $\{4p^6\}$, в структуре блока **D** появились внутренние орбитали $\{4f^4\}$ невалентного типа четвертого энергетического уровня **N**, в которых наращивание электронов происходит своим чередом, а свойство *валентности* (молекулообразования) продолжает проявляться благодаря паре *внешних орбиталей*. Вслед за элементами типа $\{f^4\}$ образуются элементы типа $\{4d^{10}\}$, также предшествующие внешней орбитали $\{4p^1\}$.

Структурный анализ элементов блока **D** располагает к рассмотрению образования невалентных подуровней $\{f^4\}$ и $\{d^{10}\}$ в качестве проявления новой функциональной закономерности, которая, в отличие от линейной групповой *валентности*, демонстрирует некоторую подуровневую *цикличность* свойств элементов с нелинейным характером невалентного функционала, предварительно квалифицированного как "вторичная периодичность" Е.В. Бэроуна - С.А. Щукарева.

Цикличность как свойство закономерного последовательно заполнения электронами невалентных орбиталей внутренних электронных оболочек, в отличие от *валентности* внешних оболочек с линейным изменением параметров атомов, формирует фактор *нелинейной сжимаемости оболочки*. Табличные формы периодических систем традиционно отображают *групповой фундаментальный принцип* образования периодов. Метод *СПА* со всей очевидностью подтверждает всеобщую каноническую закономерность механизма валентности за счет внешних $\{ns^2\}$ и $\{np^6\}$ валентных орбиталей с функционалом химической активности.

В формах IUPAC также *нарушен принцип непрерывности* образования системы химических элементов. *Вследствие необоснованного размещения* "столбцов" с 3 по 12 в периодах № 4 и № 5 блока **С**, а также в периодах № 6 и № 7 блока **D**, появились пустые клетки в "столбцах" с 3 по 12 в периодах № 2 и № 3 блока **В**.

Необоснованно вставленные "побочные" d -элементы, естественно, "раздвинули" элементы внешних $\{s^2\}$ и $\{p^6\}$ орбиталей до 18 "столбцов", образовав пустоты в блоке периодов **B**. Это возможно объяснить только отсутствием понимания дальнейшего развития периодической системы.

А дальнейшее развитие системы элементов привело к открытию 28 химических элементов с внутренними $\{f^{14}\}$ орбитальными (лантаноиды и актиноиды), как оказалось, очень существенными для жизнедеятельности человека. Поступить с ними аналогично $\{d^{10}\}$ орбитальным означало бы превращение 18-группной таблицы в 32-группную таблицу и т.д. И это всё при 8-группной периодичности и соответствующей ей максимальной поливалентности 8!

Предиктивный метод СПА убедительно демонстрирует, что, в соответствии с принципом непрерывности, практика внесения элементов семейств f , g ... в пределы табличных групп, ведет к абсурду: в периодах 6 и 7 блока **D** 18-группная таблица IUPAC превратится в 30-группную, а в периодах 8 и 9 открываемых элементов блока **E** превратится в 44-группную, и т.д.

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ СТРУКТУРНЫЕ ФУНКЦИОНАЛЫ

Система энергетического гомеостаза ядра и электронной оболочки в атомах химических элементов реализует два взаимосвязанных **функционала**. Первый функционал - **молекулообразование** из однородных и разнородных атомов, что реализует материаловедческое предназначение химической науки - природный синтез, основанный на **фундаментальном свойстве групповой периодичности**.

Второй функционал - многомерное **энергоинформационное структурирование ядерно-оболочечных форм и фазовых состояний** физико-химических соединений, что реализует интеллектуальный потенциал антропогенного синтеза новых конструктивных материалов и биологических тканей на основе природного многообразия. В этом цель физического моделирования эксплуатационных состояний.

Взаимодействие двух функционалов очевидно в связи с приходом эпохи оцифрованных научно-технологических исследований интеллектуальных знаний. Энергетическая природа физико-химического синтеза опирается на базовые представления об энергетических уровнях $\{K, L, M, N, O, P, Q, \dots\}$ и орбитальных электронных подуровнях $\{s, p, d, f, g, h, \dots\}$, обладающих **фундаментальным свойством порядковой устойчивости** в формировании статодинамических приоритетов заполнения оболочек ядер.

Вместе с тем, по мере развития связанных **структур ядер и электронных оболочек**, происходит существенное усложнение энергоинформационного взаимодействия внутри структур, приводящее к нарушению **линейности, устойчивости симметрии, изотропности** и, естественно, **химической активности**. По мере увеличения ядерных масс, все это демонстрируют экспериментально подтвержденные свойства **перескока электронов, сжимаемости орбитальных радиусов, нелинейности цикличности** и т.п.

Энергетические функционалы реализуют многообразие видов периодичности. С увеличением порядкового номера повторяются сходные черты и существенные различия свойств химических элементов. Немецкий химик И. Деберейнер на полвека раньше опубликования таблицы Д.И. Менделеева, предвосхитил предсказательные возможности системы элементов, обладающих общностью химических свойств. Атомные массы и свойства средних в триадах подобных элементов усреднены относительно суммы свойств двух крайних химических элементов.

Атомно-молекулярные физико-химические свойства простых и сложных веществ (**валентность, атомный радиус, потенциал ионизации** и т.п.) могут быть качественно и количественно представлены в виде зависимостей от порядкового номера с периодическим проявлением выраженных максимумов и минимумов. В рамках табличных форм химических элементов принято различать горизонтальную периодичность в квантованном увеличении от минимального до максимального значения заряда ядра и соответствующей ему электронной оболочки с активными внешними (ва-

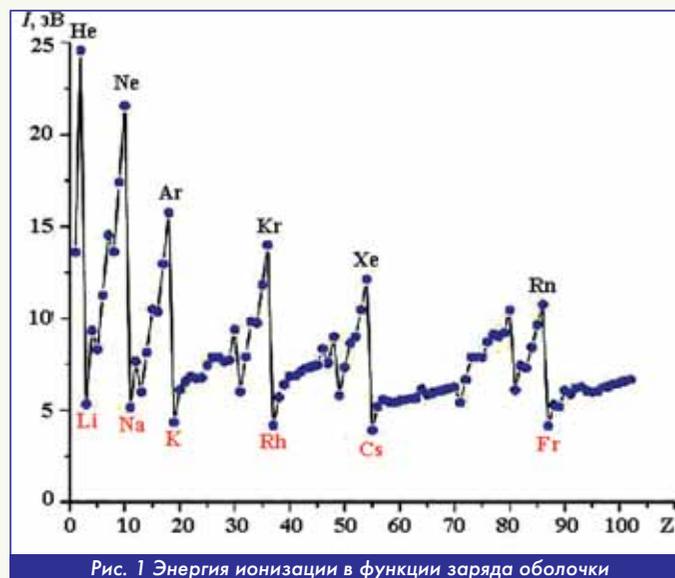
лентными) орбиталями.

Вертикальная периодичность отображает химию элементов и их соединений, которая проявляется в групповой повторяемости свойств химических элементов Периодической системы. Элементы одной группы имеют однотипные электронные конфигурации с периодичностью свойств, например, **энергии ионизации E_i** [кДж/моль]. **Диагональная** периодичность связана с возрастанием неметаллических свойств в периодах слева направо и в группах снизу вверх. Принято также рассматривать **вторичную, "звездную"** и иные виды системной и **локальной** периодичности. В Объемных матрицах главные виды периодичности представляются многообразием спиральных конических и цилиндрических форм.

Решающую роль в создании концепции **валентности** сыграл немецкий химик Ф.А. Кекуле, раскрывший теоретический смысл **"соединительной силы"** британца Э. Франкланда. Итальянец С. Канниццаро представил учение о валентности **"Конспект лекций по химической философии"** на широкое обсуждение на I Международном химическом конгрессе в г. Карлсруэ в 1860 г. Его исследования способствовали установлению **валентности** металлов, равно как работы Ф. Кекуле помогли определить аналогичные характеристики для неметаллов.

Выдающийся российский химик А.М. Бутлеров считал **валентность** основополагающим понятием в процессе создания своей теории химического строения и обосновал **число 8 как реальную основу Периодического закона**. Его активными российскими продолжателями стали талантливые химики Л.А. Чугаев и Б.Н. Меншуткин.

Функциональное отличие свойства **периодичности** химических элементов отражает **фундаментальную закономерность и механизм повторяемости** в формировании **внешних валентных орбиталей оболочек ядер**. Энергетические характеристики активности в функции количества активных электронов s - и p -орбиталей в пределах групповых периодов, демонстрируют линейно-модульный характер (рис. 1).



Полный спектр восьмигруппной периодичности представляют химические элементы с $\{s^{1-2}\}$ и $\{p^{1-2-3-4-5-6}\}$ подуровнями во внешних орбиталях. Разнообразие валентных структур $\{1e^- + 8e^-\}$ последовательно заполняет электронами все 8 групп **"основных"** элементов канонических периодов № 2-3 блока **B**, что позволяет именовать их **валентными семействами**. Валентные **семейства** внешних орбиталей образуют **каноническую основу** последующих блоков парных периодов всех без исключения табличных и матричных форм Периодических систем.

Логический инструментарий метода **СПА** позволяет предположить, что, в случае известности всех химических элементов четырех блоков парных периодов одновременно с открытием Периодической таблицы, Творцу не могло прийти в голову размещать 48 химических элементов из 118 в необоснованном порядке **с**

полным нарушением принципов **непрерывности** и **групповой периодичности**.

При этом, по мере образования химических элементов в пределах периода, проявление химической активности (валентности) внешних $\{s^2\}$ и $\{p^6\}$ орбиталей имеет **линейный** характер по всем характеристическим параметрам - **масса, заряд ядра, электронный потенциал, энергия связи** и т.д.). А процесс образования химических элементов за счет внутренних невалентных орбиталей $\{f^{14}\}$ и $\{d^{10}\}$ демонстрирует очевидно **устойчивый**, но не изученный **феномен нелинейного влияния** на те же характеристические параметры химической активности **валентных орбиталей**.

Порядковым анализом образования внутренних невалентных орбиталей $3\{d^{10}\}$ и $4\{f^{14}\}$ подтвержден экспериментально **цикл резонансного** типа в элементах между ns^2 (группа II) и np^1 (группа III) орбиталями канонического восьмигруппного периода $n\{s^1 + p^6\}$, внутри которого происходит образование новых **семейств** химических элементов за счет наращивания электронами **невалентных подуровней** внутренних невалентных орбиталей (рис. 2).

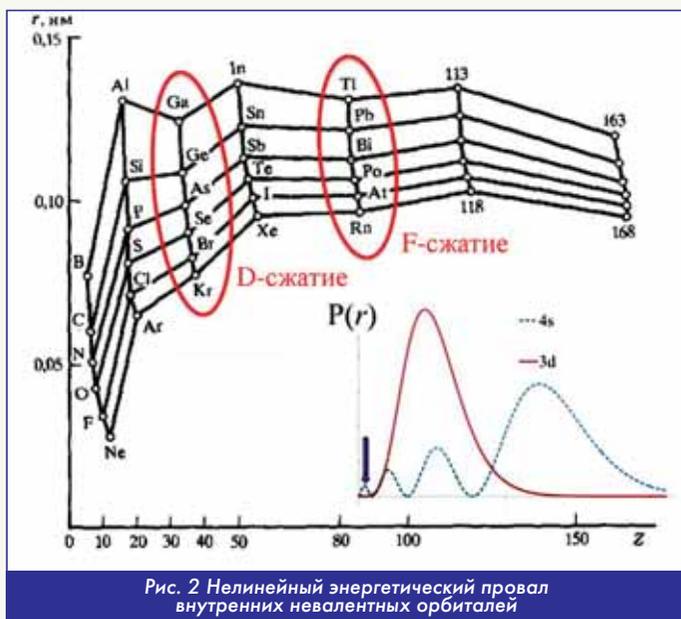


Рис. 2 Нелинейный энергетический провал внутренних невалентных орбиталей

Функциональное отличие от свойства периодичности химических элементов отражает **фундаментальную закономерность** и **механизм повторяемости** в **формировании внутренних невалентных орбиталей** оболочек ядер, предшествующих внешним валентным орбиталам. Энергетические характеристики электронов внутренних невалентных орбиталей демонстрируют системно **нелинейный характер**.

В пределах каждого периода получены кривые ионизационных потенциалов и радиусы атомов с отклонениями, обусловленными особенностями **экранизации оболочками нижнего уровня ядерно-электронного взаимодействия с внешними валентными орбиталями**. "Вторичная периодичность" **"есть свойство, заложенное в самом ядре"**, и оно **циклично характерно провалами** (рис. 3).



Рис. 3 Невалентные циклические энерготрансформации внутренних орбиталей

Порядок образования орбиталей электронных оболочек следует закономерностям:

1. Энергетические уровни образуются путем заполнения орбиталей (подуровней) соответствующего уровня **в блочной естественной последовательности**: уровень $K (1s^1 + 1s^1-2)$ блока A ;

уровень $L (2s^1-2 + 2p^1-2-3-4-5-6)$ канонического блока B ; уровень $M (4s^1-2 + 3d^1-2-3-4-5-6-7-8-9-10 + 4p^1-2-3-4-5-6)$ блока C ; и завершается уровнем $N (6s^1-2 + 5f^1-2-3-4-5-6-7-8-9-10-11-12-13-14 + 4d^1-2-3-4-5-6-7-8-9-10 + 6p^1-2-3-4-5-6)$ блока D .

2. Канонический блок B , в соответствии с **фундаментальным свойством групповой периодичности**, является базовой полно-размерной структурой проявления полного спектра донорно-акцепторных валентностей от -4 до +4 или от 0 до +8 с максимальной поливалентностью "8".

3. Все последующие периоды, начиная с блока C , в естественной последовательности порядкового наращивания ядерно-электронных параметров (N - порядковый номер элемента, p^+ - протоны, n^0 - нейтроны; m - атомные массы; e^- - электроны), опираются на универсальную каноническую структуру $\{ns^1-2 + np^1-2-3-4-5-6\}$, реализующую через валентность **фундаментальное свойство молекулообразования**.

4. Периоды каждого следующего за каноническим блока прогрессивно наращиваются одним новым энергетическим подуровнем (орбиталью), заполненная структура которого образует новое, более высокое подуровня **семейство**.

5. Порядок образования новых семейств подчиняется **фундаментальному принципу обратной инверсии**. В парных периодах блока C между каноническими семействами $\{ns^2\}$ и $\{np^1-2-3-4-5-6\}$ образуются семейства орбитали $\{nd^1-2-3-4-5-6-7-8-9-10\}$ нового подуровня. А в периодах блока D после семейств $\{ns^2\}$ последовательно образуются семейства $\{nf^1-2-3-4-5-6-7-8-9-10-11-12-13-14\}$ и $\{nd^1-2-3-4-5-6-7-8-9-10\}$, предшествуя элементам np^1 семейств $\{np^1-2-3-4-5-6\}$, и так далее. **Все "инверсионные" семейства формируются в группе III, предшествуя элементам np^1** .

Метод СПА позволил обнажить структурный механизм функционального природного **дуализма групповой периодичности валентности** и **энергетического семейственного гомеостаза цикличности** в качестве основы познания материи. И если механизм химических реакций молекулообразования в системе химических элементов достаточно глубоко изучен и структурирован в **периодах**, то механизм **энергетических мотиваций природного синтеза материи** требует серьезного пристального внимания.

Фундаментальный физический принцип **минимума энергии устойчивых состояний** вошел в химическую науку благодаря открытиям выдающейся плеяды ученых - В. Паули, В.М. Клеchkовского, Э. Маделунга, Ф. Хунда и др., научно обосновавших системные принципы и правила **энергетического ядерно-орбитального баланса** в структуре энергетических уровней. **Валентные периоды и энергетические уровни**, не совпадая структурно, представляют собой координатную матрицу химико-физического **дуализма**.

По принципу **минимума энергии состояний**, сначала заполняются орбитали более низкого энергетического подуровня. Но, с учетом структурной закономерности завершения энергетических уровней **в каждом четном периоде** соответствующей блочной пары **семейством нового, более высокого по отношению к предшествующему периоду подуровня**. Эта закономерность, обоснованная энергетически, создает иллюзию обратной **инверсии** при образовании новых орбиталей, однако, более внимательное изучение подтверждает главенство принципа минимума энергии ионизации в образовании новых химических элементов.

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ИНСТРУМЕНТЫ СТРУКТУРНОГО АНАЛИЗА

Для удобства описания и анализа свойств химических соединений, **общепризнан стандарт электронной формулы химических элементов**, системно структурирующий распределение элементов по энергетическим уровням и подуровням в соответствие с возрастанием энергии атомных орбиталей для ряда:

$$1s^2 < 2s^2 < 2p^6 < 3s^2 < 3p^6 < 4s^2 < 3d^{10} < 4p^6 < 5s^2 < 4d^{10} < 5p^6 < 6s^2 \approx 4f^{14} < 5d^{10} < 6p^6 < 7s^2 \approx 5f^{14} < 6d^{10} < 7p^6.$$

Структурный анализ электронных оболочек химических элементов можно представить в виде трех **системно связанных функционалов**, индивидуальных для каждого элемента или изотопа:

а) **Периодически** наращиваемые электронами **валентные внешние s- и p-орбитали (В-валентные)** энергетических уровней, образующиеся во всех химических элементах, составляют основу механизма химических взаимодействий; структура переменна до предельного заполнения электронами внешнего энергетического уровня, после чего наращивание смещается в следующую в порядке группу.

б) **Циклически** наращиваемые электронами **срединные невалентные** орбитали энергетических уровней образуются в элементах семейств III группы (**Н-невалентные**); в химических реакциях атомов не участвуют; структура переменна до насыщения электронами последнего (граничного) элемента завершено энергетического уровня, после чего наращивание смещается в следующую по порядку группу.

в) **Предельно** заполненные (насыщенные) электронами **нижние пассивные** энергетические уровни оболочки (**П-пассивные**), на химические взаимодействия атома не влияют; структура неизменна до предельного заполнения электронами последнего энергетического уровня, после чего количество нижних энергетических уровней увеличивается на один.

Системно связанные функционалы электронных оболочек атома позволяют реконструировать **Электронно-орбитальную формулу (ЭОФ) (1)**, которая может стать системным аналитическим инструментом описания и прогноза структурного распределения электронов по орбитальным-подуровням (**s, p, d, f, g, h...**) в энергетических уровнях (**K, L, M, N, O, P, Q...**) системы химических элементов:

$$\text{ЭОФ} \equiv \{V_s \succ N \succ P \succ H \succ V_p\} \quad (1)$$

Устойчивое свойство цикличности в формировании внутренних невалентных орбиталей оболочек ядер, предшествующих валентным орбитальям, вносит недостающую интеллектуальную компоненту, позволяющую усилить философское осмысление природного физико-химического **дуализма** мира **материи: химизм "поливалентной периодичности"**, составляющий фундаментальность короткопериодной таблицы Д.И. Менделеева, и **физичность "родственных структур"** энергетических подуровней с видом на фундаментальность длиннопериодной таблицы IUPAC.

В отличие от **химической кинетики** молекулообразования в **физической химии**, физики подошли вплотную к **системному гомеостазу** интегрированной динамической структуры атома **"ядро - оболочка" в химической физике**. Именно **атомный системный гомеостаз** объективно претендует на роль интеллектуальной **физической модели химических элементов и их соединений**, требующей **цифрового форматирования в задачах синтеза новых конструкционных материалов и биотканей** Индустрии 4.0.

Методически цифровую модель атомов реализует формульное описание энерго-динамических функционалов их структур на основе **Электронно-орбитальных формул**, дополненных **протонно-нейтронной** массово-энергетической структурой ядер атомов (**Я**), компактно представляя элементы в виде **Ядерно-оболочечных формул (ЯОФ) (2)**:

$$\text{ЯОФ} \equiv \{V_s \succ N \succ P \succ H \succ V_p\} \quad (2)$$

Обобщенная (универсальная) компактная ядерно-орбитальная формула любого химического элемента может быть представлена в структурно-каноническом виде:

$$\text{ЯОФ} \equiv \{Y + P + H + V\}$$

В качестве практического примера структурирования функционалов, приведена ядерно-орбитальная формула химического элемента 101Md менделеевией (3). Она имеет общепризнанную электронно-орбитальную структуру $1s^2(K) - 2s^22p^6(L) - 3s^23p^6 - 4s^23d^{10}4p^6(M) - 5s^24d^{10}5p^6 - 6s^24f^{14}5d^{10}6p^6(N) - 7s^25f^{14}6d^{10}7p^6 - 8s^28p^6(P) - 8s^2(Q)$ и может быть представлена для изучения, расширения, моделирования, предиктивного анализа и потенциального синтеза конкретного химического элемента в форме ядерно-орбитальной формулы:

$${}_{101}\text{Md} \equiv [{}_{n144}{}^{p101+}] * [{}_{70}\text{Yb}] * [O^{s-p-d-13}] * [P^{s-p-Q^s}] \quad (3)$$

где:

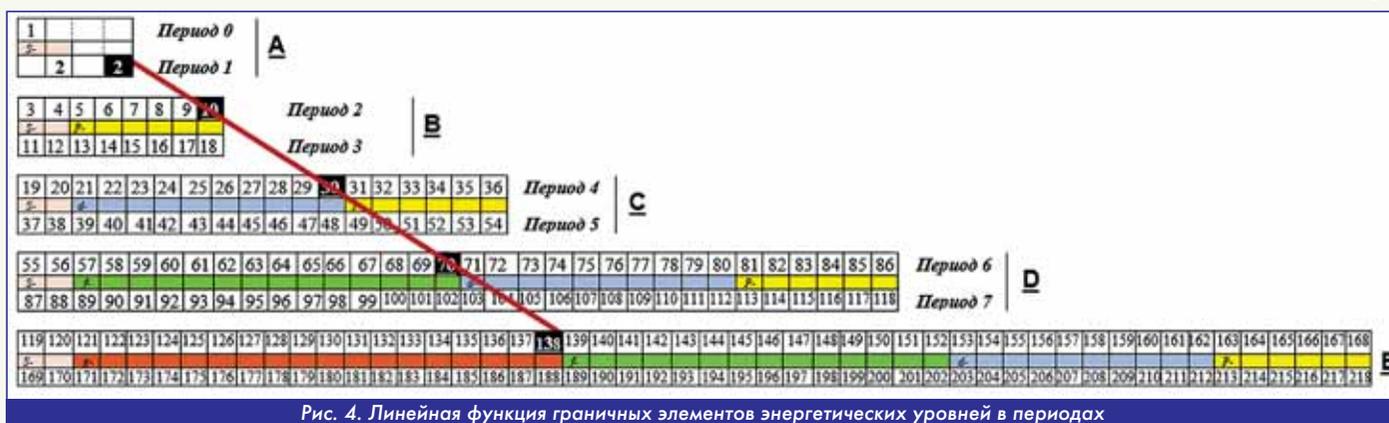
- $[{}_{n144}{}^{p101+}]_Y$ - ядерный протонно-нейтронный фактор с зарядом атома химического элемента ${}_{101}\text{Md}$,
- $[{}_{70}\text{Yb} O^{s-p-d-13} P^{s-p-Q^s}]$ - аналитическая часть элемента ${}_{101}\text{Md}$ на основе граничного элемента ${}_{70}\text{Yb}$,
- $[O^{s-p-d-13}]_H$ - циклическая аналитическая часть внутренних невалентных орбиталей формулы ${}_{101}\text{Md}$,
- $[P^{s-p-Q^s}]_V$ - валентная периодическая аналитическая часть внешних орбиталей формулы химического элемента ${}_{101}\text{Md}$.

ЯОФ и ЭОФ являются модельным интеллектуальным инструментарием метода структурного порядкового анализа **СПА**. Связь ядерно-электронной структуры вещества или материала с его конструкционными свойствами - **проблема фундаментальной научной важности**. Решение ее - в умении адекватно моделировать свойства, функции и назначение вещества на модели его ядерно-оболочечной структуры с предсказательных прогнозных позиций открытия новых, еще неизвестных, химических элементов и их соединений.

Еще одна структурная особенность системы химических элементов связана с валентностью в качестве **основополагающего линейного механизма периодического образования** атомов, а также природного синтеза молекул. Аналогично основополагающему закону Гука в механике упругих систем, структурирование периодов табличных форм исторически превратилось в **устойчивую научную доминанту (догму)**, парализовавшую развитие химических исследований во всем разнообразии спектра естественнонаучных знаний о веществе, с игнорированием главенства системной неустойчивости, нелинейности, фазовой инерционности и спектральной многомерности квантово-волновых энергетических трансформаций.

Под этим углом зрения, представляется чрезвычайно важным изучение **заявленного феномена нелинейной цикличности** образования новых химических элементов за счет наращивания оболочек, внутренних по отношению к валентным. Научный метод **СПА** позволил через изучение **граничных функционалов периодичности и цикличности** выявить важную закономерность (рис. 4).

Границы периодов системы элементов определены сигнальными элементами **s¹- и p⁶** валентных семейственных орбиталей канонического периода. А **границы энергетических уровней**, которые "дирижируют" природным синтезом энергетических подуровней внутренних невалентных семейственных орбиталей {**d-, f-, g-**



$h...$ определяются граничными элементами двух высших подуровней невалентных семейств в каждом четном периоде постканонических блоков.

Методом **СПА** выявлена строгая линейная зависимость расположения граничных элементов завершенных энергетических уровней в четных периодах блочных структур. Порядковые места граничных элементов внутри четных периодов определяет пара координатных формул положения последнего (сигнального) химического элемента заверщенного энергетического уровня (ЭУ) (4)

$$[2 \cdot (N_{\text{четного периода}}) + 4] \quad (4)$$

и первого (сигнального) химического элемента нового ЭУ (5)

$$[2 \cdot (N_{\text{четного периода}}) + 5] \quad (5)$$

Места внешних валентных семейств строго регламентированы восьмигруппной периодичностью канонического периода во всех энергетических уровнях: ns^1 в группе I, ns^2 в группе II, np^1 в группе III, np^2 в группе IV, np^3 в группе V, np^4 в группе VI, np^5 в группе VII, np^6 в группе инертных газов VIII (рис. 5).

Места внутренних невалентных семейств регламентированы непрерывным порядковым принципом нумерации и образования химических элементов и правилом обратной последовательной очередности размещения энергетических подуровней $\{d, f, g, h...\}$ оболочки атома.

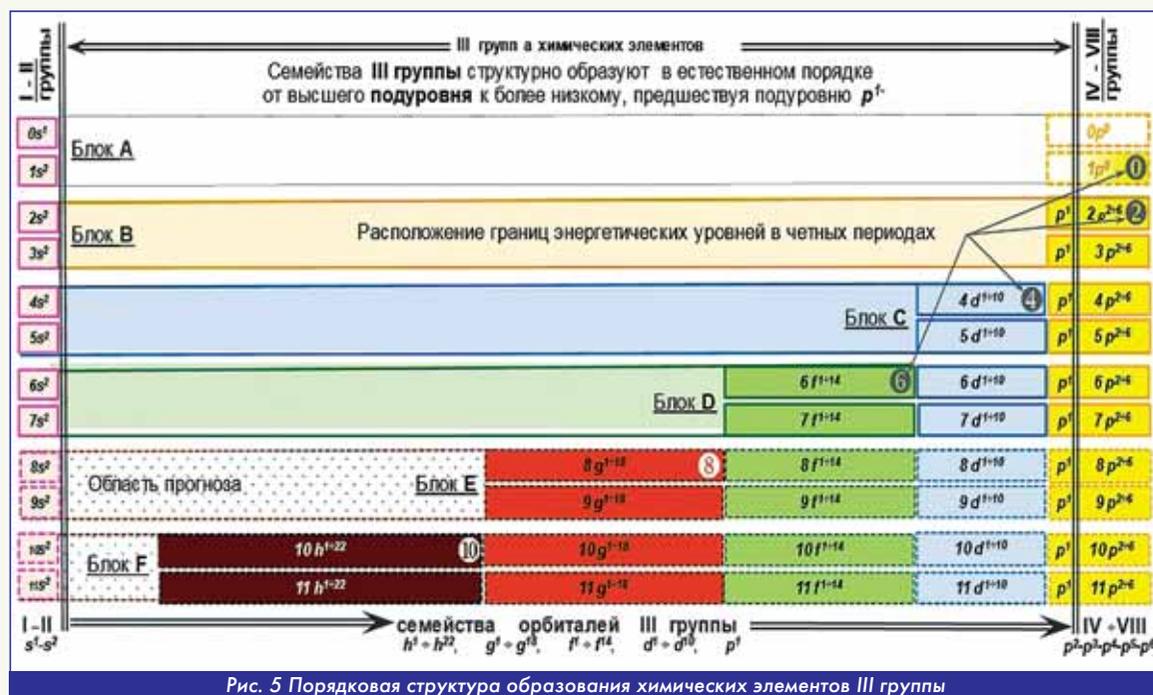


Рис. 5 Порядковая структура образования химических элементов III группы

Придавая серьезное и ответственное отношение к указанным порядку и правилу, семейства $\{d^{10}\}$ энергетического уровня M размещаются между валентными семействами $4s^2 - 4p^1$ и $5s^2 - 5p^1$ парных периодов блока С, а невалентные семейства $\{f^{14}, d^{10}\}$ энергетического уровня N размещаются между валентными семействами $6s^2 - 6p^1$ и $7s^2 - 7p^1$ парных периодов блока D.

Вывод: феномен семейственности невалентных орбиталей состоит в их обоснованном расположении в общей группе III с непосредственным предшествованием элементам np^1 во всех энергетических уровнях.

Исторически сложившиеся нарушения привели к необоснованному размещению семейств $\{d^{10}\}$ в введенных дополнительно рядах "побочных элементов" и триадах металлов VIII группы периодических таблиц с нарушением фундаментального принципа восьмигруппной периодичности и полным несоответствием валентностей побочных элементов группам их принудительного размещения. Несответствие элементов главных и побочных подгрупп ярко

проявляются в крайних группах I и VII. Вынесение элементов f^{14} - семейств за пределы табличных форм также абсурдно и разрушительно. Представленная аргументация раскрывает феномен структурной химии, просуществовавший 150 лет!

СЕМЕЙСТВЕННЫЕ ПЕРИОДИЧЕСКИЕ МАТРИЦЫ

Созданный для устранения недостатков табличных форм, озвученный академиком Н.Н. Семеновым, метод **СПА**, позволил выявить универсальные функционалы семейств внешних валентных $\{s^2 - p^6\}$ и внутренних невалентных $\{d^{10} - f^{14} - g^{18} \dots\}$ орбиталей и представить в матричной форме универсальное свойство семейственности химических элементов периодической системы (рис. 6).

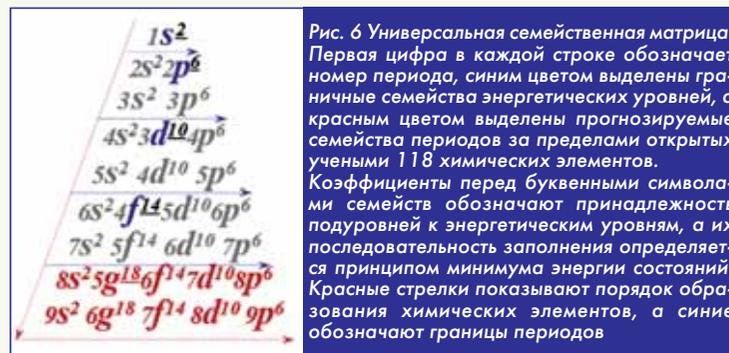


Рис. 6 Универсальная семейственная матрица. Первая цифра в каждой строке обозначает номер периода, синим цветом выделены граничные семейства энергетических уровней, а красным цветом выделены прогнозируемые семейства периодов за пределами открытых учеными 118 химических элементов. Коэффициенты перед буквенными символами семейств обозначают принадлежность подуровней к энергетическим уровням, а их последовательность заполнения определяется принципом минимума энергии состояний. Красные стрелки показывают порядок образования химических элементов, а синие обозначают границы периодов

Метод СПА, позволил выделить, начиная с парных периодов

блока В, общую каноническую структуру восьмигруппной валентности, что убедительно подтверждено выдающимся химиком профессором А.М. Бутлеровым (рис. 7) и другими авторитетными учеными.

Далее, во всех последующих периодах, помимо семейств с внешними валентными $\{ns^2, np^6\}$ орбиталями, представлен неизвестный ранее механизм образования внутренних невалентных орбиталей, относящийся к семействам элементов $\{nd^{10}\}$, располагающихся сразу после заполнения валентных орбиталей элементов ns^1 (группа I) и ns^2 (группа II), но перед химическими элементами первых валентных орбиталей np^1 -

семейств np^6 (группы II - VIII). Черным цветом выделены периоды уже открытых 118 элементов, а красным прогнозируемые периоды.

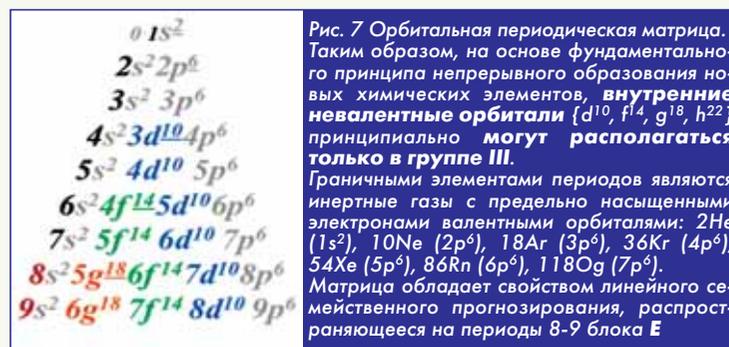


Рис. 7 Орбитальная периодическая матрица. Таким образом, на основе фундаментального принципа непрерывного образования новых химических элементов, внутренние невалентные орбитали $\{d^{10}, f^{14}, g^{18}, h^{22}\}$ принципиально могут располагаться только в группе III. Граничными элементами периодов являются инертные газы с предельно насыщенными электронами валентными орбиталями: 2He ($1s^2$), 10Ne ($2p^6$), 18Ar ($3p^6$), 36Kr ($4p^6$), 54Xe ($5p^6$), 86Rn ($6p^6$), 118Og ($7p^6$). Матрица обладает свойством линейного семейственного прогнозирования, распространяющееся на периоды 8-9 блока E

Семейственные периодические матрицы строго соответствуют всем законам и закономерностям классической химии, на ко-

торых построены табличные формы, при этом, они позволяют наглядно представлять особенности и анализировать **структурные механизмы** системы химических элементов. Одним из основных аналитических параметров структурных исследований являются **граничные** элементы в системе понятийных координат - восьмигруппной валентной периодичности и семейственной энергетической цикличности.

Граничными элементами энергетических уровней являются предельно заполненные электронами валентные орбитали **первородного 2He (1s²)** блока **A** энергетического уровня **K** и четного **канонического** периода № 2 **10Ne (2p⁶)** блока **B** уровня **L**, а также предельно заполненные электронами невалентные орбитали **четных постканонических** периодов № 4 - **30Zn (3d¹⁰)** блока **C** уровня **M** и № 6 - **70Yb (4f¹⁴)** блока **D** уровня **N** из числа открытых учеными 118 химических элементов.

И предиктивно, в трех прогнозируемых методом **СПА прогрессивно расширяющихся периодах** (рис. 8) еще не открытых химических элементов: № 8 - **138Yn / Иний (5g¹⁸)** блока **E** уровня **O** в честь мирового мецената профессора **Самуэля И-Л Ина**, № 10 - **242Gu / Гусений (6h²²)** блока **F** уровня **P** в честь выдающегося инженерного творца профессора **Бориса В. Гусева**, и №12 - **390An / Анатолий (7q²⁶)** блока **G** уровня **Q**. Названия структурно обоснованных элементов условные и предложены в знак благодарности спонсорам проводимых научных исследований.

Синими линиями выделены **орбитальные семейства** в пределах уже открытых химических элементов, красными линиями выделены прогнозируемые методом **СПА** семейства пока неизвестных химических элементов. Черной нумерацией справа обозначены **граничные семейства** и **энергетические уровни** системы химических элементов, подчеркнуты собственно орбитали граничных химических элементов энергетических уровней, перечисленные выше.

Орбитальные структурные **матрицы**, отображая природный физико-химический **дуализм** периодической системы элементов, в порядке подведения итогов интегративного анализа семейственности энергетических структур целесообразно представить в обычной табличной форме, отображающей суть креативного научного **открытия**, раскрывающего естественнонаучный **феномен** в фундаментальной области знаний (табл. 1).

Приведенная аргументация авторов научного метода **СПА** убедительно обосновала и последовательно подтвердила его эффективность в качестве инструментария раскрытия естественнонаучных **феноменов** в фундаментальной области структурной аналитической химии.

Структурный анализ последовательности заполнения орбиталей в блоках парных периодов, ведущей к непрерывно-циклическому заполнению энергетических уровней, наглядно демонстрирует прогрессивный порядок формирования орбиталей химических элементов чётных периодов с завершением энергетического уровня в каждом из них (подчеркнуто), при этом, в нечётных парных периодах наблюдается прогрессивный опережающий рост количества заполняемых энергетических уровней по отношению к заполненным (0 для А; 1/3 для В; 2/5 для С; 3/7 для D; 4/9 для Е; 5/11 для F), выделено красным цветом в таблице 2.

Одним из инструментов сравнительного

структурного анализа являются **Объёмные развертки периодических матриц** короткопериодной системы химических элементов Д.И. Менделеева и длиннопериодной орбитальной системы химических элементов IUPAC с позиционированием семейств лантаноидов и

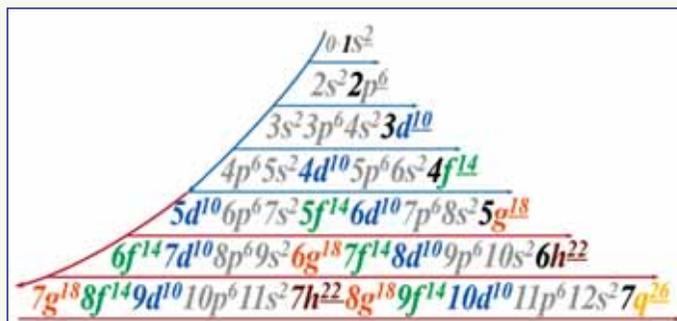


Рис. 8 Орбитальная энергоциклическая матрица

Групповая порядковая структура семейств элементов III группы

Период	Количество элементов	Группы	Орбитали
0	1	I	s
1	1	VIII	s
2	8	I - II, - III - IV - V - VI - VII - VIII	s, p
3	8	I - II, - III - IV - V - VI - VII - VIII	s, p, d
4	18	I - II, - d-III - IV - V - VI - VII - VIII	s, p, d
5	18	I - II, - d-III - IV - V - VI - VII - VIII	s, p, d, f
6	32	I - II, - f, d-III - IV - V - VI - VII - VIII	s, p, d, f
7	32	I - II, - f, d-III - IV - V - VI - VII - VIII	s, p, d, f, g
8	50	I - II, - g, f, d-III - IV - V - VI - VII - VIII	s, p, d, f, g
9	50	I - II, - g, f, d-III - IV - V - VI - VII - VIII	s, p, d, f, g, h
10	72	I - II, - h, g, f, d-III - IV - V - VI - VII - VIII	s, p, d, f, g, h
11	72	I - II, - h, g, f, d-III - IV - V - VI - VII - VIII	s, p, d, f, g, h
12	98	I - II, - q, h, g, f, d-III - IV - V - VI - VII - VIII	s, p, d, f, g, h, q
13	98	I - II, - q, h, g, f, d-III - IV - V - VI - VII - VIII	s, p, d, f, g, h, q

Таблица 1

Завершенные и заполняемые орбитальные структуры Блочных периодов

Блок	Порядок периодического заполнения орбиталей химических элементов															
	периоды четные (первые в блоке)					периоды нечетные (вторые в блоке)										
A	s ¹	1-й заполняемый энергетический уровень				0-1	s ²	1-й завершённый энергетический уровень								
	K					I	K									
B	s	s	2 завершённых энергетических уровня		2, 3	s	s	3-й заполняемый энергетический уровень								
	K	L			2	K	L	M								
C	s	s	p	s	3 завершённых энергетических уровня	4, 5	s	s	p	s	4-й и 5-й заполняемые энергетические уровни					
	K	L	M	N	3	K	L	M	N	O						
D	s	s	p	s	4 завершённых энергетических уровня (ЭУ)	6, 7	s	s	p	p	s	5-й, 6-й и 7-й заполняемые энергетические уровни				
	K	L	M	N	O	4	K	L	M	N	O	P	Q			
E	s	s	p	s	5 завершённых ЭУ	8, 9	s	s	p	p	s	6-9 заполняемые ЭУ				
	K	L	M	N	O	5	K	L	M	N	O	P	Q	R	X	
F	s	s	p	s	10, 11	s	s	p	p	s						
	K	L	M	N	O	6	K	L	M	N	O	P	Q	R	X	Y

Таблица 2

актиноидов. Интеллектуальные инструменты структурного порядкового анализа позволили исполнить завещание Н.Н. Семенова в части устранения недостатков табличных форм в виде развертки Орбитально-групповой энергоциклической объемной матрицы периодической системы химических элементов (рис. 9).

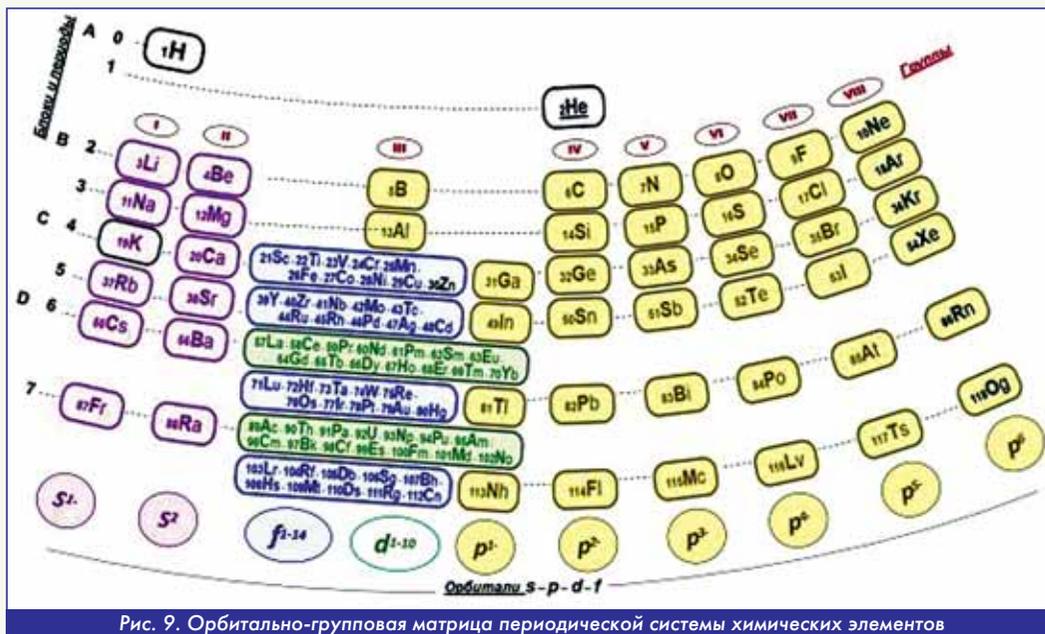


Рис. 9. Орбитально-групповая матрица периодической системы химических элементов

ОБЩИЙ ВЫВОД. Преодолев полуторавековое доминирование феноменальных заблуждений, породивших системные недостатки табличных форм, авторам удалось приблизиться к созданию интеллектуального инструментария структурного порядкового анализа и эмерджентного синтеза новых материалов.

ПОНЯТИЙНЫЙ АППАРАТ СТРУКТУРНОГО ПОРЯДКОВОГО АНАЛИЗА

Основу примененного понятийного аппарата составляют общепринятые определения и новые термины, отражающие лингвистические пристрастия авторов.

1. Понятие ПЕРИОД, породившее термин ПЕРИОДИЧНОСТЬ (введен в научный обиход благодаря Д.И. Менделееву) является фундаментальным для системы химических элементов и обозначает "свойство регулярной повторяемости валентных структур двух внешних орбиталей химических элементов, как частный случай чего-либо или какого-либо явления повторяющегося характера" в определенной устойчивой научно обоснованной последовательности.

Физический смысл химической периодичности обусловлен устойчивой закономерностью повторения конфигурации электронов внешнего энергетического уровня атомов по мере увеличения заряда ядра, благодаря которой реализуется также фундаментальное свойство системы химических элементов ВАЛЕНТНОСТЬ - "способность устойчивого соединения однородных и/или определенных разнородных атомов химических элементов в стабильные молекулы вещества".

Периодическая парадигма системы химических элементов основана на природном свойстве линейного соответствия ПОРЯДКА наращивания протонно-нейтронной структуры ядер и линейно-орбитальной структуры заполнения электронами ядерных оболочек при всеобщем устойчивом принципе МИНИМУМА энергетического баланса элементов и соединений. Фундаментальная закономерность образования новых физико-химических свойств химических элементов кроется в устойчивой периодичности строения электронных оболочек атомов.

2. БЛОЧНОСТЬ - фундаментальная устойчивая закономерность парной идентичности периодических орбитальных структур, сопряженных в парах четного и нечетного периодов в естественной природной последовательности образования химических элементов, за исключением начального укороченного неструктурированного периода.

рированного периода.

Закон блочности справедлив для всех табличных и объемно-матричных форм периодического закона как метод структурирования попарно единообразных периодов орбитально устроенных электронных оболочек химических элементов. Позволяет дедуктивно обоснованно распространять известные законы и закономерности образования в нормальных земных условиях 118 известных химических элементов на предиктивный анализ ещё неизвестных физико-химических элементов любых энергетических уровней.

Понятие блочности структурирует порядковый ПРОГНОЗ образования новых, ещё неизвестных ученым, химических элементов представляется естественно-научным методом познания материального мира, расширяющим возможности углубления научных знаний о среде обитания и жизнедеятельности человека.

3. ОРБИТАЛЬ - структурно-выраженный функционально-групповой энергетический подуровень электронной оболочки ядра, объединяющий химические элементы по принципу схожести, подобия или соответствия какой-либо химической характеристике и/или физическому свойству. Известная количественная и содержательная закономерность, по которой из подуровней формируются энергетические уровни.

Общепринятая функциональная классификация орбиталей, за пределами особого укороченного предканонического блока А, выглядит следующим образом:

А) s^1, s^2 - сигнальные валентные орбитали химических элементов групп I и II в порядковой блочной (парной) структуре каждого периода конкретных энергетических уровней свидетельствует о завершенности предшествующего периода и являются индикатором начала нового по отношению к предшествующему периоду "s-пара" образует сигнальное $\{s^1, s^2\}$ моновалентное образование из двух химических элементов - двухгруппное "семейство".

Б) $p^1, p^2, p^3, p^4, p^5, p^6$ - внешние валентные орбитали химических элементов групп III, IV, V, VI, VII и VIII в порядковой блочной структуре каждого периода конкретного энергетического уровня свидетельствуют о степени заполняемости текущего периода; предельное заполнение орбитали p^6 свидетельствует о завершенности текущего периода и является предвестником и s-индикатором образования следующего периода; "p-секстет" демонстрирует устойчивое поливалентное образование из шести химических элементов - шестигруппное "семейство" $\{p^1, p^2, p^3, p^4, p^5, p^6\}$ в каждом периоде всех энергетических уровней; предельное заполненная семейственная "s²-p⁶-пара" блочной структуры В являет собой восьмигруппный восьмиэлементный КАНОНИЧЕСКИЙ период, который можно считать "исходным, обязательным, твердо установленным и принять за норму или образец", на основе которого происходит структурирование всех последующих блочных периодов периодической системы.

В) $d^1, d^2, d^3, d^4, d^5, d^6, d^7, d^8, d^9, d^{10}$ - внутренние невалентные орбитали химических элементов группы III, предшествующие p^1 -орбитали в порядковой блочной структуре каждого периода конкретного энергетического уровня, формируют разной степени заполняемость текущего энергетического подуровня; предельное заполнение орбитали d^{10} отражает состояние завершенности текущего d-подуровня и является предвестником начала заполнения орбитали p^6 группы III в порядковой блочной

структуре каждого периода конкретного энергетического уровня; "*d*-декада" демонстрирует в Объёмной периодической матрице **первое устойчивое невалентное образование** из десяти химических элементов $\{d^1, d^2, d^3, d^4, d^5, d^6, d^7, d^8, d^9, d^{10}\}$ - одногруппное обособленное **СЕМЕЙСТВО** химических элементов группы III в каждом периоде всех энергетических уровней, начиная с двух "постканонических" периодов блока С.

Г) Авторским методом Структурного порядкового анализа (СПА), с опорой на **фундаментальную структуру семейственности**, обнаружена универсальная матричная системность: физико-химический дуализм демонстрирует, с одной стороны, **физичность** "энергетических уровней", с другой стороны, **химизм** "валентной периодичности", при этом совпадение границ уровней и периодов обнаружено только в четных периодах усеченного блока А одноэлементных парных периодов 0 - 1 и полноценного блока В парных канонических восьмизлементных восьмигруппных периодов 2 - 3.

Д) $f^1, f^2, f^3, f^4, f^5, f^6, f^7, f^8, f^9, f^{10}, f^{11}, f^{12}, f^{13}, f^{14}$ - внутренние невалентные орбитали химических элементов группы III, предшествующие d^1 -орбитали в порядковой блочной структуре каждого периода третьего энергетического уровня и, продолжая механизм В), формируют разной степени заполняемость текущего энергетического подуровня; предельное заполнение орбитали f^{14} семейства **лантаноидов** отражает состояние завершенности текущего *f*-подуровня и является предвестником начала заполнения орбитали d^{10} группы III в порядковой блочной структуре каждого периода текущего энергетического уровня; "*f* - семейство" демонстрирует в Объёмной матрице **второе устойчивое невалентное образование** из четырнадцати элементов $\{f^1, f^2, f^3, f^4, f^5, f^6, f^7, f^8, f^9, f^{10}, f^{11}, f^{12}, f^{13}, f^{14}\}$ - одногруппное обособленное **семейство** химических элементов группы III в каждом периоде всех энергетических уровней, начиная с двух "постканонических" периодов последнего блока Д открытых учеными химических элементов.

Методом структурного **ретро-анализа** подтверждена **ИН-ВЕРСИЯ** порядка образования структуры из двух обособленных **семейств** химических элементов группы III: после заполнения электронами орбиталей s^2 , по мере образования новых химических элементов четного периода 6, начинается заполнение электронных оболочек старшего энергетического подуровня f^{14} , его полное завершение приходится на элемент $70Yb$, затем происходит последовательное заполнение орбитали более низкого энергетического подуровня d^{10} , заполнение орбитали p^1 группы III с переходом к структуре Б) четвертого энергетического уровня и далее к образованию периода 7, содержащего семейство **актиноидов** блочной структуры Д.

На этом завершается ретро-анализ 118-элементной системы открытых учеными химических элементов, на основании чего, с использованием апробированного метода СПА, возможно обосновано перейти к **фьючерс-анализу** гипотетически структурно понятного блочного уровня Е.

Е) $g^1, g^2, g^3, g^4, g^5, g^6, g^7, g^8, g^9, g^{10}, g^{11}, g^{12}, g^{13}, g^{14}, g^{15}, g^{16}, g^{17}, g^{18}$ - **внутренние невалентные орбитали** химических элементов группы III, предшествующие f^1 -орбитали в порядковой блочной структуре каждого периода конкретного энергетического уровня и, продолжая механизм Г), формируют разной степени заполняемость текущего энергетического подуровня; предельное заполнение орбитали g^{18} отражает состояние завершенности текущего *g*-подуровня и является предвестником начала заполнения орбитали f^{14} группы III в порядковой блочной структуре каждого периода конкретного энергетического уровня.

В порядке предиктивного структурного анализа "*g*-семейство" демонстрирует в Объёмной матрице **третье устойчивое невалентное образование** из 18 элементов $\{g^1, g^2, g^3, g^4, g^5, g^6, g^7, g^8, g^9, g^{10}, g^{11}, g^{12}, g^{13}, g^{14}, g^{15}, g^{16}, g^{17}, g^{18}\}$ - одногруппное обособленное **семейство** химических элементов группы III в каждом периоде всех энергетических уровней, начиная с двух "постканонических" периодов последнего блока Е ещё не открыты учеными химических элементов.

Методом структурного **фьючерс-анализа** формируется **ИН-**

ВЕРСИЯ порядка образования структуры из трех обособленных **семейств** химических элементов группы III: после заполнения электронами орбиталей s^2 по мере образования новых химических элементов четного периода 8, начинается заполнение электронных оболочек старшего энергетического подуровня g^{18} , его полное завершение приходится на прогнозируемый элемент $138Yn$, затем происходит заполнение орбиталей f^{14} и d^{10} , после чего происходит заполнение орбитали p^1 группы III с переходом к структуре Б) четвертого энергетического уровня и далее к образованию периода 9 блочной структуры Е. На этом завершается фьючерс-анализ первого прогнозируемой блочной структуры Е будущих химических элементов.

4. **ВАЛЕНТНОСТЬ** - способность однородных и/или определенных разнородных атомов химических элементов объединяться в устойчивые соединения стабильных молекул вещества.

5. **СЕМЕЙСТВЕННОСТЬ** - фундаментальный структурно-выраженный механизм объединения в устойчивое функционально-групповое сообщество смежных химических элементов общей невалентной орбитали по принципу схожести, подобия или соответствия.

6. Как выяснилось, граничным в уровне является последний элемент высшего энергетического подуровня (орбитали), он же последний элемент **нового семейства** в первом четном периоде блока. Процесс заполнения внутренних электронных оболочек семейств, в отличие от заполнения внешних валентных орбиталей типа а) и б), следует, в соответствии с их функционалом, именовать как **ЦИКЛИЧНОСТЬ** - свойство закономерного последовательного заполнения электронами невалентных орбиталей оболочек семейств группы III химических элементов. **Цикличность** - свойство закономерного последовательного заполнения электронами невалентных орбиталей оболочек семейств химических элементов группы III.

7. Научно-практический метод **СПА**, примененный к понятию цикличность, позволил обнаружить новый **ФЕНОМЕН семейственности**: пока идет образование новых элементов путем последовательного электронного заполнения внутренних невалентных орбиталей **семейства**, правомерно характеризовать процесс как цикличность, но с момента предельного заполнения электронами высшей орбитали семейства перестает быть цикличным и становится **пассивным** не только в смысле валентного химизма, но и в смысле энергетической физичности.

При этом, предельно незаполненные электронами невалентные орбитали более низкого подуровня остаются цикличными до их предельного насыщения электронами; таков смысл фундаментального механизма семейственности в качестве повода обоснованного переосмысления господствующего взгляда на рядность, коротко- и длиннопериодичность всех химических таблиц.

8. **КАНОНИЧНОСТЬ** - общая порядковая основа и восьмигруппная структурированная общая часть периодов химических элементов, расположенных по одному в каждой валентной группе, предельно заполняемая электронами семейственной валентной пары ($s^{2+} - p^6$) блочной структуры В, являющейся валентообразующей частью всех химических элементов постканонических периодов.

9. **ГРАНИЧНОСТЬ** - порядковый параметр, отражающий матричную фундаментальность физико-химического дуализма **физичности** "энергетических уровней" и **химизма** "валентной периодичности", принципиально не совпадающие во всех постканонических периодах Объёмной матрицы.

Начиная с блока С, во всех последующих блочно-периодических структурах **ГРАНИЧНОСТЬ** энергетических уровней и периодов **принципиально не совпадают**, поскольку граничным замыкающим элементом периода является химически нейтральный инертный газ (по два в блоке), а граничным замыкающим элементом уровня является элемент с предельным электронным заполнением орбиталей всех структурно присутствующих подуровней.

10. **ИНВЕРСИЯ** невалентных орбитальных структур - порядковое свойство образования электронно-уровневых структур обо-

собленных семейств химических элементов группы III, при котором после заполнения электронами орбиталей s^2 групп I и II, по мере образования новых химических элементов блочных постканонических периодов, начинается заполнением электронных оболочек старшего энергетического подуровня до его полного завершения, затем происходит последовательное заполнение орбиталей более низких энергетических подуровней, предшествующих валентным орбиталам s^6 групп с III по VIII.

Помимо лингвистического упорядочивания научной новизны структурного порядкового анализа, предлагается компактное информационное структурирование функционалов химических элементов в виде тождества с условными обозначениями:

- а) Я - протонно-нейтронный энергетический функционал (и структура) ядра атома;
- б) У - граничный функционал заполненной электронами структуры энергетического или периодического уровня;
- в) Ц - функционал циклического заполнения внутренних невалентных орбиталей семейств III группы;
- г) В - функционал групповой периодичности заполнения валентных s^2 - и p^6 -орбиталей.

Обобщенная краткая форма ядерно-орбитальных функционалов любого химического элемента может быть представлена в универсальном виде:

$$\text{Функционалы химического элемента} \equiv \{Я + У(Ц + В)\}$$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ:

Связь между электронной структурой вещества или материала и его функциональным поведением - проблема фундаментальной важности. Её научно обоснованное решение открывает возможность предсказания и синтеза свойства, функции и назначения вещества по его многомерной полиорбитальной гомеостатической модели ядерно-оболочечной протонно-нейтронно-электронной структуры. Модельный дизайн Орбитально-групповой объемной матрицы периодической системы химических элементов представлен на рис. 10.

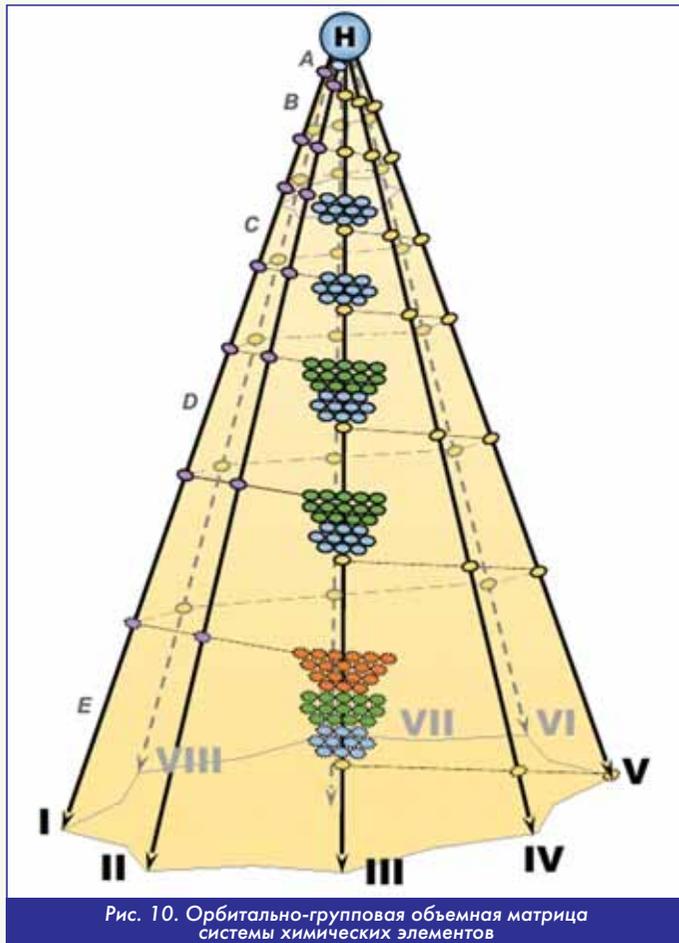


Рис. 10. Орбитально-групповая объемная матрица системы химических элементов

Собран **гlossарий** формирования инновационного метода Структурного порядкового анализа вместе с Обобщенными универсальными ядерно-орбитальными моделями химических элементов, дополненный факторами ретро-анализа открытых химических элементов и пролонгированным фьючерс-анализом ещё не открытых химических элементов. Глоссарий объединяет системный ряд научно-философских междисциплинарных понятий и терминов:

Новые наукоёмкие понятия:

- Структурно-аналитическая химия,
- Объемная периодическая матрица химических элементов,
- Физичность "энергетических уровней",
- Химизм "валентной периодичности",
- Структурный порядковый анализ,
- Электронно-уровневый и ядерно-орбитальный функционалы (формулы),
- Цикличность внутренних невалентных орбиталей,
- Феномен групповой семейственности,
- Орбитально-групповая объемная матрица химических элементов,
- Гомеостатический синтез креативных материалов будущего,
- Эмерджентность фундаментальных научных знаний о веществе.

Междисциплинарные базовые научные термины:

структура, симметрия, свойства, состояния, мерность, материя, модель, ядро, масса, электрон, заряд, атом, молекула, вещество, энергия, гомеостаз, трансформации, закономерности, непрерывность, функциональность, устойчивость, расходимость, ретро-анализ и фьючерс-прогноз, гармония, асимметричность, последовательность, активность, сигнальность, пассивность.

Фундаментальные свойства:

СТРУКТУРНОСТЬ, ПЕРИОДИЧНОСТЬ, БЛОЧНОСТЬ, ГРУППА, ВАЛЕНТНОСТЬ, КАНОНИЧНОСТЬ, ЧЕТНОСТЬ, ЦИКЛИЧНОСТЬ, ОРБИТАЛЬ, СЕМЕЙСТВЕННОСТЬ, ГРАНИЧНОСТЬ, УРОВНИ, ПОЛИОРБИТАЛЬНОСТЬ, ПОРЯДОК, ИНВЕРСИЯ, ФЕНОМЕН, ДУАЛИЗМ, ПОРЯДОК, ЭНТАЛЬПИЯ, ЭНТРОПИЯ, ХАОС, ПЕРВОРОДНОСТЬ, ОТКРЫТИЕ, ИНВЕРСИЯ, ПРОТОН, НЕЙТРОН, СИНТЕЗ, МАТРИЦА, ЭМЕРДЖЕНТНОСТЬ.

Литература

1. Гусев Б.В., Сперанский А.А. и др. Законы объемной периодичности в строении физико-химических элементов и адаптивное материаловедение // Техника и технологии силикатов.- 2016, № 2, с. 23-31.
2. Гусев Б.В., Сперанский А.А. и др. Научно-технологические инструменты устойчивого развития общества // Двигатель, М., 2015, № 4 (100), с. 50-55.
3. Гусев Б.В., Сперанский А.А. и др. Исследование проблем периодичности в строении химических элементов // Строительные материалы, оборудование, технологии XXI века. 2016, № 7-8, с. 46-49.
4. Гусев Б.В., Сперанский А.А. и др. Сигнальный механизм объемной матричной периодичности химических элементов // Двигатель, М., 2018, № 1, с. 6-12. + 7 совместных публикаций в 2018 г.
5. Сперанский А.А., Сперанская Т.Г. Особые элементы, группы и кластеры объемной периодической матрицы химических элементов // 13 марта 2018 г., реестр № 77/798-н/77-2018-6-144.
6. Сперанский А.А., Сперанская Т.Г. Электронно-уровневые инструменты структурного анализа периодичности химических элементов // 6 февраля 2019 г., реестр № 77/798-н/77-2019-2-151.
7. Сперанский А.А., Сперанская Т.Г. и др. Протонно-орбитальный аппарат структурного анализа химических элементов // 25 марта 2019 г., реестр № 77/798-н/77-2019-2-436.
8. Сперанский А.А., Сперанская Т.Г. Соответствие блочных структур, периодов и энергетических уровней объемной матрицы химических элементов, 3 стр. // 30 ноября 2020 г., реестр № 77/798-н/77-2020-10-662.
9. Сперанский А.А., Сперанская Т.Г. Объемная матрица химических элементов. Структурный порядковый анализ и прогноз, 108 стр. // 30 ноября 2020 г., реестр № 77/798-н/77-2021-2-41.

P.S.

Благодарности авторов за реальную поддержку и понимание:

Президенту Российской (РИА) и Международной (МИА) инженерных академий, Президенту благотворительного фонда поддержки инженерного творчества "Инженерная мысль" профессору **Борису В. Гусеву**; выдающемуся Меценату, Президенту Ruentex Engineering & Construction Co. Ltd., почетному Президенту МИА профессору **Самуэлю И-Л Ину**; Президенту международной Ассоциации "Знание" со статусом NGO UN, вице-президенту Международной академии аэронавтики и МИА, профессору **Ефиму М. Малитикову**; академикам РИА и МИА **Александрю И. Бажанову**, профессору **Владимиру С. Боголюбову**, доктору **Юрию А. Галушкину**, профессору **Владимиру М. Дубовику**, профессору **Андрею И. Звездову**, профессору **Владимиру А. Зеленкову**, профессору **Дмитрию Н. Левицкому**, профессору **Салиму Г. Мифтахутдинову**, доктору **Александрю И. Овчинникову**, профессору **Валерию Н. Умникову**, профессору **Александрю А. Цернанту**, профессору **Вячеславу Р. Фаликману**, профессору **Александрю К. Шрейберу**, профессору **Леониду С. Яновскому**.

Финансирование: Авторы признают отсутствие государственного финансирования научных исследований. Работа поддержана Благотворительным фондом поддержки инженерного творчества "Инженерная мысль" РИА и Международным институтом антропогенной безопасности (МИАБ), Белград.

Авторский вклад:

A.C.:

1. Выдвижение фундаментальной **научной идеи** устранения недостатков табличных форм периодической системы элементов, озвученных Нобелевским лауреатом академиком Н.Н. Семеновым.
2. Теория **метода структурного порядкового анализа и синтеза** новых элементов.
3. **Структурные проблемы** табличных форм.
4. Метод **блочного структурирования** идентичности парных периодов.
5. Научное обоснование формульной структуры **Электронно-уровневых функционалов** оболочек атомов.
6. Научное обоснование формульной структуры **Ядерно-орбитальных функционалов** атомов химических элементов.
7. Явление **Цикличность внутренних невалентных орбиталей** оболочки ядра.
8. Теория **уровневой семейственности** химических элементов.
9. Феномен **групповой семейственности** канонического периода.
10. Дизайн **порядковой семейственной структуры** III группы.
11. Теория **полиорбитальной цикличности** элементов III группы.
12. Структура универсальной **формульной модели** химических элементов.
13. Дизайн Универсальной **семейственной матрицы**.
14. Дизайн **Орбитальной периодической матрицы**.
15. Дизайн **Орбитальной энергоциклической матрицы**.
16. **Орбитально-групповая матрица** периодической системы элементов.
17. Ретроспектива знаний о **структурах энергетических функционалов**.

18. Фундаментальный принцип **обратной инверсии** внутренних орбиталей.

19. Принципы **Гомеостатического синтеза** креативных материалов будущего.

20. **Математический инструментарий** структурного порядкового анализа.

21. **Граничные функционалы** групповых периодов и энергетических уровней.

T.C.:

1. **Феноменологический подход** в качестве инструментально-го метода познания.

2. Разработка дизайна поликоординатной модели **Объемной периодической матрицы химических элементов**.

3. Философское обоснование лингвистического дуализма "Химизм валентно-групповой периодичности" \Leftrightarrow "Физичность энергетических уровней".

4. Междисциплинарность **гомеостатических наблюдений** процессов и состояний.

5. **Логические построения** по исполнению призывов Н.Н. Семенова.

6. **Эмерджентность фундаментальных научных знаний** о веществе.

7. **Понятийно-лингвистический аппарат** прорывных научных исследований.

8. **Глоссарий новых понятий** и базовой научной терминологии.

9. Графическое оформление креативных **результатов научных исследований**.

10. Дизайн **натурной модели Орбитально-групповой матрицы**.

Авторы совместно обсуждали и комментировали все полученные результаты.

Конкурирующие интересы: Авторы заявляют, что у них нет конкурирующих интересов, включая нотариально зарегистрированные авторские права.

Доступность данных и материалов: Обработанные данные, подтверждающие выводы исследований, приведены в рукописи. Исходные данные, полученные в ходе работы, доступны от соответствующего автора по разумному запросу. Все данные, необходимые для оценки выводов, содержащихся в статье, присутствуют в самой статье и/или дополнительных материалах, опубликованных журналами "Двигатель" и "Русский инженер", зарегистрированных в Высшем аттестационном комитете РФ. Дополнительные данные, относящиеся к данной работе, запрашиваются у авторов.

Copyright © Сперанские Анатолий Алексеевич и Татьяна Геннадьевна, декабрь 2020 года.

Отдельные авторские права защищены нотариально.

Эксклюзивные лицензиары издания "Орбитально-групповая объемная матрица периодической системы химических элементов" Международный институт антропогенной безопасности в Белграде и Институт структурной химии и новых конструкционных материалов РИА. Распространяется под некоммерческой лицензией МИАБ. Никаких претензий к оригинальным работам правительства РФ.

P.P.S.

Структурный порядковый анализ позволяет поддержать научную гипотезу о **первородности водорода** в изотопной **комбинаторике с нейтронами** в качестве физической основы периодичности элементообразования. Принимая систему условных обозначений $\{p^+$ - протон; n^0 - нейтрон; m - атомная масса; e^- - электрон; Σ - знак суммарного количества функциональных частиц; \mathcal{N} - порядковый номер элемента; $\mathcal{N}^{\#}$ - номер блочной пары элементов, равен половине порядкового номера четного элемента ($\mathcal{N}^{\#}:2$), получаем систему уравнений массово-энергетического баланса ядра атома:

- первое порядковое уравнение энергетического баланса атома: $\mathcal{N} \equiv \Sigma_N p^+ = \Sigma_N e^-$;

- второе порядковое уравнение массового баланса атома: $\Sigma_N n^0 = m_N - \Sigma_N p^+$;

- третье уравнение структурного баланса атомов нечетных элементов: $\mathcal{N} p^+ + (m_N - \mathcal{N}) n^0$;

- четвертое уравнение структурного баланса атомов четных элементов: $2\mathcal{N} p^+ + (m_N - \mathcal{N}) n^0$.

Первородность водорода ${}^1\text{H} \equiv 1p^+$ с дополнительной комбинаторикой нейтронов n ($\Sigma p^+ = \Sigma e^-$) допускает природный синтез любых химических элементов системы.

Copyright © Сперанский Анатолий Алексеевич