620.1.098:530.145

ВЫЯВЛЕНИЕ ВЗАИМОСВЯЗИ ШКАЛ, ХАРАКТЕРИЗУЮЩИХ КОЛИЧЕСТВЕННЫЕ И КАЧЕСТВЕННЫЕ СВОЙСТВА СЛОЖНЫХ ОБЪЕКТОВ, НА ОСНОВЕ НУМЕРАЦИИ

Л. К. ИСАЕВ*, С. Л. ЧЕРНЫШЕВ**

**Всероссийский научно-исследовательский институт метрологической службы, Москва, Россия*

***Российский государственный технологический университет им. К. Э. Циолковского, Москва, Россия, e-mail: nature@front.ru*

Показано, что взаимосвязь между шкалами, характеризующими количественные и качественные свойства сложных объектов, может быть выявлена с использованием нумерующих функций, которые устанавливают взаимно однозначное соответствие неотрицательного целого числа и многомерного вектора с неотрицательными целочисленными компонентами.

Ключевые слова: *шкалы величины, наименования и разностей (интервалов), квантовые и фигурные числа, матрица квантовых измерений, нумерующие функции.*

It is shown that inter connection between the scales characterizing the quantitative features and the scales determining the qualitative features of complex objects can be revealed by means of enumeration functions establishing the mutually univocal correspondence of nonnegative integer number and multidimensional vector with nonnegative integer components.

Key words: *scales of value, names and interval, quantum and figure numbers, quantum measurements matrix, numeration functions.*

Теория шкал позволяет сопоставлять конкретные материальные и числовые системы, характеризуя не только количественные, но и качественные свойства сложных объектов [1, 2]. Так, порядковый номер элемента может быть приписан определенному химическому элементу, а соответствующий геометрический образ – физико-химической модели атома вещества, т. е. наименьшей части химического элемента, являющейся носителем его свойств. Поскольку атом – сложный объект, то его химические, физические и другие свойства могут характеризоваться не одной, а сразу несколькими различными шкалами, описывающих как количественные, так и качественные свойства, например, особенности атомной структуры или принадлежность к определенной группе симметрии.

Другим примером сложного объекта, объединяющего в себе количественные и качественные свойства, является цвет. Это одно из свойств объектов материального мира, воспринимаемое как осознанное зрительное ощущение. Известно, что цветовое ощущение может возникать без воздействия лучистого потока на глаз: при давлении на глазное яблоко, ударе, электрическом раздражении, а также в результате работы воображения. Шкалы измерений цвета – это шкалы наименований, упорядоченные по признаку близости (сходства) цветов. В стандартной трехкоординатной колориметрической системе две координаты – цветовой тон (оттенок цвета) и насыщенность (уровень проявления цветового тона) носят качественный характер, а третья координата соответствует количественной характеристике – светлоте (уровню яркости), описываемой аддитивной шкалой отношений [2].

Одна из сфер применения определенных шкал или систем шкал – распознавание сложных объектов. Подобные объекты возникают в процессе эволюции в результате специфических реакций на неспецифические воздействия окружающей среды. Отметим, что обобщенные представления о таком воздействии взаимосвязаны с процессом измерения. Моделирование измерений–воздействий [3] приводит к матрицам квантовых измерений и фигурным числам, на основе которых могут быть построены нумерующие функции. Такие функции устанавливают взаимно однозначное соответствие объектов, которые в одной шкале (например, шкале разностей или отношений) характеризуются порядковым номером, а в другой – многомерным вектором или кортежем с неотрицательными целочисленными компонентами, связанным с определенным наименованием (например, с названием атома или цветом). Ниже будет показано, что нумерующие функции представляют связующее звено между шкалами, характеризующими количественные и качественные свойства сложных объектов.

Построение шкал наименований с использованием квантовых чисел. Классификация атомов, приводящая к водородоподобной системе, основана на значениях четырех квантовых чисел: главного n, орбитального l, магнитного m_l и спинового m_s. Параметр l принимает значения 0, 1, ..., $n - 1$; m_l пробегает все целые значения, не превышающие l по модулю; $m_s = \pm 1/2$. Значения квантовых чисел взаимосвязаны с определенными числовыми последовательностями. Арифметическая прогрессия $Z_1(n)$ с общим элементом $2(2n - 1)$ определяет количество электронов, расположенных на первой (s-электроны), второй (p-электроны), третьей (d-электроны), четвертой (f-электроны) и последующих орбитах или оболочках атома. Последовательность $Z_2(n)$ с общим элементом $2n^2$ показывает, сколько электронов может находиться на оболочке, характеризуемой главным квантовым числом n.

Сумма вида $2\sum_{i=1}^{i=n} i^2 = n(n+1)(2n+1)/3$ определяет суммарное количество электронов и, соответственно, порядковый номер нейтрального атома при полном насыщении на всех орбитах всех оболочек с главными квантовыми числами от 1 до n.

Общие элементы рассматриваемых квантовых числовых последовательностей обозначим $Z_D(n)$, где номер n элемента в последовательности равен значению главного квантового числа; D – максимальная степень числа n в выражении для общего элемента. Квантовые числовые последовательности могут быть представлены в виде фигурных чисел следующим образом [3]:

$$Z_D(n) = \Phi_D^1(n)\Delta_n^D\Phi_D^1(n),$$

где $\Phi_D^1(n)$ – числовое значение величины; $\Delta_n^D\Phi_D^1(n)$ – конечная разность степени D фигурных чисел вида $\Phi_D^1(n)$, равная 2 и представляющая значение единицы измерения.

Фигурные числа $\Phi_L^M(N)$ определяются как

$$\Phi_{L+1}^M(N) = \sum_{i=0}^{i=N} \Phi_L^M(i).$$

Здесь L, M, N – неотрицательные целые числа (L, M указаны в виде индексов), при этом $\Phi_L^M(0) = 0$; $\Phi_L^M(1) = 1$; $\Phi_0^M(N) = M + 1$ при $N > 1$. Значению $L = 1$ соответствуют фигурные числа на прямой (евклидово пространство размерностью 1); $L = 2$ – фигурные числа на плоскости; $L = 3$ – данные числа в трехмерном пространстве и т. д. Значение $M = 0$ соответствует треугольным числам, $M = 1$ – четырехугольным, а $M = 2$ – пятиугольным и т. д. Свойства плоских и трехмерных фигурных чисел рассмотрены в [4].

Величина D в выражениях для квантовых числовых последовательностей имеет смысл размерности пространства. Так, на основе решений уравнения Шредингера в D-мерном пространстве в [5] получена функция $g(l, D)$, определяющая свойства симметрии электронных оболочек атомов. Как отмечено в [3], эта функция может быть выражена фигурным числом $g(l,D) \equiv \Phi^1_{D-2}(l+1)$.

Водородоподобная система элементов представляет собой шкалу наименований, характеризующую качественные свойства, в которой атому (названию атома) ставится в соответствие определенное множество значений квантовых чисел. Если при заданном главном квантовом числе значения трех других квантовых чисел совпадают, то такие элементы (атомы) попадают в одну классификационную группу. Так, в первую группу водородоподобной системы входят водород, литий, натрий, медь и т. д., во вторую группу – гелий, бериллий, магний, цинк и т. д. [6].

В табл. 1 представлены обобщенные результаты классификации элементов в соответствии с водородоподобной системой. Количество классов эквивалентности (групп) элементов определяется функцией $g(l, D)$ и выражается соответствующим фигурным числом. Значения квантовых чисел для случая $D = 2$ приведены в соответствии с результатами, полученными в [5].

Количество групп элементов для заданного значения n определяется как $2\Phi^1_{D-1}(n) = 2\sum_{l=0}^{l=n-1}\Phi^1_{D-2}(l+1)$. Суммарное количество классифицируе-

Таблица 1

Классификация элементов на основе квантовых чисел

Степень шкалы D	Значения квантовых чисел	Количество групп для заданного значения		Суммарное количество элементов
		l	n	
2	$n = 1, 2, \ldots$ $l = 0, 1, \ldots, n-1$; $m_l = \pm l$; $m_s = \pm 1/2$	$2\Phi^1_0(l+1)$	$2\Phi^1_1(n)$	$2\Phi^1_2(n)$
3	$n = 1, 2, \ldots$ $l = 0, 1, \ldots, n-1$; $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l$; $m_s = \pm 1/2$	$2\Phi^1_1(l+1)$	$2\Phi^1_2(n)$	$2\Phi^1_3(n)$

мых элементов равно $2\Phi_D^1(n)=2\sum_{i=0}^{i=n}\Phi_{D-1}^1(i)$. Коэффициент, равный двум, во всех выражениях из табл. 1 обусловлен двумя значениями спинового квантового числа m_s=1/2. При неограниченном увеличении главного квантового числа суммарное количество классов эквивалентности (групп классифицируемых элементов) также неограниченно растет. Классификация элементов в соответствии с водородоподобной системой в $3D$ совпадает с Периодической системой элементов до 18-го элемента включительно, а в $2D$ – до 14 элемента включительно, согласно [5].

Построение шкал разностей для элементов, характеризуемых порядковым номером. Построение шкал может быть также основано на повторяющихся свойствах, например, на повторении разностей между двумя соседними числами отсчета (реперами) шкал [7]. Результаты классификации элементов, характеризуемых порядковыми номерами, приводящие к конечному числу классов эквивалентности, представлены в [8]. В двухмерном случае оно сводится к десяти классам эквивалентности (группам) элементов, а в трехмерном пространстве – к тридцати двум группам классифицируемых элементов. Причем в $3D$ воспроизводится Периодическая система элементов, изображенная в [9]. Совпадение с вариантом Периодической системы [5] для случая $2D$ обеспечивается до 30-го элемента включительно.

Основу данной классификации составляет система порядковых номеров-реперов, определяемых на основе квантовых числовых последовательностей. Каждому реперу шкалы поставлена в соответствие характеристика в виде положительной разности двух соседних реперов. Разность второго и первого реперов называется базовой и обозначается ρ_D. Характеристики первых реперов для D = 1, 2, 3 равны 2.

Реперы квантовой квадратичной шкалы $Z_2(n, l_n)$, построенной на основе квантовой числовой последовательности $Z_2(n)$, можно представить следующей формулой, численные значения которой приведены в табл. 2:

$$Z_2(n,l_n)=\begin{cases}2 \text{ при } n=1, l_n=0;\\ 2n^2-4(n-l_n-1) \text{ при } n=2,3,4..., l_n=1,2,3,...,n-1.\end{cases} \quad (1)$$

Таблица 2

Реперы квантовой квадратичной шкалы

n	Z_2 при l_n							
	0	1	2	3	4	5	6	7
1	**2**	–	–	–	–	–	–	–
2	–	**8**	–	–	–	–	–	–
3	–	14	**18**	–	–	–	–	–
4	–	24	28	**32**	–	–	–	–
5	–	38	42	46	**50**	–	–	–
6	–	56	60	64	68	**72**	–	–
7	–	78	82	86	90	94	**98**	–
8	–	104	108	112	116	120	124	**128**

Первый репер в табл. 2 представляет собой первый элемент квантовых числовых последовательностей и занимает особое положение: ему приписывается базовая характеристика. При этом все остальные реперы удается разделить на один ($D=1$), два ($D=2$) или три ($D=3$) класса в зависимости от значения характеристики репера вида ρ_D-2, ρ_D, ρ_D+2. В случае квантовой квадратичной шкалы базовая характеристика $\rho_2=6$. Полужирным шрифтом выделены значения $Z_2(n, l_n)=Z_2(n, n-1)=Z_2(n)$.

Классификационным признаком в построенной шкале служит разность порядкового номера элемента и ближайшего меньшего репера. Так, первые четыре группы элементов, обозначаемые (–1, 6), (0, 6), (1, 6), (2, 6), образуются на основе первого репера, равного 2, которому приписана базовая характеристика. Следующий репер, равный 8, с характеристикой ρ_2 позволяет определить шесть групп элементов: (–3, 6), (–2, 6), (–1, 6),(0, 6), (1, 6),(2, 6). Последние четыре группы из этих шести определяются ранее на основе первого репера. Точно такие же группы элементов получают при рассмотрении удалений от любых других реперов с характеристиками ρ_2.

Кроме реперов с характеристикой ρ_2, в квантовой квадратичной шкале имеются также реперы с характеристикой ρ_2-2, на основе которых определяются дополнительные четыре группы элементов вида (–1, 4), (0, 4), (1, 4), (2, 4). Поскольку других видов реперов в квадратичной шкале нет, то всего будет 10 групп элементов. Согласно алгоритму построения квадратичной шкалы при этом обеспечивается разбиение всего счетного множества элементов, характеризуемых порядковыми номерами. Заметим, что данная классификация совпадает с классификацией, приведенной в [5], до 30-го элемента включительно за исключением положений 1-го и 2-го элементов.

Для реперов квантовой кубической шкалы $Z_3(n, l_n, m_n)$, построенной на основе квантовой числовой последовательности $Z_3(n)$, справедлива следующая формула:

$$Z_3(n,l_n,m_n)=\begin{cases}2 \text{ при } n=1,\ l_n=0,\ m_n=0;\\ \frac{1}{3}n(n-1)(2n-1)+2l_n^2+2(2m_n+1) \text{ при } n=2,3,...,\ l_n=1,2,...,\ n-1,\\ m_n=1,2,...,\ n+1,...,\ m_n+p.\end{cases} \quad (2)$$

Базовая характеристика квантовой кубической шкалы $\rho_3 = 8$. Все реперы кубической шкалы $Z_3(n, l_n, m_n)$, расположенные во втором (l_n=1) столбце табл. 3, имеют характеристику 8, а остальные реперы – характеристики 6, 8 или 10. Так, реперы, стоящие в третьем столбце, имеют характеристику 10, в четвертом – 8, в пятом – 6 и т. д. Значения $Z_3(n,l_n,m_n)=Z_3(n,\ n-1,\ n-1)=Z_3(n)$ выделены в табл. 3 полужирным шрифтом.

Проанализировав данные табл. 3, можно установить, что таким образом исчерпываются все возможности взаимного расположения счетного числа элементов относительно соответствующих реперов квантовой кубической шкалы. Классификация элементов, характеризуемых порядковым номером, на основе этой шкалы с учетом трех видов реперов приводит к 32-м группам элементов. Как показано в [8], при этом воспроизводится Периодическая система элементов, приведенная в [9]. Отличие систем элементов состоит в том, что *f*-элементы в соответствии с удалениями от репера выделены в четырнадцать отдельных групп, в то время, как в [9] они входят в третью группу Периодической системы. Кроме того, в шкале [8] первый элемент входит в группу элементов (–1, 8) с порядковыми номерами 9; 17; 35; 53; 85; 117; ..., а второй элемент – в группу (0, 8) с порядковыми номерами 10; 18; 36; 54; 86; 118, ...

Учет положения элементов (разностей) относительно реперов определенного вида приводит к 10-и ($2\,\Phi_1^1(3)=10$) и 32-м ($2\,\Phi_2^1(4)=32$) группам элементов квантовых квадратичной и кубической шкал, соответственно. Отме-

Таблица 3

Реперы квантовой кубической шкалы

n	Z_3 при (l_n, m_n)									
	(0, 0)	(1, 1)	(2, 2)	(2, 4)	(3, 3)	(3, 5)	(4, 4)	(4, 6)	(4, 8)	(5, 5)
1	**2**	–	–	–	–	–	–	–	–	–
2	–	**10**	–	–	–	–	–	–	–	–
3	–	18	**28**	–	–	–	–	–	–	–
4	–	36	46	54	**60**	–	–	–	–	–
5	–	68	78	86	92	100	**110**	–	–	–
6	–	118	128	136	142	150	160	168	176	**182**

тим, что указанные количества групп для случаев $2D$ и $3D$ совпадают с количеством групп инвариантных решеток согласно [10].

Переход от шкал наименований к шкалам разностей на основе нумерующих функций. Теория нумераций изучает общие свойства объектов, пронумерованных, как правило, с помощью натуральных чисел. Например, взаимно однозначное соответствие неотрицательного целого числа и многомерного вектора (кортежа) с неотрицательными целочисленными компонентами может быть установлено на основе канторовских нумерующих функций [11]. Отображение некоторой системы отношений в числовую систему лежит в основе применения как шкал измерений, так и нумерации, поэтому для исследования взаимосвязи качественных и количественных свойств объектов может быть использован аппарат теории нумерации.

Квантовые степенные шкалы $Z_2(n, l_n)$ и $Z_3(n, l_n, m_n)$, представляющие шкалы разностей, построены на основе квантовых числовых последовательностей. В табл. 2, 3 значения указанных последовательностей выделены полужирным шрифтом. Квантовые числовые последовательности – база для построения водородоподобной системы элементов, в которой определенному набору квантовых чисел поставлено в соответствие наименование атома. Покажем, что функции $Z_2(n, l_n)$ и $Z_3(n, l_n, m_n)$ можно определить как нумерующие функции, умноженные на постоянный коэффициент, равный 4. Нумерующие функции имеют вид сумм треугольных чисел [12]:

$$N_2(x,y)=\Phi_2^0(x+y)+\Phi_1^0(y)=\frac{1}{2}((x+y)^2+3y+x);\ x,\ y=0,1,2,\ldots; \quad (3)$$

$$\begin{aligned} &N_3(x,y,z)=\Phi_3^0(x+y+z)+\Phi_2^0(y+z)+\Phi_1^0(z)=\\ &=\frac{1}{6}((x+y+z)^3+3(x+y+z)^2+3(y+z)^2+\\ &+11z+5y+2x);\ x,\ y,\ z=0,1,2,\ldots \end{aligned} \quad (4)$$

Для того, чтобы формула (3) задавала единственное взаимно однозначное соответствие неотрицательного целого числа $N_2(x, y)$ и кортежа неотрицательных целых чисел (x, y) необходимо зафиксировать положение осей координат. Это условие означает, что кортежу (0, 0) взаимно однозначно соответствует число $N_2(0, 0) = 0$, а кортежу (1, 0) – число $N_2(1, 0) = 1$.

В трехмерном случае соответственно определяются следующие начальные условия: кортежу (0, 0, 0) взаимно однозначно соответствует число $N_3(0, 0, 0)=0$, кортежу (1, 0, 0) – число $N_3(1, 0, 0)=1$, кортежу (0, 1, 0) – число $N_3(0, 1, 0)=2$.

Сравнение выражений (1), (3) и (2), (4) показывает, что реперы квантовых шкал могут быть представлены с помощью нумерующих функций. Взаимосвязи рассматриваемых выражений указаны в табл. 4.

В табл. 4 переменные n, l_n, m_n принимают значения, указанные в табл. 2, 3 для случаев $2D$ и $3D$, соответственно. Значения переменных x, y, z согласно табл. 4 оказываются рациональными. Например, значениям квантовых чисел $n=1$, $l_n=0$ из табл. 2 отвечают значения переменных $x=-3/2$, $y=1/2$, а значениям $n=1$, $l_n=0$, $m_n=0$ из табл. 3 – значения $x=-1/2$, $y=-9/16$, $z=9/16$.

Таким образом, с одной стороны водородоподобная система элементов по сути представляет шкалу наименований, описывающую качественные свойства атомов. Действительно, рассматриваются свойства атомов, характеризуемых определенным строением электронных оболочек, для которых невозможны соотношения типа «больше» или «меньше». С другой стороны, в Периодической системе преобладают количественные свойства, обусловленные определенным порядковым номером элемента, т. е. положение каждого элемента с порядковым номером определяет возможные преобразования этого элемента, описываемые шкалой разностей, показывающей, сколько электронов может присоединить или отдать элемент.

Таблица 4

Представление реперов квантовых шкал в виде нумерующих функций

Степень шкалы	Формула взаимосвязи	Соотношения переменных
$2D$	$Z_2(n,l_n)=4N_2(x,y)$	$x=\frac{1}{2}(n-2l_n-4)$ $y=\frac{1}{2}(n+2l_n)$
$3D$	$Z_3(n,l_n,m_n)=4N_3(x,y,z)$	$x=n-l_n-\frac{3}{2}$ $y=\frac{1}{16}(-2n+24l_n-16m_n-7)$ $z=\frac{1}{16}(2n-8l_n+16m_n+7)$

Шкалы наименований и разностей, в данном случае применительно к атомам вещества, взаимосвязаны посредством нумерующих функций, участвующих в описании сложных объектов. Для определения роли нумерующих функций в процессе взаимосвязанного описания количественных и качественных свойств других сложных объектов, например цвета, необходимо рассмотреть модели зрительного механизма, которые могут предусматривать нумерацию рецепторов сетчатки, расположенных в комплексах, построенных на основе квантовых чисел и размещенных в матрице квантовых измерений [13].

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 11-07-00007-а).

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. **Пфанцагль И.** Теория измерений /Пер. с нем. М.: Мир, 1976.

2. **Брянский Л. Н., Дойников А. С., Крупин Б. Н.** Метрология. Шкалы, эталоны, практика. М.: ВНИИФТРИ, 2004.

3. **Чернышев С. Л., Чернышев Л. С.** Квантовый анализ результатов измерений // Измерительная техника. 2006. № 12. С. 3 – 8; **Chernyshev S. L., Chernyshev L. S.** // Measurement Techniques. 2006. V. 49. N 12. P. 1171 – 1178.

4. **Деза Е. И.** Специальные числа натурального ряда: Учеб. пособие. М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2011.

5. **Negadi T., Kibler M.** The Periodic Table in Flatland// Intern. J. Quantum Chem. 1996. V. 57. N 1. P. 53 – 61.

6. **Протодъяконов М. М., Герловин И. Л.** Электронное строение и физические свойства кристаллов. М.: Наука, 1975.

7. **Исаев Л. К., Мардин В. В.** Русско-англо-французско-немецко-испанский словарь основных терминов в метрологии /Пер. с англ., фр. М.: Изд-во стандартов, 1998.

8. **Исаев Л. К., Чернышев С. Л.** Основанная на теории шкал классификация элементов, характеризуемых порядковыми номерами // Нелинейный мир. 2007. № 10–11. Т. 5. С. 705 – 711.

9. **Эмсли Дж.** Элементы / Пер. с англ. М.: Мир, 1989.

10. **Вейль Г.** Симметрия /Пер. с англ. М.: Наука, 1968.

11. **Ершов Ю. Л.** Теория нумераций. М.: Наука, 1977.

12. **Чернышев С. Л.** Нумерующие функции неотрицательных целочисленных координат L-мерных векторов //Фундаментальная и прикладная математика. 2009. Т. 15. № 1. С. 148 – 155.

13. **Чернышев С. Л.** Моделирование и классификация наноструктур. М.: Издательский дом «ЛИБРОКОМ», 2011.

Дата принятия 01.10.2012 г.