Szakács Zoltán
Váradi József

Matematikai hálók a kémiai elemek rendszerén

Gelence
1985

TARTALOM

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 előrelássuk[1] (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 megvilágítására[2] (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 fenn tartását, a más tantárgyakat tanító nevelőkkel, érdeklődő szakemberekkel és pedagógusokkal.

A kémia oktatás során gyakran találkozunk különféle mikrorendszerekkel, valamint sokféle makrorendszerekkel. Ezek közül a továbbiakban kiválasztunk egyet, mint az elemek bizonyos sokasságát és tanulmányozzuk az általuk alkotott sajátos rendszert. Eltekintünk az elem, annak belső rendszerűségének 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. Kiderülhet talán, később, hogy kevéssé összpontosítottunk a mennyiségileg szokott kémiai tulajdonságokra. Ám bizonyosan minket most csak minőségi megnyilatkozású tulajdonságok érdekelnek. 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 mennyiségei 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 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. Ezúttal 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 (1994).

---

[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.

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 tartjuk[3] (3).

2.1. Matematikai fogalmak

Azt a halmazt, amelynek elemei szintén halmazok halmazrendszernek nevezzük. Azt a halmazt, amelynek nincsenek elemei, üres halmaznak nevezzük és $\varnothing$- 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 | 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 halmaz[4] (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 használatnak megfelelően adunk meg. Egy halmaz részhalmaza a halmazműveletekre halmazalgebrát vagy Boole – algebrát alkot[5] (5,20).

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:

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

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. Vizsgálódásunk tartalmával nem mutatnak alkalmasan csoportosítható összeférhetőségeket. Mégis. A kémiai elem halmazelemként való tárgyalásánál semmilyen akadály nem mutatkozik. Ennél talán az jelen-

---

[3] Becheanu M: Algebra EDP. Buc. 1983.

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

[5] Varecza L: Konkrét és absztrakt struktúrák Tankönyvkiadó Bp. 1970.

tősebb, hogy a bemutatott felfogásban az azonos fajta atomok összessége (halmaza) egyetlen kémiai elemet alkot[6] (6). Ez a tartalmi szűkítés nem vezet az atom értelmezéséhez, csak egy bizonyos kémiai elem meghatározásához:

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

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 nem tartalmaznak 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 jövendölésekbe vagy találgatásokba nem bocsátkozunk[7] (7). Később, talán sok értékes ötlet és hasznos következtetés birtokába juthatunk.

Munkánkban kivitelezéséhez azonban az elemek sorát ez alkalommal, napra lezártnak és végesnek tekintjük. Az előbbi lábjegyzetben jelzett sejtésünk pedig fenntartjuk[8] (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:

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

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

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

---

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

[7] Több éve küzdünk a sejtéssel, hogy Dr. Virág Imre hálóelméleti 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.

3. Reláció a matematikában

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

Az $\aleph_s$**=(A,D,S)** bináris reláció inverz relációjának nevezzük azt az

$\aleph_s^{-1}=(A,D,S')$ relációt, ahol S' az **D×A** részhalmaza és $a\aleph b \Leftrightarrow b\aleph^{-1}a$.

Két bináris reláció szorzata azt jelenti, hogy

$a\aleph_1\aleph_2 c \Leftrightarrow \exists b\text{: } a\aleph_1 b$ **és** $b\aleph_2 c$.

A homogén bináris reláció csakis az **A** halmazon értelmezett

$\aleph = (A,A,S)$ reláció.

A reláció sajátos tulajdonságai a következők:

Reflexív $a\aleph a$, $\forall a\in A$.

Tranzitív $a\aleph b \wedge b\aleph c \Rightarrow a\aleph c$, $\forall a,b,c\in A$.

Antiszimmetrikus $a\aleph b \wedge b\aleph a \Rightarrow a=b,\ \forall a,b,\in A$.

Szimmetrikus $a\aleph b \Rightarrow b\aleph a$, $\forall a,b\in A$.

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).

[9] Speranza F: Relaţii şi structurii ESE Buc. 1975.

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 a kémiai kötések, mint funkcióhordozók, illetve mint a funkciók sajátos megnyílvánulási 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 **(H_2, Br_2, C-C)** vagy a periódusos rendszer távoli helyeit elfoglaló elemek között (**NaCl, RbF, LiBr**). Kémiai kötések három típusát különböztetjük meg:

1. ionos kötés, elektromosan töltött atomok vagy atomcsoportok között jön létre;

2. kovalens kötés, azonos vagy kémiailag nem túlságosan különböző természetű atomok között alakul ki;

3. 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 $\aleph_W$ relációnak nevezzük. A kémiai halmaz esetében a reláció éppen a kémiai kötés. A relációban összekapcsolt elemeknek nevezzük azokat az elemeket, amelyek az első, illetve (van aki és – t használna) a második halmaz elemei, ami $\aleph_W=(M,T,W)$ vagyis $M\times T=\{(Na,Cl)\mid Na\in M \wedge Cl\in T\}$ és $W\subset M\times T$ jelenti. A felírásból tehát **M×T**–nek egy részhalmaza a **W** és a Na és Cl elemek relációja a $\aleph_W$ kémiai kötés, melynek jelentése $Na\aleph_W Cl$.

Általában $\aleph_w=(E,E,W)$ 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. Ennek a tulajdonságnak matematikai értelemben komoly következményekkel járó jelentősége van. Kémiai szempontból sem hanyagolható el, hogy a kötésben szereplő elemek minimum bináris reláció elemei. Matematikai mintára értelmezhető az inverz reláció. A $\aleph_W = (M,T,W)$ bináris reláció inverz relációja a $\aleph_W^{-1} = (T,M,W)$ lesz, amelyben a **W** részhalmaza a **T×M** szorzatnak. Ez az értelmezés teszi lehetővé, hogy matematikai értelmezés tartalma szerint, különbséget tegyünk a $Na\aleph_W Cl$ és a $Cl\aleph_W^{-1}Na$ között (10,17).

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

5. A függvényről általában

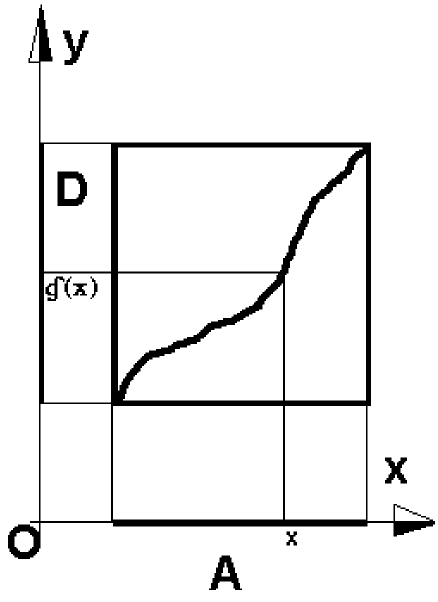
A $\aleph_s$=**(A,D,S)** reláció függvény, melynek grafikonja olyan **(x,y)**∈ **A×D** elempárok összessége, ahol **x** végig halad az **A** elemein és **y** = $\aleph$ **(x)** elemekből kerül ki, amelyek épp a **D** elemei [lásd 1. ábra]. A matematika több jellegzetes tulajdonsággal rendelkező függvényt csoportosít és tanulmányoz. A függvénycsoportokat minőségi tulajdonságaik szerint választjuk szét. A kémiai elemek tulajdonságai által számba vehető összefüggések a természetes számfüggvényszerű relációkat fejezik ki. A bináris relációt az A halmazon értelmezett függvénynek vagy leképezésnek nevezzük, ha bármely **A**-beli elem esetén a $\aleph_s$ 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.

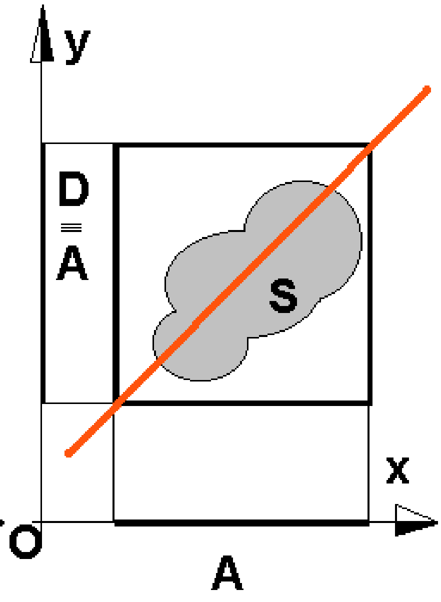
Egy függvény **f: A→D** szürjektív, ha **D** minden egyes eleme képelem, azaz **y = f(x);** $\forall$**y∈D** ∧ **x∈A.** Egy függvény **f: A→D** injektív, ha $\forall$ $a_1,a_2 \in A$-re az

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

Ha egy **f: A→D** függvény injektív és szürjektív, akkor bijektív.



1. ábra

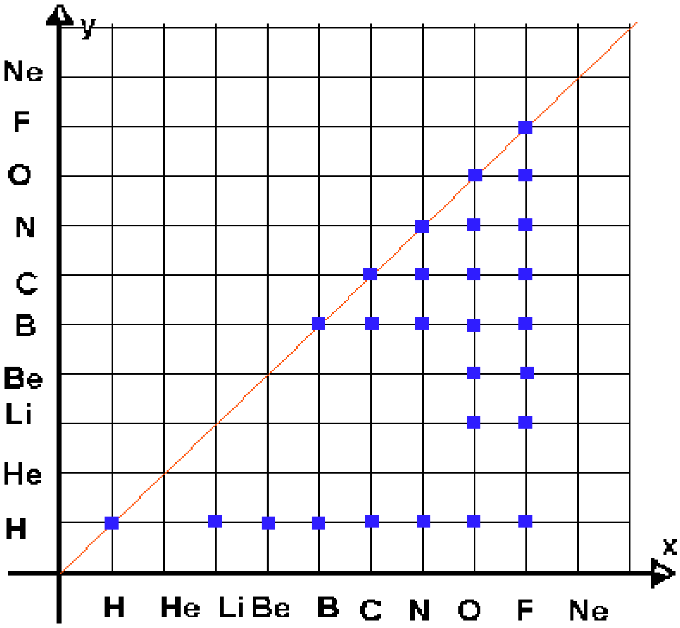


2. ábra

Egy **f: A→D** függvény bijektív, akkor az inverze f^{-1}**:D→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.

Teljes, szerkezetében alapvető és aprólékos kutatásnak, valamint igényes osztályozásnak vannak alávetve az egyszerű számfüggvények. Helyenként nem oktalan a természetes számfüggvények helyett egyszerűen matematikai sorozatokat használni.



3. ábra

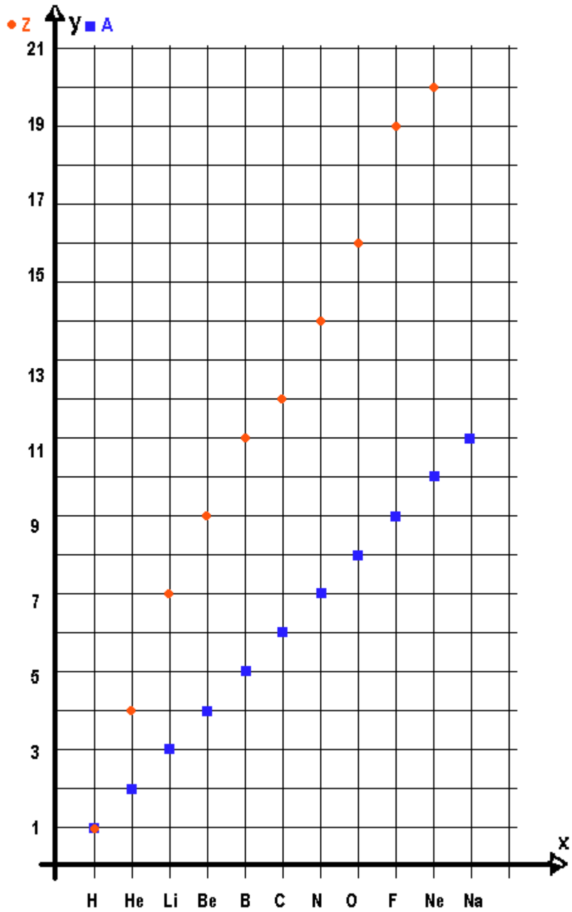
Nem üres, véges, ekvivalens halmazban az **f: A→D** értelmezéssel megadott függvény bijektív[11] (11).

Lényeges, megjegyzésre ajánlott kiemelés: a természetes számfüggvények tulajdonságai a rácspontokban ellenőrizhető és nem terjeszthető ki folytonossági és teljességi problémákra. Kémiai vizsgálódásunkban való felhasználása kézenfekvő, mert az elemek halmaza éppen sorozat megjelenésű (4).

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

6. Függvények a kémiában

A $\aleph_w$**=(E,E,W)** bináris reláció matematikai értelemben vett függvényt értelmez az **E×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. 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.



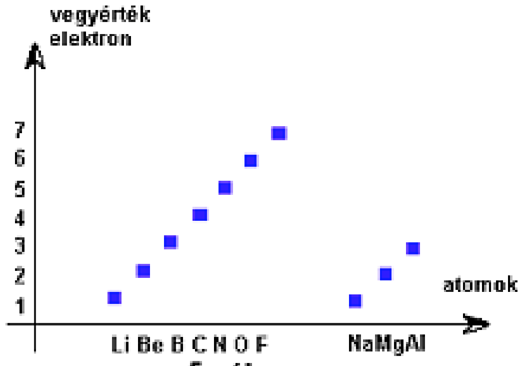
4. ábra

A reláció értelmezésénél alkalmazott $\aleph_w$**=(E,E,W)** egyértelmű leszűkítést tovább fejlesztve megállapítható, hogy valóban a **W** leszűkítés az abszcissza 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 **(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 nemesgázok vegyületeit.

Megjegyzés: a kémiában számfüggvényként kezelhető az elem-rendszám **f: E→Z** megfeleltetés, valamint az elem-atomtömeg **f: E→A** megfeleltetés [lásd 4. ábra]. Az így megfigyelhető vagy megalkotott bármely pontrács nem tartalmazza az elemek közötti szakaszokat, ami a számfüggvények megadhatóságának egyik lehetősége.

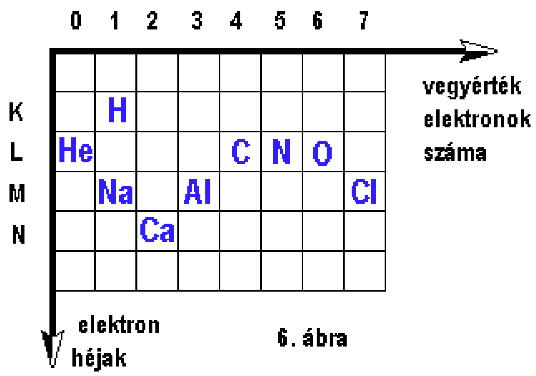
Megjegyzés: A kémiában előforduló jellegzetesnek tartott függvényeket megfelelő óvatossággal ajánljuk az érdeklődők figyelmébe.



5. ábra

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

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



6. ábra

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

7. Elemrendszer-halmazrendszer

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

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

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

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

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

Léteznek irányított halmazrendszerek[13](13).

Egy halmazrendszer metszete:

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

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

Egy halmazrendszer egyesítése:

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

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

Egy **A** halmaz $\mathbf{(A_i)_{i \in J}}$ lefedését végesnek mondjuk, ha **J** egy részhalmazán $\mathbf{\cup A_i=A}$ és a halmazrendszert páronként diszjunktnak tartjuk, ha $\mathbf{Ai \cap Aj = \emptyset}$, valamint $\mathbf{i \neq j} \wedge \mathbf{i,j \in J}$ (11).

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

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

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

[14] Krekó B.: Lineáris algebra K.J.KK.Bp.1976.

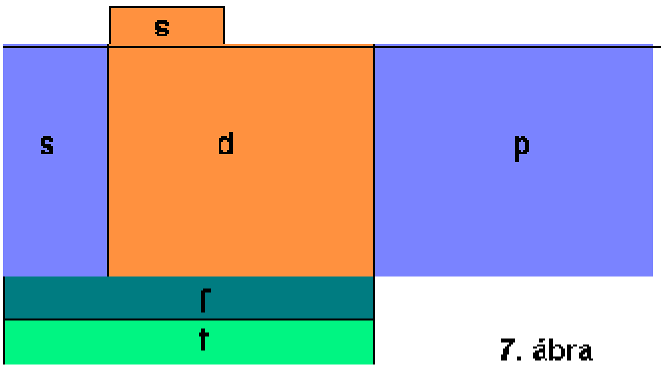
Ha egy **E** halmazt adott véges halmaznak tekintjük egy ט-ból és vizsgáljuk elemeit, például rendszáma szerint, akkor megállapítható, hogy $\mathbf{(E_{i,j})_{ij\in J}}$ részhalmazok a kötésben megnyilvánuló viselkedése ismétlődik. A halmaz elemeit ezen szempont szerint egy 7 soros és 8 oszlopos táblázatba (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 periodicitáson és más ismert rendezésen kívül, még legalább két rendhagyó rendezéssel.

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:** $\mathbf{Z\rightarrow E}$ függvény $\mathbf{W_Z}=\{(\mathbf{e_{ij}},\mathbf{f(e_{\ ij})})|\ \mathbf{i,j\in J}\ \}$az **E** halmaz **f** függvénnyel adott halmaz-rendszerének nevezzük, melyben az $\mathbf{e_{ij}}$ jelölés az 1. táblázat egy helyét jelenti, melynek $\mathbf{f(e_{ij})}$ -vel megfeleltettünk egy rendszámot. Itt a $\mathbf{W_Z}$ a kémiai elemek halmazának egy leszűkítése a szokott rendszám szerint. A halmazrendszer fenti megadása lehetővé tette, hogy az $\mathbf{f(e_{ij})}$ elemek egymástól különböző és páronként diszjunktok legyenek. Ilyenformán az **E** halmazt végesen le-fedtük(11).



7. ábra

Kiindulásnak a kémiai elemek egy már megalkotott ט 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 helytállók. 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 $\mathbf{e_{ij}}$ 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 természetes 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 (nemesgázok). Ugyanabban a vízszintes sorban az utánuk következő elemektől abban különböznek, hogy az n-dik héjukon az elektronok száma nulla (zérus). A hidrogénnek a halogénekkel 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 halogének 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 $\mathbf{B=\{x|P(x)\}}$.

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 $\mathbf{H=(A_i)_{i\in J}}$ rendszere esetén van olyan **K** halmaz, amelynek egy és csakis egy közös eleme van **H** minden tagjával [15](15):

$\mathbf{K\cap(A_i)=\{e_{ij}\}_{ij\in J}}$

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 $\mathbf{M\cup T\cup G=E}$.

VIII. Az **ט** halmaz elemei a **Z** rendszám halmazával ekvivalensek, mert természetes számok részhalmazát képezik.

IX. Az **E** halmaz eleme valamely **ט** univerzumnak.

X. Az **E** elemrendszer elemei egy és csakis egyszer fordulnak elő **ט**-ban:

ט $\mathbf{\cap E=E}$.

Az axiómák értelmezésével kapcsolatban megjegyezzük:

---

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

A táblázat vízszintes sorát egy osztálynak tekintjük, melynek elemeit a II.axióma határozza meg. Minden osztályban részhalmazosztályt alkotnak a fémek, a nemfémek és a nemesgázok. Bár a nemesgázokat kémiai 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 részhalmazosztályok üres halmazok, melyeket ennek megfelelően tárgyalunk. A 2.táblázat osztályaiban előforduló fémek nemfémek és nemesgázok összessége alkotja a tárgyalt elemek E halmazát. A táblázat elemeinek E halmaza része az ismert összkémiai elemek ט 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 halamazon egy struktúra többféle megközelítésben is jelen lehet, az adott halmaz részhalmazainak szorzatából, vagy a halmaz elemeiből alkotható sorozat elemeinek viszonyából, vagy valamely halmazosztály részhalmazainak viszonyából (9,5). Kémiai vizsgálódásunk az adott elemek osztályra bontott részhalmazosztályaiban 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 strukturális 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:

  $\mathbf{e}\aleph_w\ \mathbf{e}$ amelyben **e** tetszőleges kémiai elem **E**-ben.

- tranzitív tulajdonság azt jelenti:

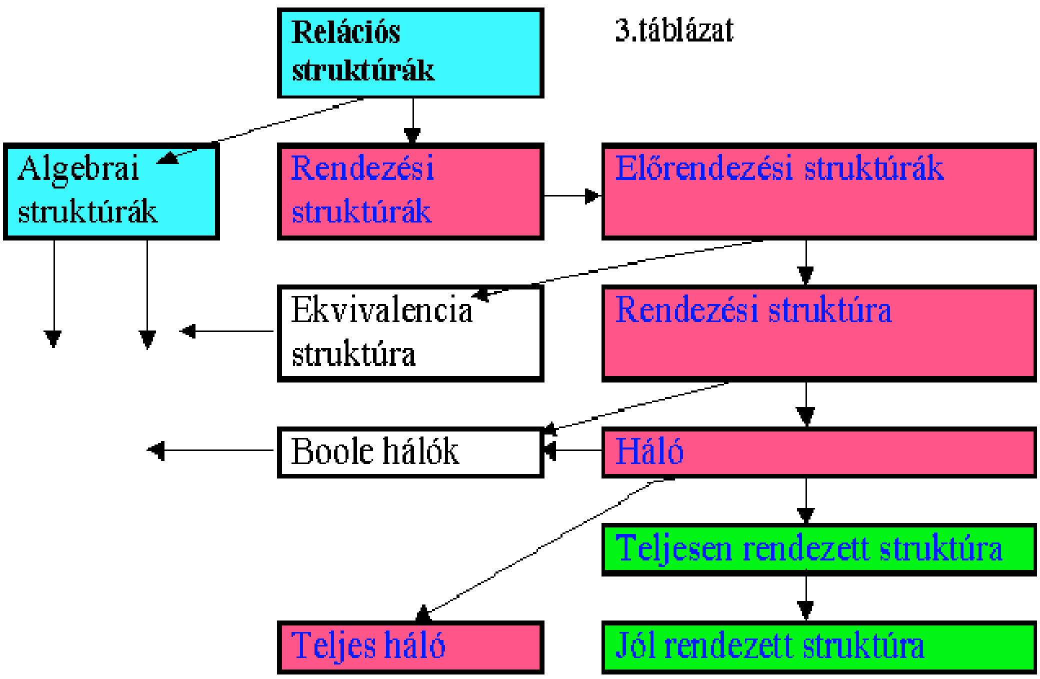
  ha $\mathbf{e_1}\aleph_w\ \mathbf{e_2}$ és $\mathbf{e_2}\aleph_w\ \mathbf{e_3}$ akkor $\mathbf{e_1}\aleph_w\ \mathbf{e_3}$ is igaz, melyben $\mathbf{e_1,e_2,e_3}$ elemek **E**-ben.

- szimmetrikus tulajdonság azt jelenti:

  ha $\mathbf{e_1}\aleph_w\ \mathbf{e_2}$, akkor $\mathbf{e_2}\aleph_w\mathbf{e_1}$ is igaz, melyben $\mathbf{e_1,e_2}$ elemek **E**-ben.

- antiszimmetrikus tulajdonság azt jelenti:

  ha $\mathbf{e_1}\aleph_w\ \mathbf{e_2}$ és $\mathbf{e_2}\aleph_w\mathbf{e_1}$ fennáll, akkor $\mathbf{e_1}$ és $\mathbf{e_2}$ ugyanúgy viszonyulnak egymáshoz, melyben $\mathbf{e_1,e_2}$ tetszőleges **E**-beli elemek.



3.táblázat

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

Ha egy halmazon $\aleph_w$ 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,…,17).

Ha egy halmazra $\aleph_w$ reflexív, tranzitív és szimmetrikus tulajdonságokkal rendelkezik, akkor ekvivalencia relációt határoz meg a vizsgált halmazon. Vezessünk le egy képzelt vizsgálódást. Az elemek halmazán a $\aleph_w$ 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 koordinatív (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 $\aleph_w$ 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 előbbiekben 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) irányítottságot kölcsönöz[16](16). Ez matematikai szempontból antiszimmetriának tekinthető.

A rendezett halmaz véges nem üres részhalmazaiban 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 szuprémuma az illető halmazon.

Megjegyzés: Az A halmazokon értelmezett relációra a részhalmazokon rendre előforduló kisebb elemek legkisebbjét infimumnak, a nagyobb elemek legnagyobbját szuprémumnak nevezzük. Az A halmaz (sor) kötés szempontjából felkínált infimuma nemesgáz, szuprémuma 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 hálóhoz kapcsolódó homomorfizmus azt jelenti, hogy a két háló egyes infimumai és szuprémumai egymásnak

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

felelnek meg. Ha az egyik háló 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 tejesen rendezett struktúrában legfennebb egy minimális, illetve maximális elem létezik.

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

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

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

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 tanulmányozásában[18](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 jól rendezett struktúra és valószínűnek tarjuk, hogy kiterjeszthető 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-egyet 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}

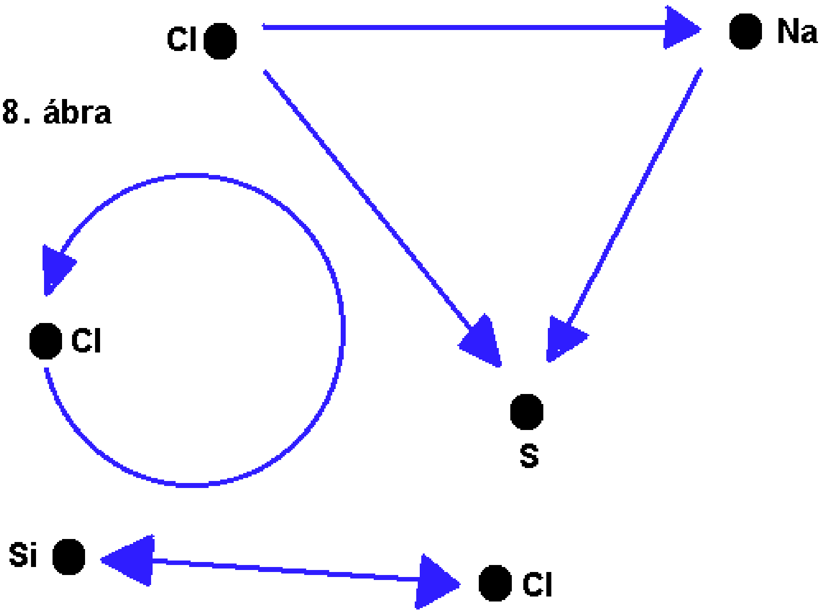
T={Si, P, S, Cl}

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 halmaz, mert érvényes a reflexív és tranzitív tulajdonság [lásd a 8. ábra].

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

8. ábra



A reflexív tulajdonság a Cl esetében (Cl$\aleph_w$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$\aleph_w$Na, Na$\aleph_w$S, ugyanúgy Cl$\aleph_w$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$\aleph_w$Si mint Si$\aleph_w$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 találhatók. Ugyanakkor az említett sor elemei egy jól rendezett 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 kötést hozna létre. A kémiai kötés létrejöttének feltétele a kötőpartnerek minősége. A minőségi vizsgálattal már találkoztunk a táblázatelemek részhalmazokra bontásánál. A részhalmazokra bontás 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 kategorikus 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 elkö-

---

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

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

vetkezendőkben 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, részhalmazán a kötés fémes kötés. A nemfémek Si, P, S, Cl részhalmazán, pedig apoláris kovalens kötés jön létre. A nemesgáz Ne és hasonló más ilyen elemek esetén csak gyenge kötés, az ún. 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 részhalmazunk maradt, a fémek és a nem fémek részhalmaza. Bármely fém az **M** halmazból kötést létesít a **T** halmaz valamely elemével, akkor a kötés ionos jellegű. Ha a részhalmazokon 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 apoláris kovalens kötés[21] (21).

Örülünk, ha gondolatunkra bárki odafigyelt.

Még nagyobb örömöt okozna, ha észrevételünk a napi munkájában bárkit segítene.

[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 közkívánatra felolvastuk a sepsiszentgyörgyi Mikes Kelemen Líceum hagyományos évi Tudományos Konferenciáján 1993, majd 1994-ben is. Ennek ellenére állapota máig is kézirat.