

До питання про класифікацію металів

Коріцький Г.Г., Маняк М.А., Реков Ю.В., Червоний І.Ф.

Анотація. На підставі аналізу характеристик хімічних елементів сформований комплекс ознак, що дозволяє сформулювати механізм класифікації елементів Періодичної системи на метали і неметали. Запропоновано три системи класифікаційних угруповань металів з використанням, як основна ознака, температури плавлення, температури кипіння і щільності.

Аннотация. На основании анализа характеристик химических элементов сформирован комплекс признаков, позволяющий сформировать механизм классифицирования элементов Периодической системы на металлы и неметаллы. Предложены три системы классификационных группировок металлов с использованием, в качестве основного признака, температуры плавления, температуры кипения и плотности.

Summary. On the basis of analysis of descriptions of chemical elements the complex of signs is formed to form the mechanism of classification elements of the periodic system on metals and non-metals. Three systems of classificational metals groups on the base of offered such signs; temperatures of melting, temperature of boiling and dense.

Класифікація металів з деяких пір перетворилася на нерозв'язну проблему. І тому є кілька причин. Основна полягає у відсутності єдиного і чіткого розуміння суті і дотримання механізмів процедури класифікації, а також призначення і форм висвітлення її результатів. Останні (процедуру і її результати) часто позначають одним поняттям, не акцентуючи уваги на їх суті. Чи потрібні специфічні терміни, що визначають процедуру і її результат? Звичайно, потрібні. Це дозволить багато в чому виключити плутанину у визначенні, висвітленні і дозволі більшості проблем, пов'язаних з класифікацією. Крім того, норми нашої мови рекомендують дію і її результат позначати різними термінами. Нам уявляється справедливим позначити процедуру терміном «класифікація», а її підсумок — «система класифікаційних угруповань». Останній термін якнайповніше відображає суть, оскільки основною метою процедури є розбиття певної множини об'єктів на підмножини, які і складуть систему класифікаційних угруповань.

Класифікацію виправдовують двома мотивами — гносеологічним і споживчим. Гносеологічний (пізнавальний) мотив можна визначити як прагнення сформулювати якнайповнішу і багатопланову модель групи об'єктів, що вивчається, зокрема її структуру і внутрішні зв'язки. Споживчий мотив полягає, як правило, в необхідності використовувати модель групи об'єктів, що вивчається, в реальних технологічних процесах, наприклад у навчанні,

при розробці методів дослідження, при аналізі отриманої інформації і т.д., аж до тривіальних процедур механічного сортування. Відзначимо, що сформована модель множини, що класифікується, є інформаційним комплексом, що включає всю палітру ознак його елементів і повну систему внутрішніх зв'язків. Отже, процедура класифікації є строго регламентованим набором послідовних операцій генерування або збору інформації щодо ознак об'єктів, їх пріоритетів і значень, про характер та ієрархію зв'язків між елементами множини, що класифікується. Первинна інформація служить підставою для формування ідентифікаторів класифікаційних угруповань. Єдиним критерієм якості процедури є повна відсутність об'єктів, що претендують на розміщення одночасно в кількох класифікаційних угрупованнях. Поява «порожніх» угруповань свідчить про некоректне призначення меж класифікаційних угруповань.

Механізм класифікації, тобто послідовність операцій і їх параметри, наприклад глибина опрацювання ієрархії ознак і т.п., регламентує безпосередній виконавець або постановник проблеми залежно від мети і прогнозованих результатів.

На практиці знайшли застосування три види класифікації — ранжирування, просте (однорівневе) і повне (багаторівневе).

Ранжирування (пряме або зворотне) є примітивний розподіл об'єктів за значенням єдиного параметра, що набуває довільного, нефіксованого значення. Місце елемента в множині (ряду), що ранжирується, визначене принци-

пом ранжирування — за наростанням або зменшенням значення параметра.

Проста (однорівнева) класифікація є процедурою формування системи класифікаційних угруповань, ідентифікатори яких розрізняються лише за величиною (значенням) ознаки. Ці системи можуть бути відкритими або закритими, залежно від того, чи можлива поява нових угруповань при розширенні початкової множини. В межах кожного угруповання об'єкти, як правило, ранжують.

Повну (багаторівневу) класифікацію виконують з використанням групи ознак, дотримуючись таких правил:

- ▶ Ознаки, включені до переліку, повинні бути ранжировані по пріоритету.
- ▶ Перелік може містити тільки загальні ознаки.
- ▶ На кожному подальшому рівні класифікують всі без винятку угруповання з використанням ознаки, що має черговий пріоритет.
- ▶ Кількість рівнів класифікації повинна співпадати з кількістю ознак, включених до переліку.

Формування переліку загальних ознак, які могли б скласти ідентифікатори класифікаційних угруповань, має певну специфіку. Найвищі пріоритети виділяють ознакам, вираженим постійною (або умовно постійною) величиною за загальноприйнятою шкалою оцінок, наприклад колір — червоний, зелений і т.д. Ознаки, характеристики яких міняються в широкому діапазоні значень і можуть набувати закономірної величини, використовують як ідентифікатор класифікаційних угруповань лише тоді, коли їх значення строго фіксовані, наприклад, найменування фірми-виробника, номінальна вартість банкноти, національна належність валюти і т.п. Але часто величина ознаки набуває випадкового значення. Наприклад, антропометричні характеристики людей, їх вік, довжина хвилі монохроматичного випромінювання і т.п. У таких випадках досить ідентифікувати діапазони значень, в яких може знаходитися величина даної ознаки.

Модель множини, що піддається повній класифікації, є ідеальною системою ранжированих угруповань, в межах якої можна не тільки перепризначати пріоритети ознак, але і піддавати незалежно кожне з угруповань будь-якому виду класифікації з використанням оригінальних наборів локальних класифікаційних ознак.

Завершальна процедура класифікації полягає в уточненні остаточної номенклатури класифікаційних угруповань (їх кількості і найменувань, наявності «порожніх» угруповань), а також їх місця в системі (наявності і характер зв'язків між ними).

Класифікацію металів передбачає вирішення, принаймні, двох проблем.

Першою проблемою є питання про об'єктну базу класифікації. Іншими словами — а що ж ми класифікуємо? Питання далеко не довольне, бо від його вирішення залежить номенклатура ознак, які слід покласти в основу ідентифікаторів класифікаційних угруповань. Об'єктну базу можуть скласти метали як в атомарному, так і в конденсуючому стані. І ті, і інші можуть бути класифіковані, проте системи класифікаційних угруповань в кожному випадку будуть унікальними.

У частині класифікації хімічних елементів в атомарному стані фізики вже розставили всі акценти і крапки над «і». Їх рекомендації вельми повно і наочно демонструє відома таблиця хімічних елементів в її «довгому» варіанті [1]. Вона відображає порядок формування електронних оболонок атомів, який зазнає спонтанних змін в результаті накопичення критичної кількості електронів на певних рівнях. У результаті — чотири класифікаційні угруповання, позначені індексами s-, p-, d- і f-підрівнів. Зображають цю систему на базі класичної таблиці хімічних елементів, ранжированих по групах і порядковому номері (рис.1,а). Якщо врахувати, що s- і p- підрівні складають один, зовнішній рівень, то класифікаційні угруповання s- і p- можна об'єднати, а систему уявити такою, що складається не з чотирьох, а з трьох угруповань, що ідентифікуються індексом заповнюваного електронного рівня (рис.1,б). Примітно, що ніякої вказівки на прямий і однозначний зв'язок між конструкцією атома речовини і його належністю до металів в цій системі класифікації немає.

Конденсуючу фазу хімічного елементу характеризує абсолютно інший комплекс ознак. Пріоритетними стають ознаки прикладного характеру, що визначають технологічні і службові можливості речовини, і перш за все ті, які визначають умови, механізми і результати переходу речовини в конденсуючий стан, наприклад теплофізичні характеристики конденсуючих фаз і фазових переходів.

Наступна проблема полягає в тому, що навіть хіміки не можуть точно і однозначно визначити метали. Іншими словами, поняття «метал» і «неметал» до цих пір «розмиті». Більш того, якщо використовувати поняття «Перехідні елементи» (терміни «напівметали» і «металоїди» вже не в честі), розмитими виявляться всі три.

В даний час вважають безперечними, що в групу металів не можуть бути включені газоподібні (у природних умовах) елементи. За деякими іншими міркуваннями в групу металів

ПЕРІОДИ		а.																		
1	1																	2		
	H																	He		
2	3	4													5	6	7	8	9	10
	Li	Be													B	C	N	O	F	Ne
3	11	12													13	14	15	16	17	18
	Na	Mg													Al	Si	P	S	Cl	Ar
4	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36		
	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr		
5	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54		
	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe		
6	55	56	57	70	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86
	Cs	Ba	La	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	87	88	89	102	103	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118
	Fr	Ra	Ac	No	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Uun	Uuu	Uud	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo

ПЕРІОДИ		би.																		
1 (K)	1	2																		
	H	He																		
2 (L)	3	4	5	6	7	8	9	10												
	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne												
3 (M)	11	12	13	14	15	16	17	18												
	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar												
4 (N)	19	20	31	32	33	34	35	36	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48		
	K	Ca	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn		
5 (O)	37	38	49	50	51	52	53	54	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80		
	Rb	Sr	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd		
6 (P)	55	56	81	82	83	84	85	86	103	104	105	106	107	108	109	110	111	112		
	Cs	Ba	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg		
7 (Q)	87	88	113	114	115	116	117	118	102	103	104	105	106	107	108	109	110	111		
	Fr	Ra	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Uun	Uuu	Uud		
s-			p-						d-										f-	
K0.Q0									N-1.Q-1										P-2.Q-2	
ГРУПИ ЕЛЕМЕНТІВ																				

Мал. 1. «Довга» форма таблиці хімічних елементів. а. — класична версія [1]; би. — альтернативна.

не включають бор, вуглець, фосфор, сірку, бром і йод. У результаті виникла спокуса розділити «метали» і «неметали» межею, що сполучає осередки №5 (бор) і №85 (астат). Проте конкретного і офіційного рішення з питання приналежності «прикордонних» елементів до тієї або іншої групи до цих пір немає. Єдиним, на наш погляд, серйозним аргументом для встановлення статусу «прикордонних» елементів можна вважати ступінь окислення як показник типу іона, у вигляді якого елемент бере участь в хімічних взаємодіях. Атоми елементів з позитивним ступенем окислення легко переходять в катіон, а з негативною — в аніон. Тенденція віддавати або приймати електрон схожий на донорство і поняття «донор» і «акцептор» можна було б використовувати як ідентифікатори класифікаційних угруповань, що вміщують відповідно метали і неметали. Потенційними елементами-акцепторами (неметалами) вважають всі елементи,

розташовані праворуч від вертикалі «Бор — Талій» в групі *p-елементів* (мал. 1,а). Проте, серед них опинилися такі типові метали, як свинець, вісмут, олово, сурма, полоній. Загальноприйнятими межі «бор — аstat» кремній, миш'як, селен, сурма і теллур потрапляють в прикордонну зону. При вирішенні їх долі ми взяли до уваги окислювальну активність елементів-акцепторів (традиційних окислювачів, що створюють аніони), яку оцінювали схильністю до утворення з'єднань з елементом-донором (типовим металом). Такі з'єднання відомі як «-іди» — сульфіди, карбіди, силіциди, плумбіди, теллуриди та ін. Хімічна література містить достатньо інформації про склад, властивості, застосування і способи отримання таких сполук [2]. Їх «географічна належність» до таблиці елементів дійсно не виходить за межу «бор-талій». Але здатність формувати такі сполуки в природних умовах мають далеко не всі. У природі виявлені мінерали з «-ідами» тіль-

ПЕРІОДИ	2	3	4																	5	
		Li	Be																	B	
	3	11	12																	13	14
		Na	Mg																	Al	Si
	4	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32						
		K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge						
	5	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51					
	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb						
6	55	56	57	70	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84			
	Cs	Ba	La	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po			
7	87	88	89	102	103	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116			
	Fr	Ra	Ac	No	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Uun	Uuu	Uud	Uut	Uuq	Uup	Uuh			
		s-		f-				d-						p-							
ГРУПИ ЕЛЕМЕНТІВ																					

Мал. 2. Фрагмент таблиці хімічних елементів з якої вилучені неметали.

ки у миш'яку, селені і теллурі. Всі «-іди» решти «прикордонних» елементів отримують виключно в штучних умовах з великими витратами енергії. Ця обставина дозволяє нам віднести кременій і сурму до групи металів, залишивши миш'як, селен і теллур в списку неметалів. На мал. 2 поданий фрагмент таблиці хімічних елементів, з якої вилучені неметали.

У системах класифікації металів, що склалися до теперішнього часу, використовують дві групи ознак — технологічні і геохімічні. Перші включають такі загальні характеристики як щільність, температуру плавлення. Значно рідше використовують електричну провідність, теплопровідність, температуру переходу в надпровідний стан і ін. До групи геохімічних характеристик входять такі показники, як поширеність в природі (кларк), здатність створювати власний мінерал, можливість протистояти геохімічним агентам і ін. Значення відмічених геохімічних ознак відрізняються завидною динамічністю, оскільки ні склад земної кори, ні закономірності і механізми її формування повністю не вивчені. Тому формувати ідентифікатори на базі таких ознак для отримання повної і якісної моделі нераціонально. Більш того, жодна з сучасних систем класифікації металів не фіксує «де-юре» значення класифікаційної ознаки, яка визначає належність конкретного металу до тієї або іншої групи.

Із врахуванням відмічених обставин, наша увага була сконцентрована на використанні як базові класифікаційні ознаки звичних характеристик — температури плавлення і кипіння (переходу з одного конденсуючого стану в інший) і щільності хімічних елементів. Наявність фактичних даних про значення цих ознак робить завдання цілком здійснимим. При формуванні ідентифікаторів класифікаційних угруповань були використані довідкові дані

про значення базових характеристик [3]. Завдання було вирішене в два етапи:

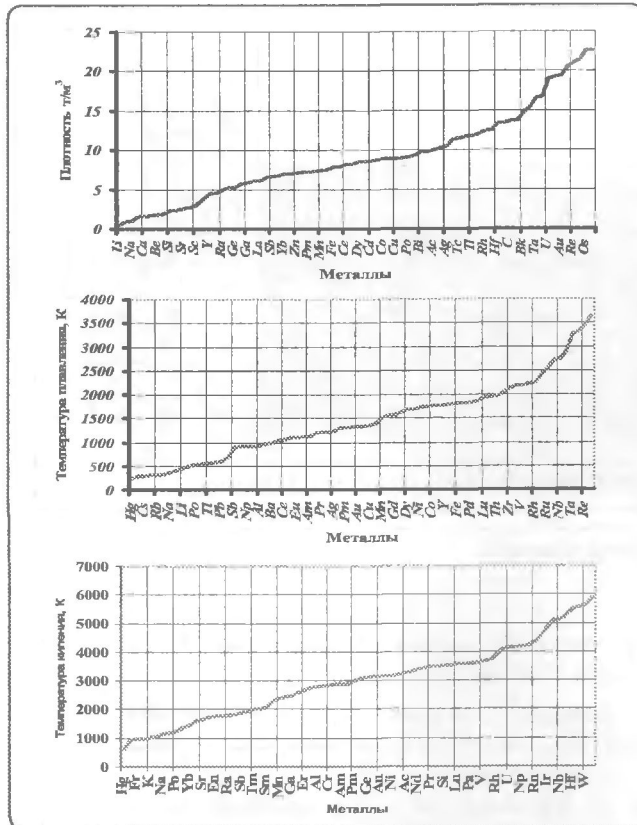
1. Визначена можливість розчленовування всього ряду значень параметра на незалежні діапазони.
2. Оптимізовані межі сформованих діапазонів.

На першому етапі всі метали були ранжировані за відповідною ознакою з подальшим графічним моделюванням характеру зміни величини ознаки. Отримані моделі предані на мал. 3. Для виявлення потенційних меж діапазонів значень оцінили характер зміни градієнта ознак в кожній з сформованих лав. З метою оптимізації гістограм використовували значення відносних градієнтів. Дані, приведені на мал. 4, відзначають наявність в кожному ряду сплесків відносних градієнтів, що відповідають істотним «стрибкам» значень параметрів.

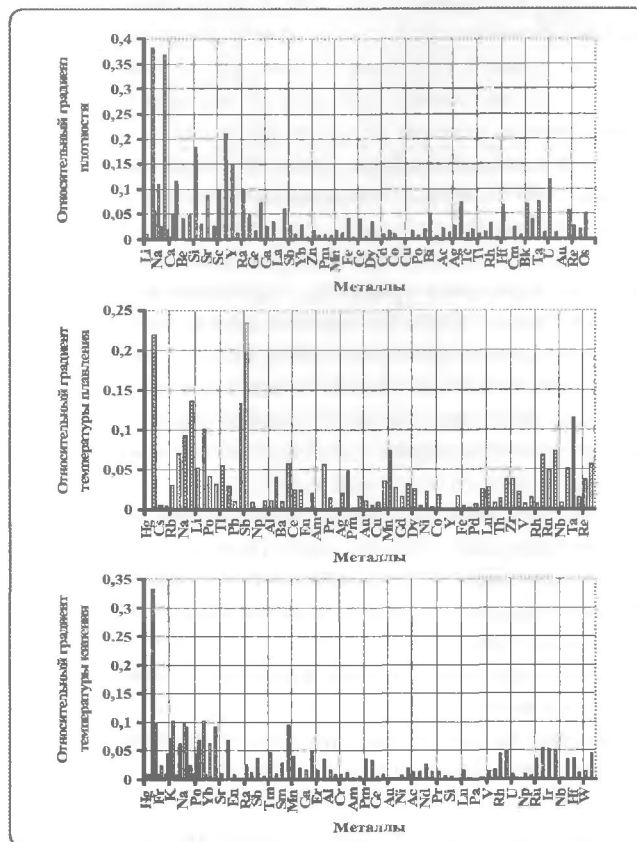
Очевидна багатоваріантність рішень про призначення меж діапазонів значень класифікаційних ознак вимагає їх оптимізації з дотриманням розумних критеріїв. В даному випадку має сенс взяти до уваги такі критерії:

- ▶ кількість діапазонів повинна бути зручною для формування благозвучного і прийнятеного найменування класифікаційних угруповань;
- ▶ межі діапазонів мають бути виражені цілим числом;
- ▶ діапазони повинні мати приблизно рівну протяжність;
- ▶ класифікаційні угруповання мають містити приблизно рівну кількість елементів.

Якщо відносно температур плавлення цілком прийнятними і благозвучними можна визнати найменування «низькоплавкий», «легкоплавкий», «середньоплавкий», «висо-



Мал. 3. Динаміка значень класифікаційних ознак у ранжированих (за відповідними ознаками) рядах металів



Мал. 4. Динаміка значень відносних градієнтів класифікаційних ознак в ранжированих (за відповідними ознаками) рядах металів

коплавкий» і «тугоплавкий» (5 діапазонів), то відносно щільності доводиться обмежитися тільки «надлегким», «легким», «важким» і «надважким». З погляду уніфікації системи класифікації розумно обмежитися чотирьома класифікаційними угрупованнями у всіх випадках.

Вірогідність виразити межі цілим числом значно зростає, якщо позиції для визначення межі відповідають найбільшому градієнту параметра.

Рівну протяжність діапазонів, а також рівне представництво елементів в кожному з класифікаційних угруповань встановити практично неможливо. Дотримання цих критеріїв вимагає певного консенсусу.

Нами були розглянуті різні варіанти розміщення меж діапазонів значень класифікаційних ознак. У основу кожного з них покладений певний критерій. Найбільш оптимальні, на наш погляд, варіанти меж класифікаційних угруповань за їх щільністю і температурою плавлення і кипіння наведені в таблиці 1. Розміщення сформованих таким чином класифікаційних угруповань на платформі «довгої» таблиці хімічних елементів показано на рис.5. Ці дані можуть бути використані при необхідності коректування меж класифікаційних угруповань.

Висновки

Зформований комплекс ознак, що дозволяє розділити хімічні елементи на метали і неметали.

Запропоновано вважати за доцільне виділяти не більше чотирьох класифікаційних угруповань при використанні ознак технологічного і прикладного плану.

Запропоновано три системи класифікаційних угруповань металів, з використанням як основної ознаки температури плавлення, температури кипіння і щільності.

Запропоновані ідентифікатори класифікаційних угруповань металів за температурами плавлення, кипіння і щільності — їх найменування і діапазони значень відповідного параметра.

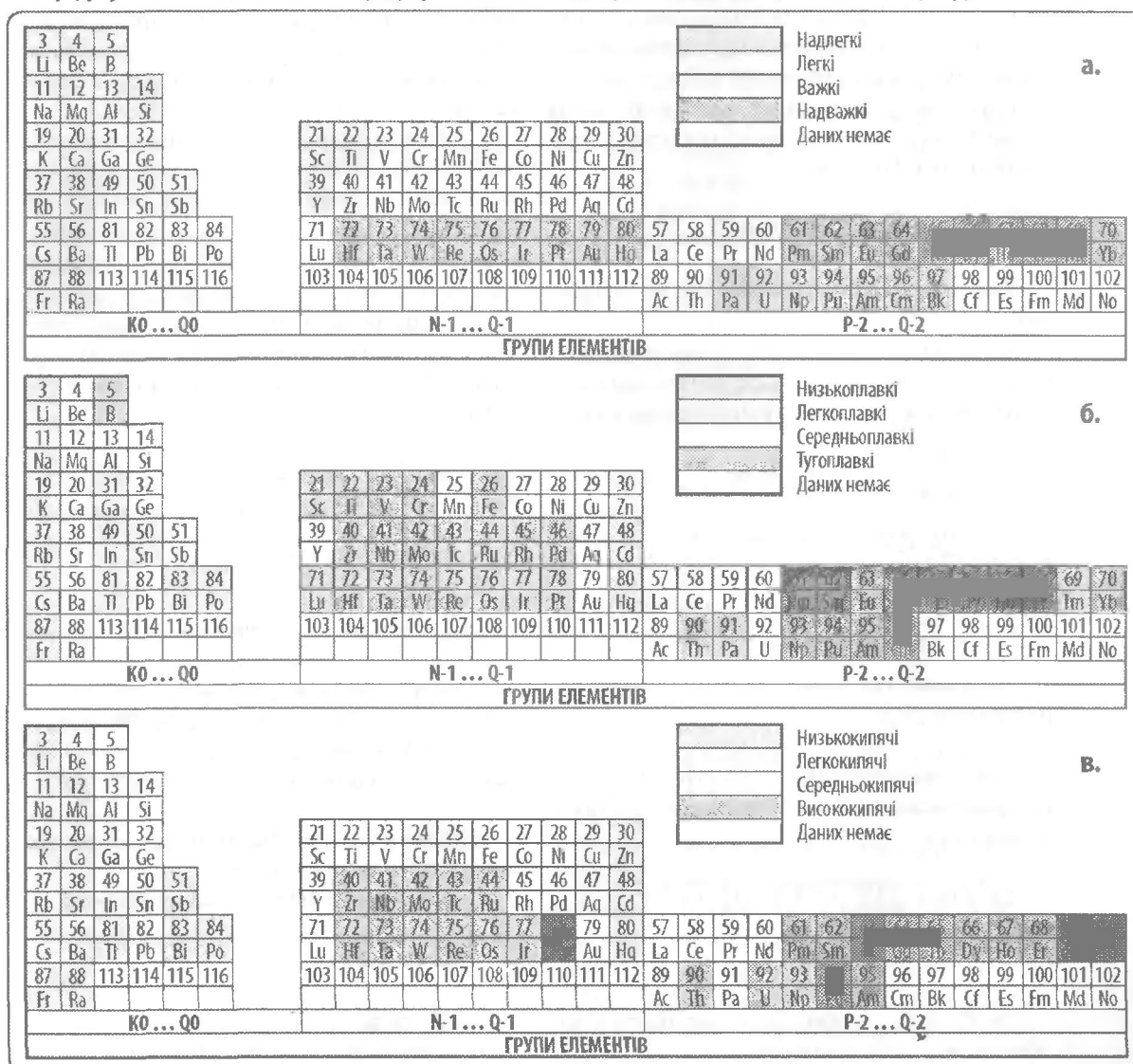
Література:

1. А. У. Мануйлов, В. І. Родіонов Основи хімії. Електронний підручник. <http://www.hemi.psu.ru/> (Новосибірський Державний університет)
2. Хімічна енциклопедія в 5-ти томах. Під ред. І.Л.Кнунянца т. 1.5, –М.: «Радянська енциклопедія», 1988.
3. Властивості елементів. У двох частинах. Ч.1 Фізичні властивості. Довідник. 2-е видання –М.: Металургія. 1976, 600с.

Класифікаційна ознака	Класифікаційні угруповання		
	Низькоплавкі	Дважкі та важкі	Високі метали
Щільність, г/см ³	Надлегкі	До 5,0	Li, K, Na, Rb, Ca, Mg, Be, Cs, B, Si, Fr, Sr, Al, Sc, Ba, Y, Ti, Ra
	Легкі	Св. 5,0 До 8,0	Eu, Ge, Sn, Ga, V, La, Zr, Sb, Pr, Yb, Nd, Zn, Cr, Pm, In, Mn, Sm, Fe, Gd
	Важкі [тяжкий]	Св. 8,0 до 13,0	Ce, Tb, Dy, Nb, Cd, Ho, Co, Ni, Cu, Er, Po, Tm, Bi, Lu, Ac, Mo, Ag, Pb, Tc, Th, Ti, Pd, Rh, Ru
	Надважкі	Св. 13,0	Hf, Hg, Cm, Am, Bk, Pa, Ta, Pu, U, W, Au, Np, Re, Pt, Os, Ir
Температура плавлення, °K	Низькоплавкі	До 600	Hg, Fr, Cs, Ga, Rb, K, Na, In, Li, Sn, Po, Bi, Tl, Cd
	Легкоплавкі [легкоплавний]	Св. 600 до 1200	Pb, Zn, Sb, Pt, Np, Mg, Al, Ra, Ba, Sr, Ce, Yb, Eu, Ca, Am, La
	Середньоплавкі]	Св. 1200 до 1800	Pr, Ge, Ag, Nd, Pm, Ac, Au, Sm, Cu, U, Mn, Be, Gd, Tb, Dy, Si, Ni, Ho, Co, Er, Y, Cm
	Тугоплавкі	Св. 1800	Sc, Fe, Tm, Pd, Pa, Lu, Ti, Th, Pt, B, Zr, Cr, V, Hf, Rh, Tc, Ru, Ir, Nb, Mo, Ta, Os, Re, W
Температура кипіння, °K	Низькокипячі	До 2000	Hg, Cs, Fr, Rb, K, Cd, Na, Zn, Po, Mg, Yb, Li, Sr, Tl, Eu, Ca, Ra, Bi, Sb, Ba, Im
	Легкокипячі	Св. 2000 до 3000	Pb, Sm, In, Mn, Ag, Ga, Dy, Er, Be, Al, Cu, Cr, Ho, Am, Sn, Pm
	Середньокіпячі	Св. 3000 до 4000	Sc, Ge, Fe, Au, Pd, Ni, Co, Ac, Tb, Nd, Ti, Pr, Pu, Si, Ce, B, Lu, Gd, Pa, Y, V, La, Rh
	Високікипячі	Св. 4000	Pt, U, Th, Np, Tc, Ru, Zr, Ir, Mo, Nb, Os, Hf, Ta, W, Re

Таблиця 1. Параметри системи класифікації металів по їх щільності, температурам плавлення і кипіння

Мал. 5. Розміщення класифікаційних угруповань металів на платформі «довгої» таблиці хімічних елементів: а. — угруповання по щільності; б. — угруповання за температурою плавлення; в. — за температурою кипіння.



До питання про класифікацію металів
Коріцький Г.Г., Маняк М.А., Реков Ю.В., Червоний І.Ф.