

СИСТЕМАТИЗАЦИЯ ХИМИЧЕСКОГО ПРОСТРАНСТВА ДВУХЭЛЕМЕНТНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Работа основана на теории множеств. Химические элементы и двухэлементные вещества рассматриваются как генетически связанные множества в рамках таблицы Д.И. Менделеева. При систематизации множества двухэлементных веществ обнаружена периодичность свойств подмножеств, представляющих собой набор бинарных соединений с определенным элементом. Под свойствами подмножеств понимаются статистические данные. Предложены дальнейшие шаги по расширению метода систематизации химического пространства.

Ключевые слова: химическое пространство, множество, система, периодичность.

Постановка проблемы

На сегодняшний день предпринималось много попыток систематизировать химическое пространство, это обуславливается стремлением к разработке более совершенных способов предсказания новых веществ и к открытию универсальных закономерностей развития материи. В общем, под систематизацией набора химических веществ понимается организация их в систему путём выявления структурированных связей между ними. В базах данных зарегистрировано 174 млн. химических веществ, в их число входят органические и неорганические химические вещества, а также 68 млн. цепочек белков и ДНК [1]. Выявление связей в таком колоссальном множестве является не простой задачей, т.к. установлено, что при рассмотрении дискретной системы количество отраженной информации о ней возрастает в логарифмической зависимости с ростом количества её элементов [2]. Но, с другой стороны, известно, для того чтобы выделить систему, необходимо определить системообразующий фактор, который объясняет сущность сил, объединяющих множество в единое.

Анализ последних исследований и публикаций

В химическом пространстве есть выделенные группы веществ, которые внутри множества не структурированы. Например, в справочнике диаграмм двойных сплавов металлов [3] используется упорядочивание на основе английского алфавита, этот способ не несет научного смысла, и применяется для удобства анализа информации. Частично оформленную систему можно наблюдать в множестве силикатов, при их систематизации используется кристаллическая структура (островные, цепочные, каркасные и т.д.).

Составляет большой интерес подход, применяемый в работе [4], где впервые, в таком роде, составлены систематические таблицы взаимодействия металлов с другими элементами. В таблицах представлены лаконичные данные о взаимной растворимости компонентов, образовании металллов или отсутствии взаимодействия в двойных системах на основе металлов (рис. 1). Подобное рассмотрение возможных взаимодействий металлов, как отдельных множеств, исследовались в более поздних работах: бария [5], свинца [6], европия и иттербия [7], бериллия [8].

Что касается современных работ, то они преимущественно связаны с хемоинформатическим анализом, при котором химическое пространство визуализируется в 2D и 3D пространстве. Например, для поиска фармацевтических веществ нашли широкое применение нейросетевые алгоритмы [9,10], для нахождения веществ «рекордсменов» применяют эволюционные алгоритмы с использованием молекулярных квантовых чисел [11].

Рассмотренные работы узкой направленности, не несут в себе системных подходов и не поднимают общих вопросов о закономерностях, которые лежат в формировании границ и связей между частями химического пространства. Если же речь идет о сведении химического пространства в единую систему, то очевидным системообразующим фактором должно выступать положение о зависимости свойств веществ от их атомно-молекулярного строения. Весомым доводом о высокой эффективности использования модели атома, при решении рассматриваемой задачи, выступает периодическая система элементов (ПСЭ), отображающая связь свойств одноэлементных веществ со строением электронных оболочек.

IA	IIA	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIII A			IB	IIB	IIIB	IVB	VB	VIB	VII B	VIII B
1	2	3'	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
																H	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U												

Рис. 1. Взаимодействие лития с элементами периодической системы:
 1 – непрерывные растворы; 2 – органические твердые растворы; 3 – соединения;
 4 – эвтектические смеси; 5 – нет взаимодействия; 6 – неизученные [4].

В основе ПСЭ лежит периодический закон, гласящий: «Свойства химических элементов, а также формы и свойства образуемых ими простых веществ и соединений находятся в периодической зависимости от величины зарядов ядер их атомов». Д.И. Менделеев вывел закон на основе сложной им таблицы и сформулировал его следующим образом: «Свойства элементов, а потому и свойства образуемых ими простых и сложных тел, стоят в периодической зависимости от их атомного веса». Основным подтверждением действенности системы и закона было обнаружение предсказанных им элементов. Особенно примечательно то, что свойства найденных элементов и их соединений совпали с прогнозом. Также важно отметить, что Менделеев открыл системность в тогдашнем наборе химических элементов, оперируя данными о химическом пространстве из 11484 веществ [12], это даёт основания полагать, что системообразующий фактор ПСЭ, может быть основой для естественной систематизации современного химического пространства.

Цель (задачи) исследования

Цель данной работы заключается в определении естественного системообразующего фактора и выявлении системных связей в современном химическом пространстве, с использованием опыта систематизации химических элементов.

Основной материал исследования

В контексте теоретико-множественных представлений ПСЭ можно выразить уравнениями:

$$M_I = \{M_I, M_{II}, M_{III}, M_{IV}, M_V, M_{VI}, M_{VII}\}$$

$$M_I \in \{H, He\}, |M_I| = 2.$$

$$M_{II} \in \{Li, Be, B, C, N, O, F, Ne\}, |M_{II}| = 8.$$

$$M_{III} \in \{Na, Mg, Al, Si, P, S, Cl, Ar\}, |M_{III}| = 8.$$

$$M_{IV} \in \left\{ \begin{matrix} K, Ca, Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, \\ Ni, Cu, Zn, Ga, Ge, As, Se, Br, Kr \end{matrix} \right\}, |M_{IV}| = 18.$$

$$M_V \in \left\{ \begin{matrix} Rb, Sr, Y, Zr, Nb, Mo, Tc, Ru, Rh, \\ Pd, Ag, Cd, In, Sn, Sb, Te, I, Xe \end{matrix} \right\}, |M_V| = 18.$$

$$M_{VI} \in \left\{ \begin{matrix} Cs, Ba, La, Ce, Pr, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, \\ Ho, Er, Tm, Yb, Lu, Hf, Ta, W, Re, Os, \\ Ir, Pt, Au, Hg, Tl, Pb, Bi, Po, At, Rn \end{matrix} \right\}, |M_{VI}| = 32.$$

$$M_{VII} \in \left\{ \begin{matrix} Fr, Ra, Ac, Th, Pa, U, Np, Pu, Am, \\ Cm, Bk, Cf, Es, Fm, Md, No, Lr, Rf, \\ Db, Sg, Bh, Hs, Mt, Ds, Rg, Cn, Nh, \\ Fl, Mc, Lv, Ts, Os \end{matrix} \right\}, |M_{VII}| = 32.$$

где M_3 – множество всех элементов; M_1 – множество элементов первого периода; $M_1 \in \{H, He\}$ – состав множества; $|M_1|=2$ – мощность множества.

Такое представление отображает множество элементов как систему, состоящую из семи подмножеств с закономерным возрастанием мощности (2,8,8,18,18,32,32). Некоторые свойства системы описаны ниже:

$$|M_3| = 118,$$

$$M_{3\max}^{T_{nl}} = 3550^\circ \text{C},$$

$$M_{3\min}^{T_{nl}} = -272^\circ \text{C},$$

где $|M_3|$ – мощность множества, равная количеству элементов в периодической системе; $M_{3\max}^{T_{nl}}$ – максимальное значение температуры плавления вещества (температура плавления углерода); $M_{3\min}^{T_{nl}}$ – минимальное значение температуры плавления вещества (температура плавления гелия).

На рис. 1 представлен баланс температур плавления 99 элементов.

Как известно, свойства определенного элемента взаимосвязаны со свойствами соседних элементов (рис. 2) [13], кроме того, система наглядно показывает соотношения между свойствами их соединений (1).

$$\frac{M^O}{M^S} \approx \frac{M^F}{M^{Cl}} \quad (1),$$

где M^O – множество соединений с кислородом; M^S – множество соединений с серой; M^F – множество соединений с фтором; M^{Cl} – множество соединений с хлором.

Следовательно, свойства множества химических соединений определённого элемента будут

находиться в периодической зависимости со свойствами аналогичных множеств системы. Под свойствами множества химических соединений нужно понимать статистические характеристики выделенной системы, ими могут быть: мощность, распределение веществ по определённому свойству, минимальный и максимальный показатель свойства и т.д. С целью проверки умозаключения, выраженного в формуле 1, было взято химическое пространство из справочника [14], состоящее из 10063 веществ, из него выделено химическое пространство двухэлементных соединений – множество химических веществ, состоящих из различных комбинаций двух элементов.

Сформированное множество можно представить в следующем виде:

$$M_{23} = \{M_{23}^H, M_{23}^{He}, M_{23}^{Li}, M_{23}^{Be}, \dots, M_{23}^{Og}\}$$

$$|M_{23}| = 2261,$$

$$M_{23\max}^{T_{nl}} = 3960^\circ \text{C},$$

$$M_{23\min}^{T_{nl}} = -224^\circ \text{C},$$

где M_{23} – множество двухэлементных соединений; $|M_{23}|$ – мощность множества двухэлементных соединений; $M_{23\max}^{T_{nl}}$ – максимальное значение температуры плавления вещества в множестве двухэлементных соединений (температура плавления карбида гафния); $M_{23\min}^{T_{nl}}$ – минимальное значение температуры плавления в множестве двухэлементных соединений (температура плавления фторида кислорода).

Распределение на рис. 3 отличается от свойств системы одноэлементных веществ, это объясняется преобладанием в справочном материале органических соединений, т.е. M_{23}^C значительно больше, чем остальные подмножества.

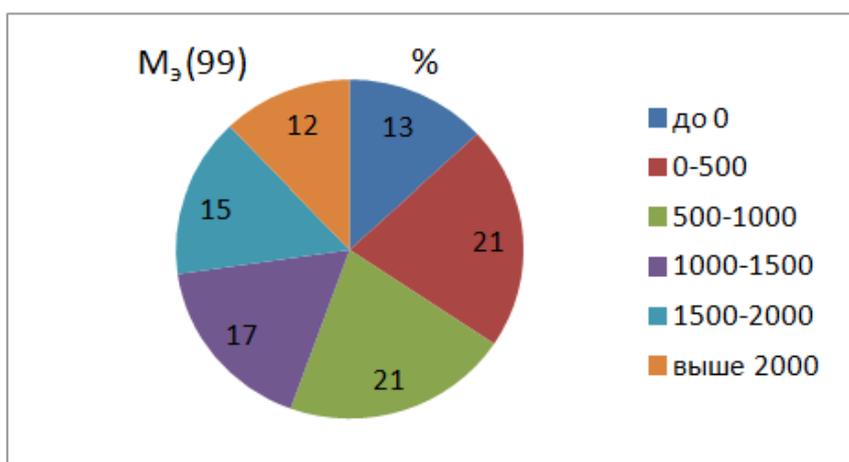


Рис. 1. Распределение элементов по температуре плавления (°C)

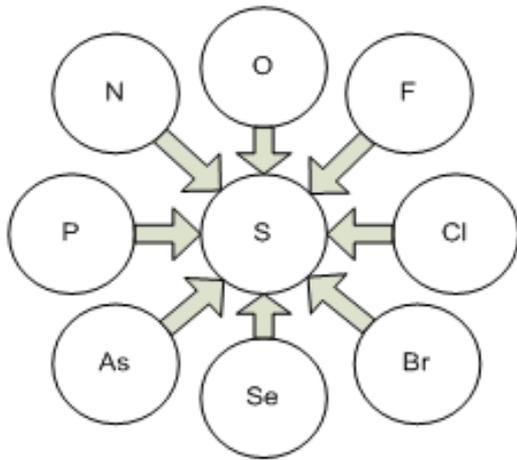


Рис. 2. Схема связей элементов

Чтобы привести исследуемое множество к однородности, из него были убраны вещества с углеродом ($M_{23} \cup M_{23}^C = M_{23}^{безC}$), в результате образовалось множество со следующими свойствами:

$$|M_{23}^{безC}| = 1532,$$

$$M_{23}^{безC T_{max}} = 3300^\circ \text{C},$$

$$M_{23}^{безC T_{min}} = -224^\circ \text{C},$$

где $M_{23}^{безC}$ – множество двухэлементных соединений без углерода; $|M_{23}^{безC}|$ – мощность множества двухэлементных соединений без углерода; $M_{23}^{безC T_{max}}$ – максимальное значение температуры плавления вещества в множестве двухэлементных соединений без углерода (температура плавления нитрида гафния); $M_{23}^{безC T_{min}}$ – минимальное значение температуры плавления вещества в множестве двухэлементных соединений без углерода (температура плавления фторид кислорода).

Сравнение свойств M_{23} и $M_{23}^{безC}$ показало их общую закономерность (см. рис. 1 и 4), поэтому, для дальнейшего расширения метода систематизации подмножества ($M_{23}^H, M_{23}^{He}, M_{23}^{Li}, M_{23}^{Be}, \dots, M_{23}^{Og}$) были расположены в соответствии с ПСЭ.

На рис. 5 представлена часть сформированной системы, где наблюдается четкая тенденция по периодам и группам, мощность множеств возрастает слева направо, и убывает сверху вниз, с мышьяком наименьшее количество соединений, с фтором наибольшее. Наблюдается тенденция уменьшения тугоплавких веществ по диагонали от азота к бром.

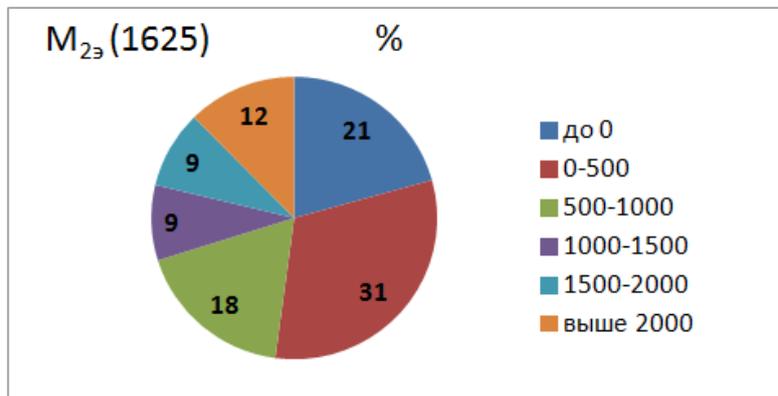


Рис. 3. Распределение двухэлементных соединений по температуре плавления (°C)

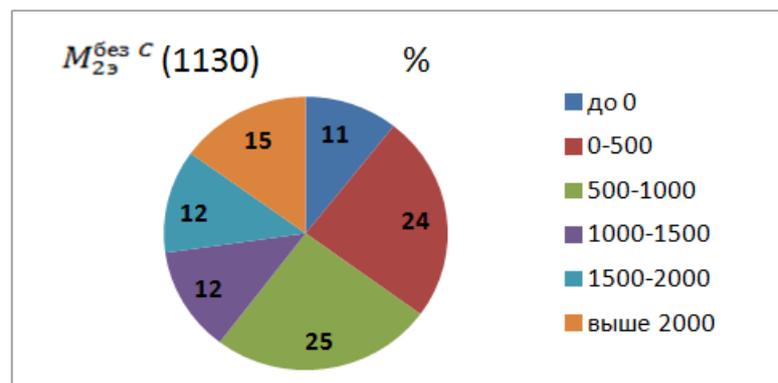


Рис. 4. Распределение двухэлементных соединений по температуре плавления (°C) в множестве без углерода

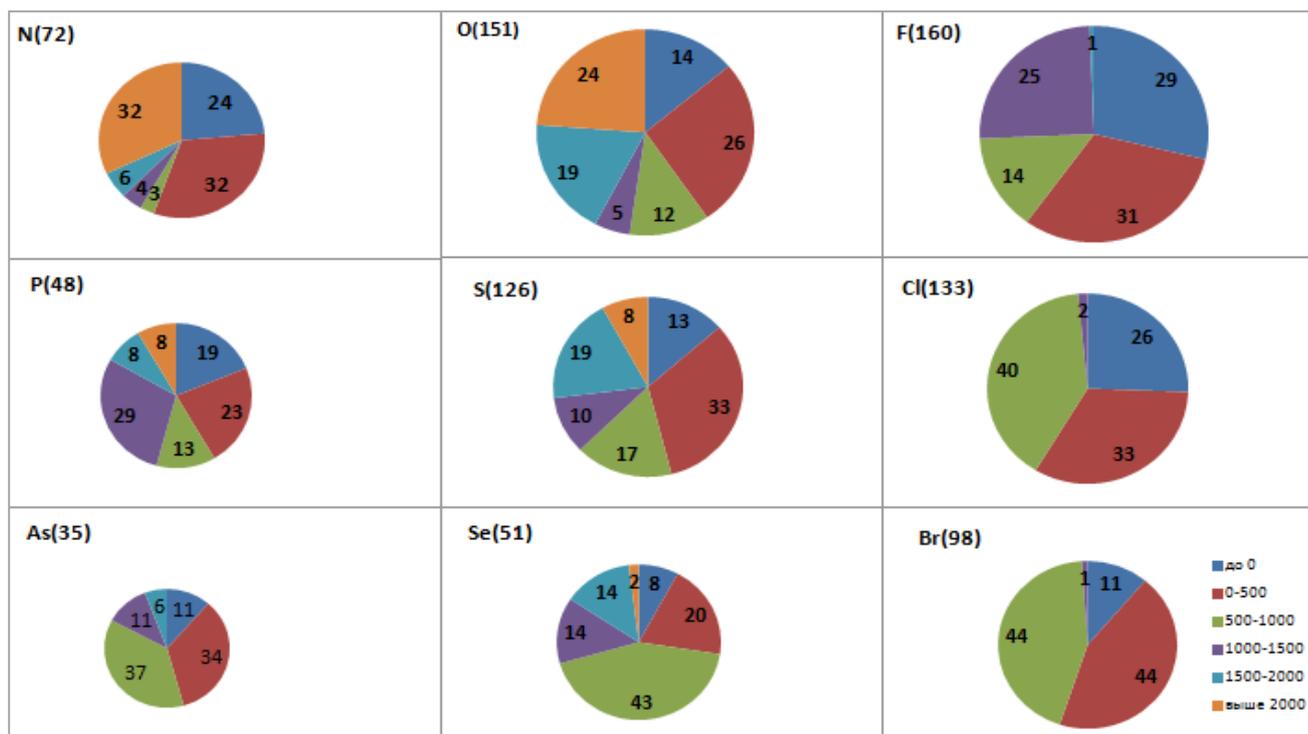


Рис. 5. Свойства подмножеств M_{23}
(мощность и распределение по температуре плавления)

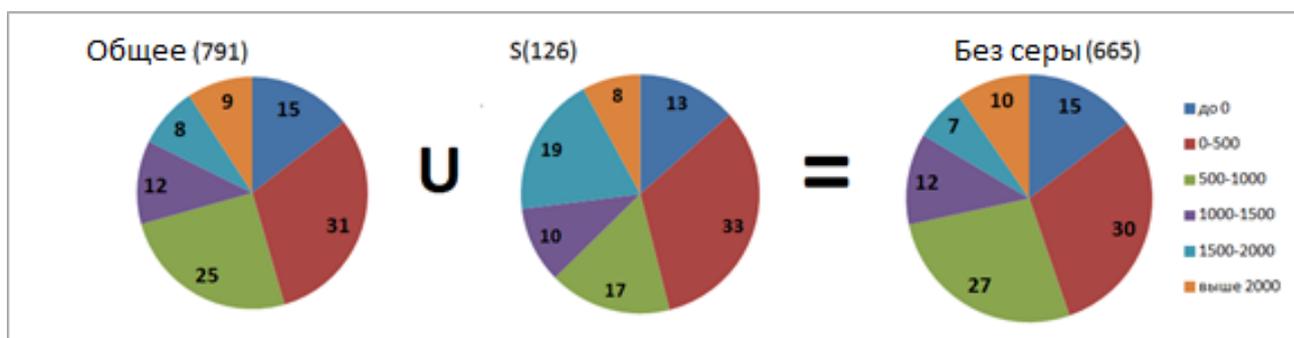


Рис. 6. Результаты исследования двухэлементного химического пространства

В группе фтора отсутствуют тугоплавкие вещества, но преобладают легкоплавкие с температурой плавления до 1000°C.

Также примечательно то, что распределение в общем множестве на рис. 5 достаточно схоже с распределением в множестве серы. При вычитании из общего множества серосодержащих веществ его распределение практически не меняется, следовательно, центральное множество имеет средние показатели (рис. 6).

Таким образом, в рамках принципов систематизации элементов, обнаруживается взаимосвязь в химическом пространстве двухэлементных соединений. Новые факты периодичности вскрывают четкие связи между сложными веществами, тем самым намечая пути к их естественной систематизации.

Вывод

1. При рассмотрении химического пространства в рамках периодического закона проявляются системные взаимосвязи. Множество двухэлементных веществ с определенным элементом находится в периодической взаимосвязи с аналогичными множествами, это даёт основание предполагать, что химическое пространство является сбалансированной системой подобно таблице Менделеева.

2. Для расширения рассмотренной методики систематизации химического пространства необходимо:

- пользуясь базами химических веществ, провести статистический анализ максимально полного химического пространства;
- расширить перечень анализируемых свойств;

- проанализировать структуру подмножеств по элементам;
- оценить предсказательную возможность системы.

Список литературы

1. www.cas.org
2. Вяткин В.Б. Синергетическая теория информации. Часть 2. Отражение дискретных систем в плоскости признаков их описания // Научный журнал КубГАУ [Электронный ресурс]. – Краснодар: КубГАУ, 2009. – №45(1). Режим доступа: <http://ej.kubagro.ru/2009/01/pdf/12.pdf>
3. Диаграммы состояния двойных металлических систем: Справочник: В 3т. / Под общ. ред. Н.П. Лякишев. – М. Машиностроение, 1996, 1997, 2001, т.1-3, 992, 1024, 1320 с.
4. Корнилов И.И., Матвеева Н.М., Пряхина Л.И., Полякова Р.С. Металлохимические свойства элементов периодической системы. Монография-справочник. – «Наука»: М. – 1986.
5. Муминов У.А. Диаграммы состояния и термодинамические свойства сплавов на основе бария. 02.00.04. Автореферат диссертации на соискание учёной степени кандидата химических наук. – Душанбе. – 2010.
6. Джураев Т.Д., Ходжаев Ф.К., Муслимов И.Ш., Махмадуллоев А.Х. Оценка степени изученности двойных диаграмм состояния систем свинца с элементами периодической таблицы. Доклады академии наук республики Таджикистан. – 2014. Т.57, №5, с. 391-394.
7. Рахимов Ф. К. Диаграммы состояния и термодинамические свойства сплавов европия и иттербия. 02.00.04. Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата химических наук. – Душанбе. – 2015.
8. Халимова М.И. Взаимодействие бериллия с элементами периодической таблицы и разработка сплавов с его участием. 02.00.04. Диссертация на соискание учёной степени кандидата химических наук. – Душанбе. – 2015.
9. Dmitry S. Karlov, Sergey Sosnin, Igor V. Tetko and Maxim V. Fedorov. Chemical space exploration guided by deep neural networks. This journal is © The Royal Society of Chemistry 2019 RSC Adv., 2019, 9, 5151-5157.
10. Jean-Louis Reymond and Mahendra Awale. Exploring chemical space for drug discovery using the chemical universe database. ACS Chem. Neurosci. 2012, 3, 649-657.
11. Zahed Allahyari and Artem R. Oganov, Nonempirical Definition of the Mendeleev Numbers: Organizing the Chemical Space: J. Phys. Chem. C 2020, 124, 43, 23867-23878.
12. Wilmer Leal, Eugenio J. Llanos, Peter F. Stadler, Jurgen Jost, Guillermo Restrepo. The chemical space from which the periodic system arose. Max-Planck-Institut für Mathematik in den Naturwissenschaften Leipzig; August 21, 2019.
13. Семишин В.И. Периодическая система химических элементов Д.И. Менделеева. – Изд-во «Химия», 1972 г.
14. Кипер Р.А. Свойства веществ: Справочник по химии / Р. А. Кипер. – Хабаровск, 2013. – 1016 с.

A.N. Martynenko

Donetsk National Technical University (Donetsk)

SYSTEMATIZATION OF THE CHEMICAL SPACE OF TWO-ELEMENT COMPOUNDS

Background. *The modern chemical space is a colossal array of substances, between which there are no clear connections. Scientists distinguish various groups of substances (organics, alloys, silicates, etc.), but do not consider them in aggregate, thereby not asking questions about the laws that lie in their formation. Attempts are being made today to represent parts of the chemical space, but they do not carry systemic views.*

Materials and/or methods. *As a working hypothesis, the position was used that chemical elements and two-element substances are considered as genetically related sets within the framework of the Mendeleev table. From the point of view of set-theoretic concepts, the chemical space is considered as a set of subsets of chemical compounds with certain elements. The properties of subsets are statistical data. Statistical analysis was carried out in Microsoft Excel.*

Results. *A method for systematizing the chemical space has been developed and tested on a variety of two-element compounds. When considering the chemical space within the framework of the periodic law, systemic relationships appear. In many two-element compounds, the periodicity of the properties of subsets, which is a set of binary chemicals with a certain element, was found.*

Conclusion. Many two-element substances with a certain element are in periodic relationship with similar multitudes, which suggests that the chemical space is a balanced system like the Mendeleev table.

Keywords: chemical space, set, system, periodicity.

Сведения об авторе

А.Н. Мартыненко

SPIN-код: 7795-9758

Телефон: +380 (71) 370-97-21

Эл. почта: estet_08@mail.ru

Статья поступила 24.12.2021 г.

© А.Н. Мартыненко, 2021

Рецензент д.т.н., проф. К.Н. Маренич

