

*Szakács Zoltán *** Váradi József*

**Matematikai
hálóok
a
kémiai elemek
rendszerén**

*Gelence 1983 – 1988
Sepsiszentgyörgy 1991
Kolozsvár 1994*

Tartalomjegyzék

<i>1. Bevezetés</i>	<i>3</i>
<i>2. Halmazelméleti alapfogalmak</i>	<i>4</i>
<i>2.1. Matematikai fogalmak</i>	<i>4</i>
<i>2.2. Kémiai elemek halmaza</i>	<i>5</i>
<i>3. Reláció a matematikában</i>	<i>6</i>
<i>4. Kémiai kötés, mint reláció</i>	<i>6</i>
<i>5. A függvényről általában</i>	<i>8</i>
<i>6. Függvények a kémiában</i>	<i>9</i>
<i>7. Elemrendszer-halmazrendszer</i>	<i>11</i>
<i>7.1. Osztályaxiómák matematikai értelmezése</i>	<i>15</i>
<i>7.2. Osztályaxiómák alkalmazása a kémiai elemrendszerre</i>	<i>15</i>
<i>8. Relációs struktúrák</i>	<i>16</i>
<i>9. A relációs struktúra vizsgálata</i>	<i>16</i>
<i>10. Alkalmazás</i>	<i>19</i>

1. Bevezetés

A kémiai oktatás középpontjában az anyag szerkezetének megismerésére irányuló törekvés áll, s az a meggondolás, hogy a kémiai anyag elementáris funkcióit a szerkezet ismeretének alapján értelmezzük, magyarázzuk és előrelássuk¹. (1,9). A szerkezeti szemléletmódnak végig kell vonulnia az egész kémia tanításon. Ennek világnézeti szempontból van jelentősége, mert alkalmas a struktúra és a funkció természetes összefüggéseinek megvilágítására². (2,17). A kémia fejlődéstörténeti szemléletmódja és távlat vizsgálata kapcsolatba hozza a kémiai rendszereket más fizikai, csillagászati, biológiai, matematikai rendszerekkel. Ezzel hozzájárul a tantárgy koncentrációs lehetőségeinek feltárásához, a tanulók világnézetének integrációs, szintézisre törekvő tágításához. Kiegészítő és alapozó ismereteket szolgáltat egy feltételezhető környezetismereti érdeklődést tápláló kutatás kezdeteihez, illetve kibontakozásához. E módszertani alapelv megvalósítása feltételezi a kémia tanár rendszeres kapcsolat tartását a más tantárgyakat tanító nevelőkkel, érdeklődő szakemberekkel és pedagógusokkal, .

A kémia oktatás során gyakran találkozunk különféle mikrorendszerekkel, valamint sokféle makrorendszerekkel. Ha ezek közül a továbbiakban kiemelünk egyet, mint az elemek bizonyos sokasságát és tanulmányozzuk az általuk alkotott rendszert, eltekintve az elem, annak belső rendszeriségének teljes értékelésétől. Megállapítható, az elemek közti kapcsolat-viszony adott esetben épp a kémiai kötés útján valósul meg. Az elem néhány tulajdonságának alkalmas kiragadása, véleményünk szerint nem vezet tévútra és hamis tulajdonságok nyilvánításához, inkább a valódi jelleg kihangsúlyozásához járul hozzá.

A természettudományokban, így a kémiában is, a jelenségek között összefüggéseket a matematika segítségével tudjuk tömören leírni. Nagyon sok esetben a felhasznált matematikai formalizmus kifejezi a jelenség mennyiségi közötti kapcsolatot. Ez a lehetőség a szakmai leírások belsejében általában ritkán érzékelhető. **Az általunk javasolt modell a jelenségek minőségi összefüggéseit hivatott leírni.** A matematikai modell a vizsgált rendszer mélyebb megismerését biztosítja és egyes esetekben az

¹. Dr.Bóna E: A struktúra és funkció kapcsolatának kifejezése a kémiai oktatásunkban, I-II. A kémia tanítása 1983/1-2.

². Dr.Perczel S: Hogyan tanítsuk a kémiát az általános iskola 7-8 osztályában, Tankönyvkiadó Bp.1980.

újabb jelenségek megismerését teszi lehetővé vagy a létező korlátok szorítására hívja fel a figyelmet.

Köszönetünket fejezzük ki Dr.Virág Imre és Dr.Zsakó János professzoroknak, akik munkánkat felügyelték, bátorítottak és segítettek a két egymástól eltérő felfogásban oktatott tananyag között, azonos értékrendet szabó kapcsolatot létrehozni. Ezuttal megpróbáljuk az esetleges érdekeltek tudomására hozni, mert korábban megfelelő érdeklődés hiányában nem adhattuk ki. A kézirat a kolozsvári Egyetemi Könyvtár és a szerzők polcán megtalálható. Mától a honlapon is viszontlátható.

2. Halmazelméleti alapfogalmak

Halmazon vagy sokaságon bizonyos jól meghatározott dolgok, tárgyak, fogalmak összességét értjük. A halmazhoz tartozó dolgok a halmaz elemei. A halmazt, az elemet, az elemeknek a halmazhoz való tartozását, valamint a halmazoknak egymásba foglaltságát kifejező összefüggéseket elsődleges alapfogalomnak tartjuk³. (3).

2.1. Matematikai fogalmak

Azt a halmazt, amelynek elemei szintén halmazok halmazrendszernek nevezzük. Azt a halmazt, amelynek nincsenek elemei, üres halmaznak nevezzük és \emptyset -vel jelöljük.

Egy halmazt egyértelműen meghatároznak az elemei. Az elemeket vagy felsorolással pl. $A = \{ 2, 3, a, x \}$ vagy az elemek jellemző tulajdonságai közlésével pl: $Q = \{ y \mid T(y) \}$ adjuk meg. Egy halmazban egy elemet csak egyetlen egyszer jelölünk ki, pl. az alma szó esetében a szóban előforduló a hangok halmaza $\{a\}$, minden hangé pedig $\{a, l, m\}$.

Két halmaz egyenlő, ha ugyanazok az elemei. Egy halmaz véges, ha üres vagy véges számosságú elemet foglal magába. Minden más esetben végtelen halmaz⁴. (4,20).

Műveleteket végezhetünk bármikor, bármely halmazokkal és elemeikkel. Ismert műveletek az egyesítés, a metszet, a különbség, a szimmetrikus differencia, valamint szabályozott összefüggések a részhalmaz meg a teljes halmaz között, és a komplementer (teljesre kiegészítő) halmaz létezésére vonatkozó, elnyelési vagy kiválasztási állítások, melyeket használnak megfelelően adunk meg. Egy halmaz részhalmaza a halmazműveletekre halmazalgebrát vagy Boole-algebrát alkot⁵. (5,20).

³Becheanu M: Algebra EDP.Buc.1983.

⁴ Maurer Gy: Bevezetés a struktúrák elméletébe DKK Kvár.1976.

⁵ Varcza L: Konkrét és absztrakt struktúrák Tankönyvkiadó Bp.1970.

Két halmaz között szokás értelmezni a Descartes féle szorzatot, ami olyan elempárok alkotását jelenti, melyben az egyik elem az egyik, a másik elem a másik halmazból való:

$$\mathbf{A \times D = \{ (x, y) \mid x \in A \wedge y \in D \}}$$

2.2. Kémiai elemek halmaza

A kémiai halmazon az összes kémiai elemek halmazát értjük. A halmaz feldolgozásra váró elemeit az a kémiai elem jelenti, melyet ezen halmaz elemeinek felsorolásával adjuk meg. Pontosabban ezúttal csak a főcsoportok elemeit tanulmányozzuk, ezzel elkerüljük a mellékcsoportok elemei által tanúsított következetlenségeket és rendellenességeket. A kémiai elem halmazelemként való tárgyalásánál semmilyen akadály nem mutatkozik. Ennél talán az jelentősebb, hogy a bemutatott felfogásban az azonos fajta atomok összessége (halmaza) egyetlen kémiai elemet alkot⁶. (6). Ez a tartalmi szűkítés nem vezet az atom értelmezéséhez, csak egy bizonyos kémiai elem meghatározásához:

$$\text{Pl: } \{\mathbf{H, H, H, H, \dots}\} \equiv \{\mathbf{H}\}.$$

Az adott kémiai elem bennfoglalása a kémiai halmazban alapfogalom. A fenti halmaz részhalmazait bizonyos kritériumok alapján határozzuk meg (pl: kémiai tulajdonság). A kémiai elemekre épített halmazokat úgy adjuk meg, hogy nemtartalmazzanak egyenlő elemeket és részhalmazaik sem egyenlők. (3,8) A kémiai elemek halmazát végesnek tekintjük, bár minden jel arra mutat, hogy a ma ismert elemek sora itt nem zárult le. A korai tanulmányozás és az eredmények bemutatása során megfogadtuk ugyan, hogy jövődölésekbe vagy találgatásokba nem bocsátkozunk⁷. (7).

Munkánkban kivitelezéséhez azonban az elemek sorát ez alkalommal, napra lezártuk és végesnek tekintjük. Az előbbi lábjegyzetben jelzett sejtésünk pedig fenntartjuk⁸. (8).

Az elemek vizsgált halmazának például adott, két részhalmaza a fémek (**M**) és a nemfémek (**T**) halmaza. Az értelmezett Descartes-féle szorzat olyan elempár, ahol például az első elem a Na az első **M** halmaz eleme, a másik a Cl elem a második **T** halmazból való:

$$\mathbf{M \times T = \{ (Na, Cl) \mid Na \in M \wedge Cl \in T \}}.$$

A teljes halmazra bevezetjük az **E** jelölést, a teljes halmaz lehet önmaga részhalmaza is:

⁶ Zsakó J.: Az elemek története Tudományos KK Buk. 1964.

⁷ Több éve küzdünk a sejtéssel, hogy Dr. Virág Imre hálóléleleti feltételezései, majd kipróbált eredményei alapján a kémiai elemek kötéssel kapcsolatos tulajdonságai mintegy 56-58 eddig ismert, sajátosan meghatározott kémiai elemet feltételeznek (ha ezzel a rendezéssel kapcsolatos sejtés helyénvalónak bizonyul, akkor a kémiai elemek száma a fentiekkel, az időközben felfedezettekkel és a fennebb mellőzött alcsoportbeliekkel összesen, nem haladhatja meg a 128 elemet).

⁸ Nenitescu C.D.: Chimie generala EDP Buc. 1972.

$E \times E = \{ (H, H') \mid H \in E \wedge H' \in E \}$, a felírás értelme a hidrogén elemből alkotható teljes elempár.

3. Reláció a matematikában

Legyen A nem üres halmaz. Az $A \times A$ Descartes-féle szorzat egy részhalmazát az A halmazon értelmezett relációnak nevezzük (\mathfrak{R}). Az A halmaz x és y elemeit a \mathfrak{R} relációban összekapcsolt elemeknek nevezzük: $(x, y) \in \mathfrak{R}$. Ez a reláció bináris, azaz kéttényezős. Jele: $\mathfrak{R}_s = (A, D, S)$, ahol S az $A \times D$ Descartes-féle szorzat részhalmaza (4). Az $\mathfrak{R}_s = (A, D, S)$ komplementer relációját a $\mathfrak{R}_{cs} = (A, D, CS)$ adja, mert $C\mathfrak{R}_s = \mathfrak{R}_{CS}$ csak ezen a módon válik teljesíthetővé.

Az $\mathfrak{R}_s = (A, D, S)$ bináris reláció inverz relációjának nevezzük azt az $\mathfrak{R}_s^{-1} = (A, D, S')$ relációt, ahol S' az $D \times A$ részhalmaza és $a\mathfrak{R}_s b \Leftrightarrow b\mathfrak{R}_s^{-1} a$.

Két bináris reláció szorzata azt jelenti, hogy

$$a\mathfrak{R}_1 \mathfrak{R}_2 c \Leftrightarrow \exists b: a\mathfrak{R}_1 b \text{ és } b\mathfrak{R}_2 c.$$

A homogén bináris reláció csakis az A halmazon értelmezett $\mathfrak{R} = (A, A, S)$ reláció.

A reláció sajátos tulajdonságai a következők:

Reflexív $a\mathfrak{R}a, \forall a \in A$.

Tranzitív $a\mathfrak{R}b \wedge b\mathfrak{R}c \Rightarrow a\mathfrak{R}c, \forall a, b, c \in A$.

Antiszimmetrikus $a\mathfrak{R}b \wedge b\mathfrak{R}a \Rightarrow a=b, \forall a, b \in A$.

Szimmetrikus $a\mathfrak{R}b \Rightarrow b\mathfrak{R}a, \forall a, b \in A$.

Egy A halmaz rendelkezik az adott tulajdonságok valamelyikével, akkor bármely szűkítése is rendelkezik az illető tulajdonsággal.⁹ (9,3).

Ha az A halmazon érvényes a reflexív, szimmetrikus és antiszimmetrikus tulajdonság, akkor A -n egységreláció értelmezett.

Ha az A halmazon érvényes a reflexív és tranzitív tulajdonság, akkor A -n előrendezési reláció értelmezett.

Ha az A halmazon érvényes a reflexív, tranzitív és antiszimmetrikus tulajdonság, akkor A -n rendezési reláció értelmezett.

Ha az A halmazon érvényes a reflexív, tranzitív és szimmetrikus tulajdonság, akkor A -n ekvivalencia reláció értelmezett (4,20).

4. Kémiai kötés, mint reláció

Az anyagszerkezet vizsgálatánál igen lényeges tényező a rendszerelemek közötti viszony. Ezt a viszonyt a kémiai elemek között igen jellemzően a kémiai kötés számos fajtája, típusa testesíti meg. E relációk tehát

⁹ Speranza F: Relații și structuri ESE Buc.1975.

a kémiai kötések, mint funkcióhordozók, illetve mint a funkciók sajátos megnyilvánulási formái szerepelnek (1,15).

Kémiai kötésen az atomok közötti kölcsönhatások révén kialakuló kapcsolatot értjük. A kémiai kötés egy sor mennyiségi adattal jellemezhető, melyeket mérések segítségével határoztak meg. Nem jelentéktelen a kémiai kötés minőségi jellemzése sem az atomi pályákkal, vagy éppen a jellemző kötéstípussal való megadása(6,2,15).

Az atomok közötti kötések nagyon változatosak, kialakulhatnak azonos atomok (**H₂**, **Br₂**, **C-C**) vagy a periódusos rendszer távoli helyeit elfoglaló elemek között (**NaCl**, **RbF**, **LiBr**). Kémiai kötések három típusát különböztetjük meg:

- a) ionos kötés, elektromosan töltött atomok vagy atomcsoportok között jön létre;
- b) kovalens kötés, azonos vagy kémiailag nem túlságosan különböző természetű atomok között alakul ki;
- c) fémes kötés, melyet az egyetem előtti oktatásban nem elemzünk.

Ez a felosztás csupán fenomenologikus, a vegyületek külső megnyilvánulásán alapszik. Határtípusok ugyan, amelyek között mégis az átmenetek számtalan fajtája ismeretes.¹⁰ (10,7).

A továbbiakban nem célunk a különböző kötéstípusok beható vizsgálata, csak annak előrelátása, hogy a kémiai kötés két elem között létrejöhet-e vagy sem. Gyakorlati kivitelezésre oly kevés lehetőségünk adódik az oktatás során, de elméletileg megpróbáljuk az oktató logikájával rávezetni az érdeklődőt a vegyületek kialakulása magyarázatának ilyenformán, járható útjaira.

Adott **E** kémiai elemek halmazán az **E**×**E** Descartes-féle szorzat egy **W** részhalmazát az **E** halmazra értelmezett **s_w** relációnak nevezzük. A kémiai halmaz esetében a reláció éppen a kémiai kötés. A relációban összekapcsolt elemeknek nevezzük azokat az elemeket, amelyek az első, illetve a második halmaz elemei, ami **s_w**=(**M,T,W**) vagyis **M**×**T**={(**Na,Cl**) | **Na**∈**M** ∧ **Cl**∈**T**} és **W**⊂**M**×**T** jelenti. A felírásból tehát **M**×**T**-nek egy részhalmaza a **W** és a **Na** és **Cl** elemek relációja a **s_w** kémiai kötés, melynek jelentése **Na****s_w****Cl**.

Általában **s_w**=(**E,E,W**) felírás azt jelenti, hogy két tetszőleges kémiai elem, lehet ugyanaz is, kémiai kötést létesít. Ez a reláció bináris, mert két tetszőleges elem kémiai kötésére, általában vonatkozik. Ez a reláció homogén, mert **E** ugyanazt a halmazt jelenti, tehát ugyanazon elemeket foglalja magába. Az ilyen feltételeket teljesítő relációt, homogén bináris relációnak tekintjük.

Matematikai mintára értelmezhető az inverz reláció. A **s_w** = (**M,T,W**) bináris reláció inverz relációja a **s_w⁻¹** = (**T,M,W**) lesz, amelyben a **W** részhalmaza a **T**×**M** szorzatnak. Ez az értelmezés teszi lehetővé, hogy matematikai értelmezés tartalma szerint, különbséget tegyünk a **Na****s_w****Cl** és a **Cl****s_w⁻¹****Na** között (10,17).

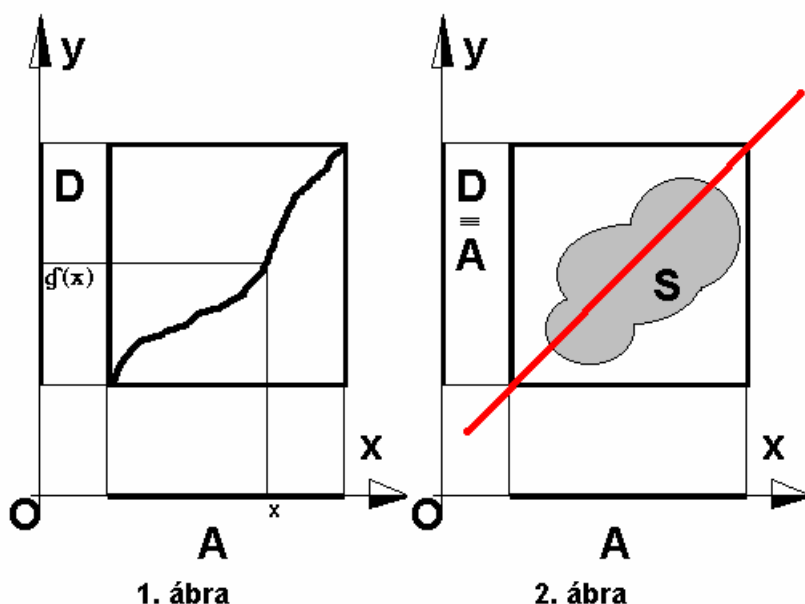
¹⁰. Máthé J.:Az anyag szerkezete Műszaki KK.Bp.1979.

5. A függvényről általában

A $\mathfrak{R}_s=(A,D,S)$ reláció függvény, melynek grafikonja olyan $(x,y) \in A \times D$ elempárok összessége, ahol x végig halad az A elemein és $y = \mathfrak{R}(x)$ elemekből kerül ki, amelyek épp a D elemei [lásd 1. ábra]. A matematika több jellegzetes tulajdonsággal rendelkező függvény csoportosít és tanulmányoz. A kémiai elemek tulajdonságai által számba vehető összefüggések a számfüggvényszerű relációkat fejezik ki. A bináris relációt az A halmazon értelmezett függvénynek vagy leképezésnek nevezzük, ha bármely A -beli elem esetén a \mathfrak{R}_s metszet egyértelmű részhalmaza D -nek [lásd 2. ábra] (4).

A függvény jellemzésére megadott halmazok bármely szűkítésén is függvényről beszélünk. Ezáltal a bináris egységreláció is függvény lesz.

Egy függvény $f:A \rightarrow D$ szürjektív, ha D minden egyes eleme képelem, azaz $y = f(x); \forall y \in D \wedge x \in A$.



Egy függvény $f:A \rightarrow D$ injektív, ha $\forall a_1, a_2 \in A$ -re az

$$a_1 \neq a_2 \Rightarrow f(a_1) \neq f(a_2).$$

Ha egy $f:A \rightarrow D$ függvény injektív és szürjektív, akkor bijektív.

Egy $f:A \rightarrow D$ függvény bijektív, akkor az inverze $f^{-1}:D \rightarrow A$ függvény is bijektív.

Ha általában f függvény bijektív, akkor bármely $f^{-1}f=1_D$ és $ff^{-1}=1_A$. Ez utóbbi könnyen alkalmazható tranzitív bináris reláció esetén a kiinduló elemhez való visszatérés egységrelációjaként.

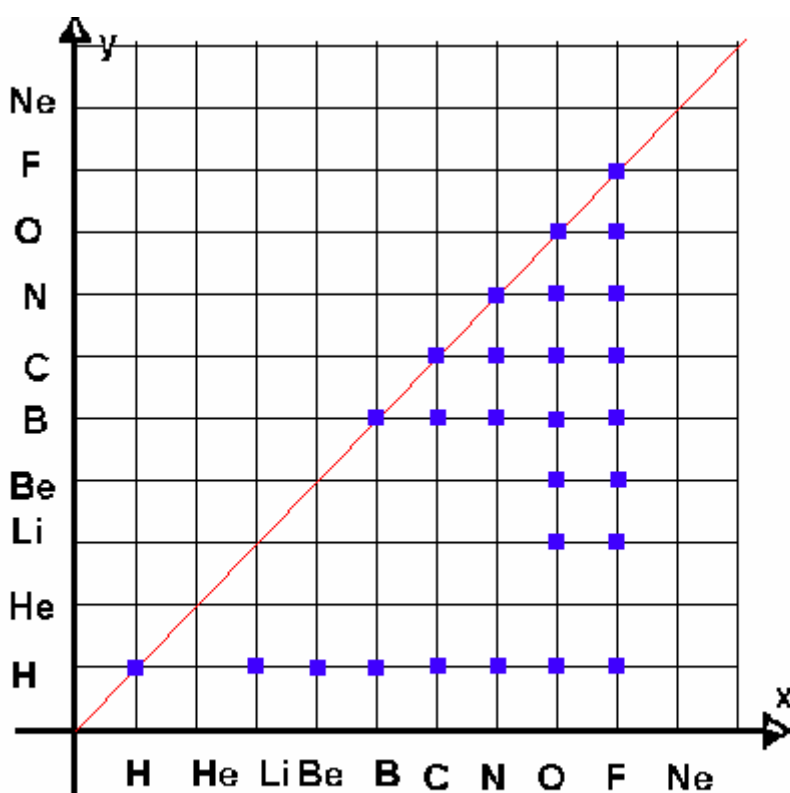
Nem üres, véges, ekvivalens halmazban az $f:A \rightarrow D$ értelmezéssel megadott függvény bijektív¹¹. (11).

¹¹. Năstăsescu C.: Inele, module, categorii Ed.Ac.RSR. Buc.1976.

Lényeges, megjegyzésre ajánlott kiemelés: a számfüggvények tulajdonságai a rácspontokban ellenőrizhető és nem terjeszthető ki folytonossági és teljességi problémákra (4).

6. Függvények a kémiában

A $\mathfrak{R}_w=(E,E,W)$ bináris reláció matematikai értelemben vett függvényt értelmez az $E \times E$ Descartes-féle szorzat leszűkítésein. A kémiai elem kötést(relációt) létesítő tulajdonságai látszólag nem teljes mértékben hasonlítanak a tisztán matematikai követelményekhez (5). Mégis a lehetőségek nagyobb többségét mértékletesen kimerítik. Az egyes értelmezéseket csak abban az esetben fejlesztettük tovább, ha ez megfelelően könnyen belátható volt és a feldolgozás sajátos érdekeit szolgálta.

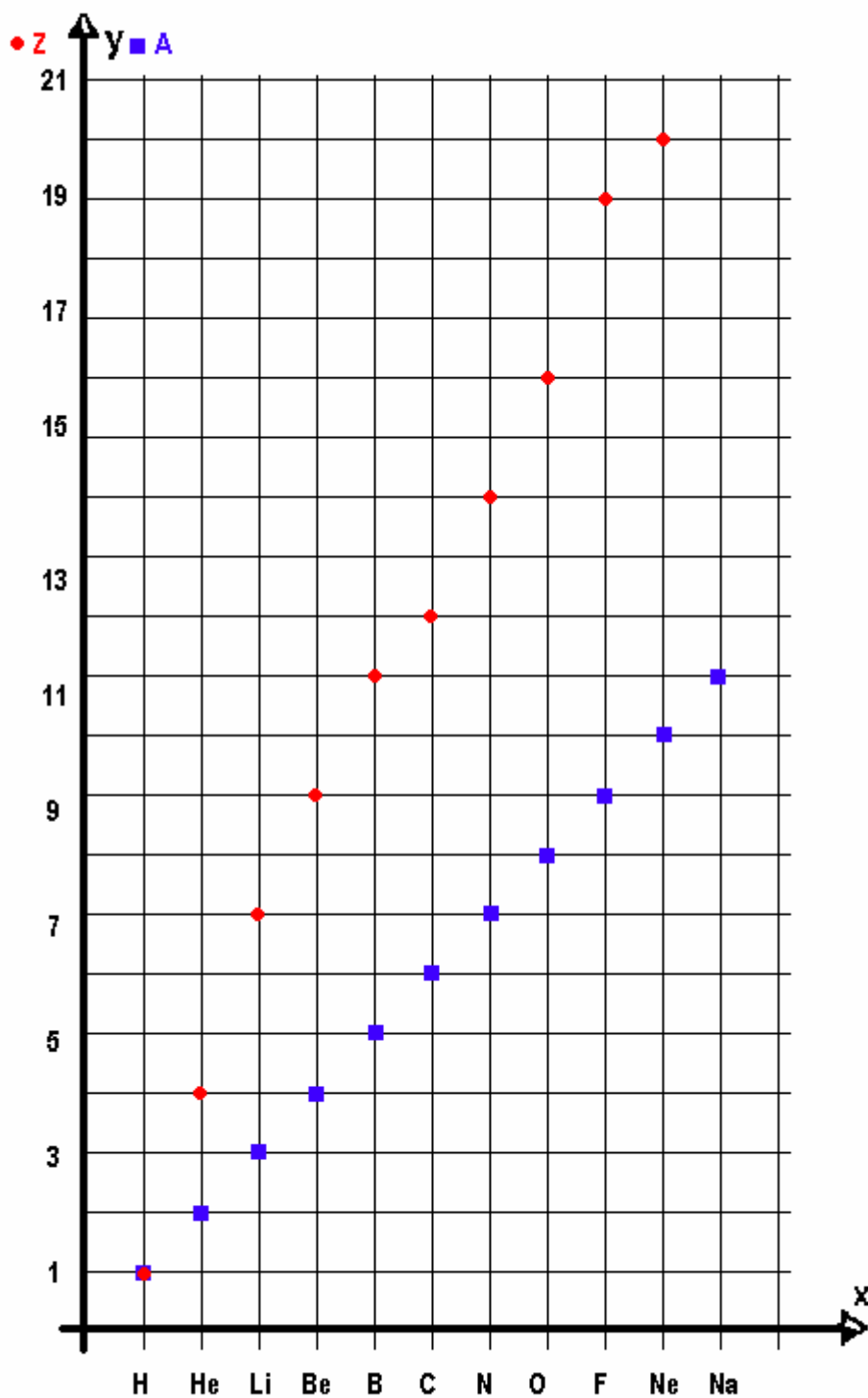


3. ábra

A reláció értelmezésénél alkalmazott $\mathfrak{R}_w=(E,E,W)$ egyértelmű leszűkítést tovább fejlesztve megállapítható, hogy valóban a W leszűkítés az abszcissa tengely és a szögfelező közötti fél negyedben helyezkedik el [lásd 3. ábra]. Könnyen belátható, hogy ennek az inverze által értelmezett W' leszűkítés a szögfelező felett és az ordináta tengely között található (5).

A szögfelezőn helyezkednek el azok a rácspontok, melyekre az egységreláció ($\mathbf{1}_E$) áll fenn. Azokat az elemi pontokat, melyek a relációt nem teljesítik, a rendszerezés szempontjából közömbös pontoknak nevezzük és

csak az általánosítás elveiben ellenőrizzük. Egyetem előtti oktatás szintjén nem tanulmányozzuk a fém-fém kötést, valamint a nemesgázak vegyületeit.



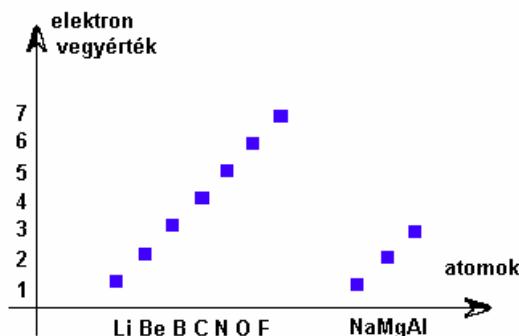
4. ábra

Ily módon az ezeknek megfelelő pontok, a közömbös pontok, amelyek érthetően többnyire hiányoznak a grafikus pontrácsból.

Megjegyzés: a kémiában számfüggvényként kezelhető az elem-rendszám $f:E \rightarrow Z$ megfeleltetés, valamint az elem-atomtömeg $f:E \rightarrow A$

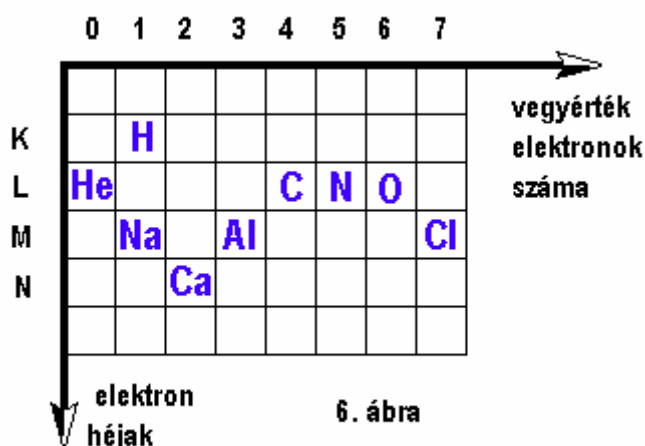
megfeleltetés [lásd 4. ábra]. Az így megfigyelhető vagy megalkotott bármely ponttrács nem tartalmazza az elemek közötti szakaszokat, ami a számfüggvények megadhatóságának egyik lehetősége.

Megjegyzés: A kémiában előforduló jellegzetesnek tartott függvényeket megfelelő óvatossággal ajánljuk az érdeklődők figyelmébe.



5. ábra

Egy másik számfüggvény¹² példa az elem-vegyérték elektronszám megfeleltetés [lásd 5. ábra] (12).



6. ábra

Más függvényre példa a vegyértékelektron-elektronhéjak száma megfeleltetés, mely a későbbiek során nyer jelentős szerepet [lásd 6. ábra], az osztályrabontás és az osztályhomomorfizmus értelmezésében, a rendezési struktúra tulajdonságainak vizsgálatakor.

7. Elemrendszer-halmazrendszer

Adott függvény $f: J \rightarrow A$ függvény, $S = \{(i, f(i)) | i \in J\}$ grafikonját az A halmaz függvényrel megadott elemrendszerének nevezzük, és $(f_i)_{i \in J}$ -vel jelöljük, ahol J indexhalmaz, melyben i az i -ed rendű tag. A rendszer véges, ha J véges.

¹² Farkas Gy.: Függvények és relációk az általános iskola kémia tananyagában, A kémia tanítása 1984/2.

Ha $f: J \rightarrow A$ bijektív, akkor A bijektíven leképezhető az $(f_i)_{i \in J}$ elemrendszerre.

Az A minden részhalmaza elemrendszer. Az A halmaz részhalmazai olyan elemekből állnak, mint maga az A halmaz. Az A halmaz részhalmazai halmazában vizsgált $f: J \rightarrow P(A)$ leképezést függvénynek tartjuk, $f_i = A_i \subset A$, $\forall i \in J$. Az előbbieket az f -el megadott elemrendszer A -beli halmaz rendszerének nevezzük. Jele: $(A_i)_{i \in J}$.

Megjegyzés: Az A halmaz $P(A)$ részhalmazai halmazát egy példával érzékeltetjük: Legyen $A = \{ a, b, c \}$,

$$\text{akkor } P(A) = \{ \emptyset, \{a\}, \{b\}, \{c\}, \{a,b\}, \{a,c\}, \{b,c\}, \{a,b,c\} \} \quad (5).$$

Léteznek irányított halmazrendszerek¹³ (13).

Egy halmazrendszer metszete:

$$\bigcap_{i \in J} A_i = \{ x \mid x \in A \wedge \forall i \in J, x \in A_i \}$$

Megjegyzés: Ha $J = \emptyset$, akkor $\bigcap_{i \in J} A_i = A$

Egy halmazrendszer egyesítése:

$$\bigcup_{i \in J} A_i = \{ x \mid x \in A \wedge \exists i \in J, x \in A_i \}$$

Megjegyzés: Ha $J = \emptyset$, akkor $\bigcup_{i \in J} A_i = \emptyset$ (5).

Egy A halmaz $(A_i)_{i \in J}$ lefedését végesnek mondjuk, ha J egy részhalmazán $\bigcup_{i \in J} A_i = A$ és a halmazrendszert páronként diszjunktak tartjuk, ha $A_i \cap A_j = \emptyset$, valamint $i \neq j \wedge i, j \in J$ (11).

Egy $(A_i)_{i \in J}$ halmazrendszert, az $A \neq \emptyset$ osztályfelbontásának nevezzük, ha $(A_i)_{i \in J}$ az A -nak páronként diszjunkt lefedése és $A_i \neq \emptyset$, $\forall i \in J$. Az ilyen részhalmazokat a felbontás osztályainak tartjuk¹⁴ (14).

Megjegyzés: Egy $A_1 \times A_2 = \{ (a_1, a_2) \mid a_1 \in A_1 \wedge a_2 \in A_2 \}$ Descartes-féle szorzat $A_1 \cup A_2$ -re meghatároz egy-egy olyan függvényt, melyre $\{x, y\} \rightarrow A_1 \cup A_2$ -re, mégpedig $f(x) = a_1 \wedge f(y) = a_2$.

Ha egy E halmazt adott véges halmaznak tekintjük egy \mathfrak{v} -ből és vizsgáljuk elemeit, például rendszáma szerint, akkor megállapítható, hogy $(E_{i,j})_{i,j \in J}$ részhalmazok a kötésben megnyilvánuló viselkedése ismétlődik. A halmaz elemeit ezen szempont szerint egy 7 soros és 8 oszlopos táblázatba (egy 8 soros és 8 oszlopos táblázat része) foglaljuk [lásd 1. táblázat]. Az első index a vízszintes sor száma, a második index az oszlop száma.

Megjegyzés: Az elemek sorokba és oszlopokba rendezése egyáltalán nem eredeti. Mi magunk is rendelkezünk a periódicitáson és más ismert rendezésen kívül, még legalább két rendhagyó rendezéssel.

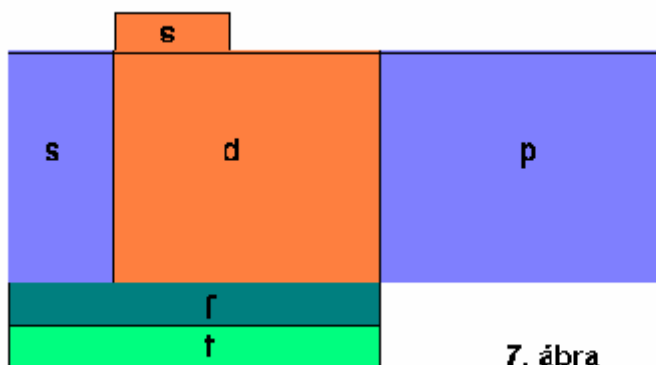
¹³ Cseke V.: A gráfelmélet és gyakorlati alkalmazásai Tud.KK.Buk.1972.

¹⁴ Kerekó B.: Lineáris algebra K.J.KK.Bp.1976.

e_{10}	e_{11}	e_{12}	e_{13}	e_{14}	e_{15}	e_{16}	e_{17}
e_{20}	e_{21}	e_{22}	e_{23}	e_{24}	e_{25}	e_{26}	e_{27}
e_{30}	e_{31}	e_{32}	e_{33}	e_{34}	e_{35}	e_{36}	e_{37}
e_{40}	e_{41}	e_{42}	e_{43}	e_{44}	e_{45}	e_{46}	e_{47}
e_{50}	e_{51}	e_{52}	e_{53}	e_{54}	e_{55}	e_{56}	e_{57}
e_{60}	e_{61}	e_{62}	e_{63}	e_{64}	e_{65}	e_{66}	e_{67}
e_{70}	e_{71}	e_{72}	e_{73}	e_{74}	e_{75}	e_{76}	e_{77}

1. táblázat

Az $f:Z \rightarrow E$ függvény $W_Z = \{(e_{ij}, f(e_{ij})) \mid i, j \in J\}$ az E halmaz f függvényével adott halmazrendszerének nevezzük, melyben az e_{ij} jelölés az 1. táblázat egy helyét jelenti, melynek $f(e_{ij})$ -vel megfeleltettünk egy rendszámot. Itt a W_Z a kémiai elemek halmazának egy leszűkítése a szokott rendszám szerint. A halmazrendszer fenti megadása lehetővé tette, hogy az $f(e_{ij})$ elemek egymástól különböző és páronként diszjunktok legyenek. Ilyenformán az E



7. ábra

halmazt végesen lefedtük(11).

Kiindulásnak a kémiai elemek egy már megalkotott \mathfrak{A} rendszerét, a létező periódusos rendszert vettük, ahol az elemek bizonyos tulajdonságaik miatt foglalnak el bizonyos helyet. Mengyelejev orosz vegyész, 1869-ben az elemek osztályozásának lehetőségét tanulmányozva, felfedezte a szakaszosság törvényszerű elvét. Az akkori észrevételek többségükben ma is helytállóak. A felfedezés az elemek periódusos rendszerének kialakításához vezetett. A táblázatban az egyes sorokban vagy épp oszlopokban elhelyezett elemek valamilyen közös vagy ellentétes és változó tulajdonság miatt kerültek oda. Később az elektronszerkezet felfedezésével kiderült, hogy az azonos oszlopban levő elemek külső héján azonos számú elektron található vagy a

vízszintes sorok (periódusok) elemeinél azonos elektronhéj van feltöltődésben. Az elemek tulajdonságainak vizsgálata rávilágított arra is, hogy az azonos csoportban vagy periódusban levő elemek között jellemző különbségek vannak (6). Így történt meg az, hogy egy periódusban végighaladva, a kémiai jelleget figyelve, találkozunk fémekkel és nemfémekkel is. Ugyanez figyelhető meg a csoportokban is. A periódusos rendszer alapjául tekintjük az **s** és **p** mező elemeit, vagyis azokat az elemeket amelyeknél a megkülönböztető elektron a nevezett orbitálokra kerül [lásd 7. ábra].

Az 1.táblázat felhasználásával az e_{ij} elemhelyet rendre lefedjük a periódusos rendszer fenti elemeivel úgy, hogy a rendszám növekvő sorrendjét ne bontsuk meg [lásd 2.táblázat]. Az elemek elrendezésének kritériuma a rendszám növekvő függvénye.

∅							1 H
2 He	3 Li	4 Be	5 B	6 C	7 N	8 O	9 F
10 Ne	11 Na	12 Mg	13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl
18 Ar	19 K	20 Ca	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br
36 Kr	37 Rb	38 Sr	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I
54 Xe	55 Cs	56 Ba	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At
86 Rn	87 Fr	88 Ra					∅

2.táblázat

A 2.táblázat első oszlopába kerültek a kötés szempontjából inaktívnak tekinthető elemek (nemesgázak). Ugyanabban a vízszintes sorban az utánuk következő elemektől abban különböznek, hogy az n -dik héjukon az elektronok száma nulla (zérus). A hidrogénnek a halogénnel azonos oszlopba való helyezését egyes szerzők (7) indokoltnak tartják. A H_2 hidrogén molekulát a hidrogén hidridjének fogják fel, tehát a kötés szempontjából a hidrogén egy vegyértékű, mint a halogén a hidrogénnel szemben.

Megjegyzés: Tekintettel arra, hogy az elemek tanulmányozása minden oktatási szinten a periódusos rendszer felhasználásával történik, figyelembe vettük a rendezési kritériumok egyes tanult vonatkozásait. Módosítást az elhelyezésben alkalmaztunk, melyet a matematika vizsgálati módszere helyezett előtérbe és egyidejűleg meg is követelt.

7.1. Osztályaxiómák matematikai értelmezése

- I. Egy A osztályt egyértelműen meghatároznak elemei.
- II. Ha P egy osztályra vonatkozó tulajdonság, akkor létezik olyan B osztály melyre $B = \{x | P(x)\}$.
- III. Az üres osztály, halmaz.(4)
- IV. Ha A és B két halmaz, akkor $\{A, B\}$ is halmaz.
- V. Egy halmaz minden részosztálya is halmaz.
- VI. Egy A halmaz $P(A)$ részhalmazosztálya is halmaz.
- VII. Ha A halmaz, akkor A osztály is halmaz.
- VIII. Az összes természetes szám halmazt képez.
- IX. Tetszőleges halmaz eleme valamely univerzumnak.
- X. Nem üres halmazok tetszőleges, páronként diszjunkt $H = (A_i)_{i \in J}$ rendszere esetén van olyan K halmaz, amelynek egy és csakis egy közös eleme van H minden tagjával ¹⁵ (15):
$$K \cap (A_i) = \{e_{ij}\}_{ij \in J}$$

7.2 Osztályaxiómák alkalmazása a kémiai elemrendszerre

A kémiai elemek tulajdonságainak különbözősége szükségessé teszi a választott halmaz osztályokra és részhalmazosztályokra való bontását. A felbontást a következő kémiára alkalmazott axiómák alapján végezzük:

- I. Egy osztályt vagy sort egyértelműen meghatároznak elemei.
- II. Az elektronszerkezetre vonatkozó tulajdonság az osztály elemeire érvényes.
- III. Az üres osztály is halmaz.
- IV. Ha M és T két halmazosztály, akkor $\{M, T\}$ is halmazosztály.
- V. Egy halmaz minden részosztálya is halmaz.
- VI. Ha E halmazosztály, akkor M, T, G részhalmazosztályai is halmazok.
- VII. Ha M, T, G halmazok, akkor E egyesítésük is halmaz $M \cup T \cup G = E$.
- VIII. Az \mathfrak{U} halmaz elemei a Z rendszám halmazával ekvivalensek, mert természetes számok részhalmazát képezik.
- IX. Az E halmaz eleme valamely \mathfrak{U} univerzumnak.
- X. Az E elemrendszer elemei egy és csakis egyszer fordulnak elő \mathfrak{U} -ban:
$$\mathfrak{U} \cap E = E$$

Az axiómák értelmezésével kapcsolatban megjegyezzük:

A táblázat vízszintes sorát egy osztálynak tekintjük, melynek elemeit a II. axióma határozza meg. Minden osztályban részhalmazosztályt alkotnak a fémek, a nemfémek és a nemesgázak. Bár a nemesgázakat kémiai

¹⁵. Beju AE.: Compendiu de matematica, ESE. Buc.1983.

szempontból a nemfémekhez soroljuk, jelen esetben külön megfigyelésnek vetjük alá. Ha valamely osztályból hiányzik vagy a fém, vagy a nemfém, vagy a nemesgáz, akkor az ezeknek megfelelő részalmazosztályok üres halmazok, melyeket ennek megfelelően tárgyalunk. A 2.táblázat osztályaiban előforduló fémek nemfémek és nemesgázak összessége alkotja a tárgyalt elemek E halmazát. A táblázat elemeinek E halmaza része az ismert összkémiai elemek \mathfrak{U} halmazának, amit univerzumnak fogunk tartani, a matematikai értelmezés fenntartására.

8. Relációs struktúrák

Az egyes konkrét anyagfajták, valamint a különféle eszmei és szellemi tudati képződmények sajátos rendszerként léteznek. Ezek meghatározott szerkezettel (struktúrával) rendelkeznek (1,7). A struktúra adott minőséggel rendelkező dolog felépítettségét jelenti, azaz alkotó részeinek számát jellegét helyzetét és egymásra hatásuk sajátos meghatározottságát és megjelenési módját. A struktúra az elemek, alkatrészek törvényszerű kapcsolata az adott egész keretein belül, azaz a struktúra az elemek sajátos viszonyának rendszere.

A matematikában valamely halmaz elemei között fennálló vagy létrehozható viszony kapcsolat struktúrát határoz meg. Egy adott halmazon egy struktúra többféle megközelítésben is jelen lehet, az adott halmaz részalmazainak szorzatából, vagy a halmaz elemeiből alkotható sorozat elemeinek viszonyából, vagy valamely halmazosztály részalmazainak viszonyából (9,5). Kémiai vizsgálódásunk az adott elemek osztályra bontott részalmazosztályaiban található elemek kölcsönös viszonyát tárgyalja

A relációs struktúrák egyféle felosztásából(4) használunk fel egy szeletet, amely nem műveletes (mennyiségi) hanem tartalmi mutatójú (minőségi) szelvényeket alkalmas vizsgálni [lásd 3.táblázat].

A struktúra bemutatását, mint rendező-rendszerező elvet használjuk. A rendező és rendszerező alapot a periódusos rendszer jelenti, melyben az atomi, illetve az elemi rendszerek fontos rendszeri és struktúrális törvénye fejeződik ki. A periódusonként jelentkező struktúrális azonosságokhoz és hasonlóságokhoz szorosan illeszkednek a különféle funkcionális azonosságok és hasonlóságok is.

9. A relációs struktúra vizsgálata

A bináris relációk (kémiai kötések) rendelkeznek a reflexív, tranzitív, szimmetrikus és antiszimmetrikus tulajdonságok némelyikével.

-reflexív tulajdonság azt jelenti:

$e \mathfrak{R}_w e$ amelyben e tetszőleges kémiai elem E -ben.

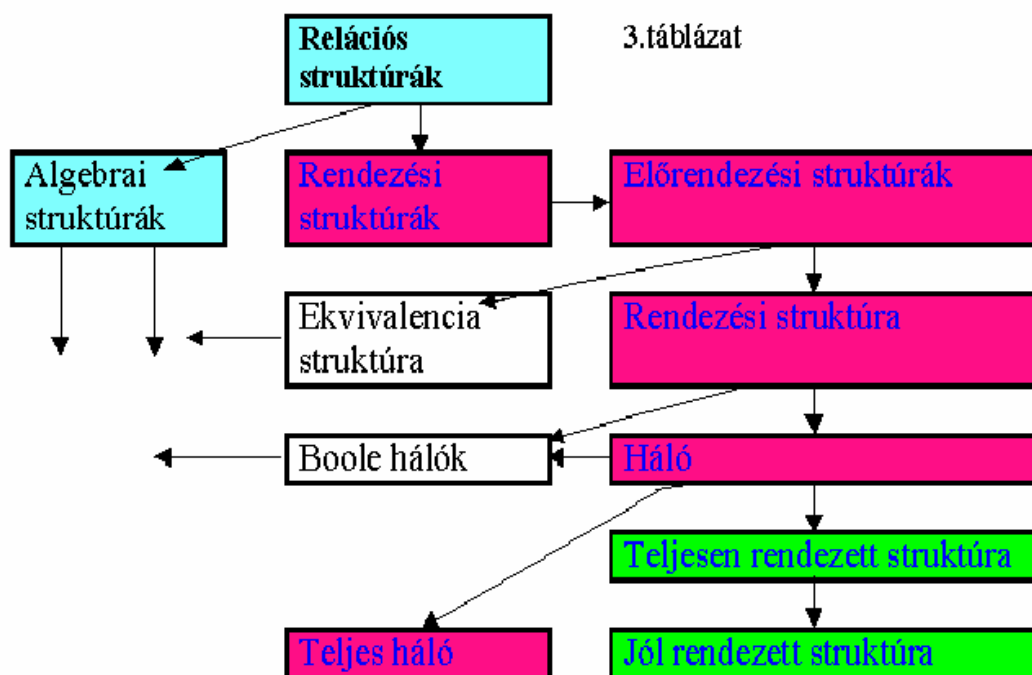
-tranzitív tulajdonság azt jelenti:

ha $e_1 \mathfrak{N}_w e_2$ és $e_2 \mathfrak{N}_w e_3$ akkor $e_1 \mathfrak{N}_w e_3$ is igaz, melyben e_1, e_2, e_3 elemek E -ben.
 -szimmetrikus tulajdonság azt jelenti:

ha $e_1 \mathfrak{N}_w e_2$, akkor $e_2 \mathfrak{N}_w e_1$ is igaz, melyben e_1, e_2 elemek E -ben.

-antiszimmetrikus tulajdonság azt jelenti:

ha $e_1 \mathfrak{N}_w e_2$ és $e_2 \mathfrak{N}_w e_1$ fennáll, akkor e_1 és e_2 ugyanúgy viszonyulnak egymáshoz, melyben e_1, e_2 tetszőleges E -beli elemek.



Az E -n értelmezhető egységreláció reflexív, szimmetrikus és antiszimmetrikus tulajdonságú és $\mathbf{1}_E$ -vel jelöljük. Például $\mathbf{H} \mathfrak{N}_w \mathbf{H} = \mathbf{1}_E$, ami kémiai szempontból azt jelenti, hogy a kötésekben a hidrogén mindig azonos módon viselkedik.

Ha egy halmazon \mathfrak{N}_w reflexív és tranzitív tulajdonságú, akkor előrendezési relációt határoz meg. Minden osztály eleget tesz az előrendezési relációnak. Elégséges, ha egyetlen osztályt tanulmányozunk (pl: a 2.táblázat harmadik sorát, $Z=10, \dots, 17$).

Ha egy halmazra \mathfrak{N}_w reflexív, tranzitív és szimmetrikus tulajdonságokkal rendelkezik, akkor ekvivalencia relációt határoz meg a vizsgált halmazon. Vezessünk le egy képzelt vizsgálódást. Az elemek halmazán a \mathfrak{N}_w reflexív tulajdonsága azt jelenti, hogy az elemek önmagukkal hoznak létre kötést. A fém önmagával fémes kötést, vagy a nemfém önmagával kovalens kötést hoz létre (12).

A vegyértékelektronok elmélete szerint a kovalens kötés létrehozásához a két elem azonos módon járul hozzá, vagyis közössé teszik azonos számú elektronjaikat. A különböző nemfémek közötti kovalens kötés a szimmetrikus reláció szép példája. Ezt a tulajdonságot csak a nemfémek halmazán

vizsgálhatjuk szemléletesen. Kivételt képez az a típusú kovalens kötés, amikor a kötési elektronpár az egyik elemtől származik, vagyis a kötés kordinatív (donor-akceptor viszonyú). Ez az antiszimmetrikus reláció példája. A vizsgált halmazon könnyen belátható a tranzitív tulajdonság teljesülése. A nemfémek halmazán a kovalens kötés ekvivalencia relációt valósít meg.

Ha egy halmazon \mathfrak{R}_w reflexív, tranzitív és antiszimmetrikus, akkor rendezési relációt határoz meg. A három tulajdonság egyidejű jelenléte egy sorban rendezési relációt eredményez. Ez a tulajdonság érvényes a 2.táblázat minden sorára, tehát minden sor rendezett halmaz.

Megjegyzés: Az előbbieken említettük az elemek hozzájárulását a kötés kialakulásához. Ismert az a tény, hogy a kötési elektronok nem tartoznak egyenlő mértékben a két különböző atomtörzshöz. A sor mentén, balról jobbra haladva az elemek elektronegatív jellege erősödik. Az elektronegatívabb elem erősebben vonzza a kötési elektronpárt, aminek következtében az elektronfelhő eltolódik az erősebb felé. Ilyenformán ez a jelenség a kémiai kötésnek (relációnak) irányítotttságot kölcsönöz¹⁶(16). Ez matematikai szempontból antiszimmetriának tekinthető.

A rendezett halmaz véges nem üres részhalmazában van legkisebb, illetve legnagyobb elem. Legyen az egyik sor elemeiből alkotott A halmaz nyolcelemű. Ennek a halmaznak a részhalmazainak halmaza áll üres, egyelemű, kételemű, háromelemű, stb., egészen a teljes halmazig, amely önmaga részhalmaza is értelmezés szerint. Jelesen az üres és az egyeleműek közül feltétlen kiválasztható a legkisebb, illetve legnagyobb elem. Több elem esetén is végesen eldönthető, hogy a vizsgált valahány elem között melyik a nagyobb, illetve a kisebb. Ily módon könnyen kiválasztható a kisebbek közül a legkisebb, illetve a nagyobbak közül a legnagyobb. A kémiai kötés minőségi mutatójának az elem elektronegatív jellegét választottuk. Belátható, hogy ez a jelleg soronként a legkisebbtől a legnagyobb értékig tart. Egy relációs rendezett halmaz, akkor és csakis akkor háló, ha a halmaz minden, nem üres, véges részhalmazának van infimuma és szuprimuma az illető halmazon.

Megjegyzés: Az A halmazokon értelmezett relációra a részhalmazokon rendre előforduló kisebb elemek legkisebbjét infimumnak, a nagyobb elemek legnagyobbját szuprimumnak nevezzük. Az A halmaz (sor) kötés szempontjából felkínált infimuma nemesgáz, szuprimuma a halogén. Ilyenképpen a periódusos rendszer egy-egy sora hálónak kezelhető.

A táblázat két során egyértelmű megfeleltetés létesíthető az egy oszlopba tartozó elemekre, amit úgy fogunk fel, hogy az elemek közül az egy oszlopbeliek ugyanannyi vegyértékelektronnal rendelkeznek. Ez a megfeleltetés egy izomorfizmus jelenlétét törvényesíti, ami azért hasznos, mert egy sor bármely sort is reprezentálhat. A táblázat két során értelmezett háléhoz kapcsolódó homomorfizmus azt jelenti, hogy a két háló egyes infimumai és szuprimumai egymásnak felelnek meg. Ha az egyik háló

¹⁶. Popescu M.:Un singur tip de legatura chimica, RFC 2/1979.

infimuma nemesgáz, akkor a másik háló nemesgáza is infimum. Ha az egyik háló szuprémuma halogén, akkor a másik háló szuprémuma is csak halogén lehet.

A teljesen rendezett háló (lánc) két eleme összehasonlítható. Egy teljesen rendezett struktúrában legfennebb egy minimális, illetve maximális elem létezik.

Egy rendezett halmaz jólrendezett, ha minden nem üres részhalmazában van legkisebb elem. Ugyanakkor a táblázat egy-egy sora ekvivalens, mivel elemei számossága egyenlő¹⁷ (17). Ha egy sort szakasznak fogunk fel, akkor ez a jólrendezett struktúra szakaszos. Az osztályrabontás axiómái között feltételeztük hogy a \emptyset is halmaz, akkor a H előtt és a Ra után is csak sajátosan (esetleg meg nem talált elemű) \emptyset halmazelemek találhatók. Ha a táblázat elemeit jólrendezett szakaszos struktúrának fogjuk fel és jólrendezett részstruktúrának tartjuk az egyes sorait(4), akkor az egyes elemei az oszlop elemeit reprezentálják kémiai tulajdonságaikkal.

A relációs struktúra jólrendezett struktúra, mert eleget tesz a diagrammban feltüntetett sorrendeknek, és kimeríti a követelménynek támasztott matematikai tulajdonságokat.

10. Alkalmazás

Az eddigiek során bemutattunk egy relációs matematikai modellt. Ezt a relációs struktúrát a kémia értelmezésére és a struktúra rendező és rendszerező elvként való felhasználására kínáljuk a kémia tanulmányozásában¹⁸ (18). Ez a vizsgálati módszer az oktatásban modellként alkalmazható az új ismeretek megalapozására a kisebb osztályokban és azok elmélyítésére a továbbiakban, valamint lehetőséget nyújt a matematikai ismeretek gyakorlatias felhasználási közegének szélesítésére.

A vizsgált elemek rendszeréről bebizonyosodott, hogy a kémiai kötés szempontjából jólrendezett struktúra és valószínűnek tarjuk, hogy kiterjeszhető további kémiai elemekre (az alcsoportok talán minden elemére is). Ugyanakkor relációnak választott kémiai kötés helyett más minőségi mutatókon is kipróbálhatjuk a relációs struktúra követelményeit. Oktatási szinten megelégszünk, ha bizonyos hasonló tulajdonságokkal rendelkező elemcsoportból csak egyet-egyét tanulmányozunk. Ebből a felismerésből kiindulva választjuk példaként a táblázat harmadik sorát, amelyet helyben meg is vizsgálunk:

A harmadik sor a következő elemeket tartalmazza: Ne, Na, Mg, Al, Si, P, S, Cl. Egy ilyen sor kémiai elemek halmazának egy osztálya. Ez a halmaz részhalmazai a fémek, a nemfémek és a nemesgáz elemekből álló halmazok:

$$M = \{Na, Mg, Al\}$$

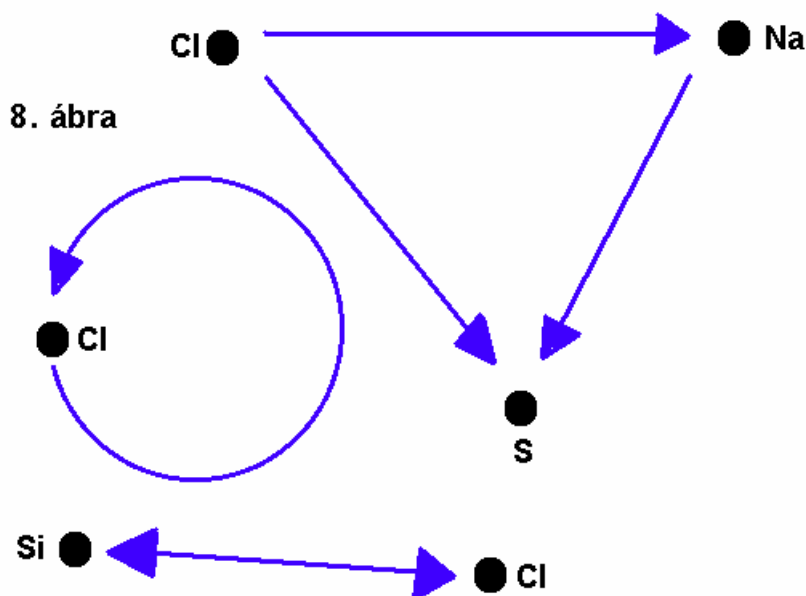
¹⁷. Salló E.: Modell és valóság, Facla Tvár 1982.

¹⁸. Neagoiu D.: Tratat de chimie anorganica II. ET. Buc. 1972.

$T=\{Si, P, S, Cl\}$

$G=\{Ne\}$.

Az elemek közötti kapcsolatot a kémiai kötés szempontjából vizsgáljuk, vagyis azt tanulmányozzuk, hogy létrejöhet-e a kémiai kötés az osztály elemei között. Igenlő válaszra folytatjuk. Egy osztály előrendezett halmaza, mert érvényes a reflexív és tranzitív tulajdonság[lásd a 8.ábra].



A reflexív tulajdonság a Cl esetében $(Cl \mathfrak{N}_w Cl)$ azt jelenti, hogy a klór köt önmagával. A tranzitív tulajdonság azt jelenti, hogyha a klór köt a nátriummal, és a nátrium köt a kénnel, akkor a klór a kénnel is köt $(Cl \mathfrak{N}_w Na, Na \mathfrak{N}_w S, ugyanúgy Cl \mathfrak{N}_w S)$.¹⁹ (19).

Ha az előrendezett halmazon értelmezett a szimmetria tulajdonság, akkor ez a struktúra ekvivalencia struktúra. A szimmetrikusság azt jelenti, hogyha a szilícium köt a klórral, akkor a klór is köt a szilíciummal $(Cl \mathfrak{N}_w Si$ mint $Si \mathfrak{N}_w Cl)$ [lásd a 8.ábra]. Ha az előrendezett halmazon értelmezett az antiszimmetria tulajdonsága, akkor a struktúra rendezési struktúra. Az antiszimmetrikus tulajdonság azt jelenti, hogy a kötés irányított.

A rendezett halmazban a Ne az infimum és a Cl a szuprémum. Elsősorban az elektronegatív jelleg szerint. A többi elem nem zavar a sorrend felállításában. A sorban található elemek, tehát hálóban található. Ugyanakkor az említett sor elemei egy jólrendezett halmaz elemei is.²⁰ (20). Belátható, hogy a nem üres részhalmazai halmazában a legkisebb elem éppen a Ne nemesgáz.

A vegyületek keletkezésekor feltevődik a kérdés, hogy az adott két elem milyen kötetést hozza létre. A kémiai kötés létrejöttének feltétele a kötőpartnerek minősége. A minőségi vizsgálattal már találkoztunk a táblázatelemek részhalmazokra bontásánál. A részhalmazokra bontás

¹⁹ Gheorghiu C.:Metodica predarii chimiei.EDP.Buc.1982.

²⁰ Hardy Z.:Út a modern algebrához,Tankönyvkiadó Bp.1975.

kritériuma a kémiai jelleg, azaz a fémes jelleg és a nemfémes jelleg. A kémiai jelleg tehát befolyásolja a relációként választott kémiai kötés minőségét.

Bár a kémiai kötés egyetlen típusként értelmezhető (5), az oktatásban nagyon sokszor a tudomány fejlődése alapján követjük a tantárgy anyagában a megismerés folyamatát. A kémiában említés szerint a kémiai kötésnek három típusát különböztetjük meg: ionos, kovalens és fémes kötés. A kötéstípusok kategórikus elhatárolása számos félreértést okoz. A tanulók életkorára való tekintettel és az azzal járó egyszerűsítő eljárásokkal, mégis ezt a felosztást követő folyamat az ajánlottabb. Egy jelentékeny előnyt is tartalmaz ez a módszer, ugyanis a tanulók az elkövetkezendőkben fel lesznek készítve a határesetek tanulmányozására, melyek hozzáférhetőbbé teszik a valódi és átmeneti esetek értelmezését.

A kémiai oktatás első évében olyan feladat elé áll a tanuló, hogy két adott elem egyesüléséből keletkező anyag képletét kell felírnia. Vagy válasszon elméletileg két elemet, és írja fel az egyesülés során keletkező vegyület képletét. Majd állapítsa meg a vegyületben a különböző elemek kötéseinek a típusát. Ezeknek a követelményeknek csak abban az esetben tehet eleget, ha ismeri az elemek viselkedését más elemekkel vagy önmagukkal szemben(19).

Ha kiemeljük azt az esetet amikor az elemek önmagukkal is kötnek, vagyis azonos fajta atomok közötti kötés jön létre, nem árt állandóan melegen tartani, hogy a fémek Na, Mg, Al, részhalmozán a kötés fémes kötés. A nemfémek Si, P, S, Cl részhalmozán, pedig poláris kovalens kötés jön létre. A nemesgáz Ne és hasonló más ilyen elemek esetén csak gyenge kötés, az u.n. van der Waals reflexív és tranzitív tulajdonság[lásd a 8.ábra]. A különböző elemek közötti kötés kialakulásánál eltekintünk a fém-fém és az elem-nemesgáz közötti kötéstől, és csak a többi lehetőséget vizsgáljuk. Ezzel a szűkítéssel két részhalmozunk maradt, a fémek és a nem fémek részhalmozása. Bármely fém az **M** halmazból kötést létesít a **T** halmaz valamely elemével, akkor a kötés ionos jellegű. Ha a részhalmozakon belül az elemek közötti kötést vizsgáljuk, az **M** és **G** halmazoktól eltekintünk, és marad a nemfémek **T** halmazán vizsgálni a kötés kialakulását. A nemfémek között kialakuló kötés a poláris kovalens kötés.²¹ (21).

²¹ A fenti tanulmány ötlete 1983-ból származik. A feldolgozás és ellenőrzés 1988-ig tartott. . Egy korai változat rövidített alakban megjelent a Revista de fizica si chimie 1985/1.számában. A szakvélemények összesítése után 1991-ben alapnak, majd 1992-ben újrakiadásra javasoltuk, majd 1993-ban példányt ajándékoztunk a kolozsvári egyetemi könyvtárnak és közkivánatra felolvastuk a sepsiszentgyörgyi Mikes Kelemen Líceum hagyományos évi Tudományos Konferenciáján 1993, majd 1994-ben is. Ennek ellenére állapota máig is kézirat.