

### § 34. Metody klasyfikacji związków chemicznych stosowane w informatyce

W poprzednich rozdziałach omówiliśmy szczegółowo metody klasyfikacji związków chemicznych, które nie wyczerpywały całego zakresu objętego pojęciem „związek chemiczny” i ograniczały się z reguły do pewnych wybranych i dobrze zdefiniowanych grup połączeń. Ograniczenie obszaru klasyfikacyjnego ułatwia stworzenie systemu, który odpowiada podstawowym warunkom, jakie stawiamy klasyfikacji związków, będącej układem zmiennych niezależnych w stosunku do ich właściwości. Do tych warunków należy zaliczyć przede wszystkim możliwość rozróżniania wszelkich struktur w klasyfikowanym obszarze, przy jednoznacznym przypisaniu punktowi (polu klasyfikacyjnemu) określonej struktury cząsteczki, oraz powiązanie poszczególnych punktów czy pól klasyfikacji prostymi, elementarnymi, przemianami chemicznymi. Jak wynika z naszych poprzednich rozważań, nie udało się dotychczas nawet w wąskim zakresie wybranych klas połączeń stworzyć systemu klasyfikacyjnego, który w pełni odpowiadałby powyższym warunkom. Głównym celem rozpatrywanych dotychczas klasyfikacji związków było stworzenie takiego układu zmiennych niezależnych, który by pozwalał na przewidywanie właściwości związków chemicznych jako wartości funkcji na podstawie danych doświadczalnych uzyskanych dla innych związków. Przedstawione systemy umożliwiają w większym lub mniejszym zakresie prowadzenie tego rodzaju interpolacji i ekstrapolacji.

Odminną grupę metod klasyfikacyjnych stanowią metody opracowywane dla celów informatyki, a więc dla szybkiego i łatwego uzyskania danych literaturowych o konkretnym związku chemicznym. Nie chodzi w tym przypadku o stworzenie optymalnego układu zmiennych niezależnych dla przewidywania właściwości substancji, lecz o wyszukanie w literaturze opisanych właściwości w taki sposób, by zapewnić możliwość szybkiego ujęcia klasyfikacyjnego całego obszaru związków chemicznych. W początkowym okresie stosowane w informatyce metody klasyfikacji związków chemicznych ograniczały się do układów umożliwiających opracowanie prostych indeksów związków chemicznych, znanych dobrze z fachowych czasopism jak: *Chemisches Zentralblatt*, *Chemical Abstracts* i *Referatiwnyj Zhurnal*. Indeksy te miały za podstawę główny pierwiastek chemiczny w związku, za który — zgodnie z obowiązującymi od dawna zwyczajami — uważano pierwiastek o najmniejszej elektroujemności i który

strukturalnie stanowi układ centralny w związku chemicznym, otoczony innymi pierwiastkami. Mimo braku pełnej jednoznaczności znanych systemów indeksowych, przez wiele lat były one wystarczające dla celów informatyki.

Ostatnimi jednak czasy ogromne, wprost „katastrofalne” zwiększenie się liczby doniesień naukowych powoduje konieczność stworzenia bardziej pełnych systemów klasyfikacji w informatyce chemicznej, których jedynie pewną częścią jest zagadnienie klasyfikacji związków.

Rozwój metodyki klasyfikacyjnej połączeń chemicznych idzie zatem w dwóch niezależnych i bynajmniej nie pokrywających się kierunkach. Jeden z nich, którym zajmujemy się w niniejszej monografii, polega na stwarzaniu możliwie doskonałych systemów klasyfikacyjnych dla ograniczonych grup związków, przy czym celem ostatecznym jest pokrycie całego obszaru związków chemicznych niekoniecznie jednym systemem klasyfikacji (mimo iż oczywiście rozwiązaniem optymalnym byłoby stworzenie systemu uniwersalnego). Drugi kierunek — to prace nad systemem uniwersalnym prowadzące do stworzenia dalekich wprawdzie od ideału ujęć klasyfikacyjnych, obejmujących jednak wszystkie związki chemiczne. Doskonalenie takiego ogólnego systemu może w zasadzie doprowadzić wreszcie do uniwersalnej, idealnej klasyfikacji związków chemicznych. Ze względu jednak na to, że historycznie powstające pojęcia związku chemicznego obejmuje układy różniące się w zasadniczy sposób od siebie, jak np. daltonidy i bertolidy, związki międzymetaliczne, związki o budowie atomowej,  $\pi$ -kompleksy czy wreszcie związki nisko- i wielkocząsteczkowe, o złożonej budowie, nie należy przypuszczać — przy obecnym stanie wiedzy — aby możliwe było stworzenie systemu uniwersalnego, natomiast bliskie ideału klasyfikacje ograniczone do pewnych kategorii związków chemicznych są już w tej chwili, lub w niedługim czasie będą opracowane. Biorąc pod uwagę, że dla celów dedukcji w zakresie właściwości fizycznych oraz przemian związków chemicznych systemy ograniczone są zupełnie wystarczające, trudno jest przewidzieć, czy kiedykolwiek omawiane dwa kierunki prac klasyfikacyjnych zejdą się ze sobą. Mimo iż celem niniejszej monografii jest przedstawienie prac z zakresu klasyfikacji związków — układów zmiennych niezależnych, które umożliwiają przewidywanie właściwości połączeń, to wydaje się słuszne, żebyśmy na zakończenie przedstawili problemy klasyfikacyjne występujące w informatyce, ograniczając się do przykładowego omówienia najbardziej zbliżonych do głównego tematu tej książki prac Bauera [38, 39, 40, 41, 42] nad tezaurem chemicznym.

Systemy klasyfikacyjne stosowane w informacji naukowej w dziedzinie chemii obejmują całą złożoną problematykę chemiczną, której częścią są właściwości związków chemicznych. W pracach nad tezaurem połączeń chemicznych, podjętych przez Redakcję *Chemisches Zentralblatt* w ramach ogólnego tezaursu chemicznego, zwraca się dużą uwagę na ujęcie systematyczne związków chemicznych. Autorzy tych prac uważali, iż pełny tezaurus chemiczny może znaleźć zastosowanie nie tylko w zakresie informatyki chemicznej, a więc opracowania literaturowego określonej dziedziny chemii czy też opracowania publikacji chemicznej z punktu widzenia potrzeb informatyki, ale również



jako pomoc dla redaktorów prac naukowych, zarówno w zakresie nomenklaturowym, jak sporządzania indeksów. Poważne znaczenie przypisuje się teza-  
 urusowi jako dziełu systematyzującemu i ułatwiającemu planowanie badań  
 naukowych.

W wyniku szczegółowych rozważań proponuje Bauer przyjęcie kilku pod-  
 stawowych kategorii, które pozwalają na przeprowadzenie podstawowego  
 podziału obiektów interesujących chemię. Są one następujące:

- |                    |                        |
|--------------------|------------------------|
| A — obiekty główne | D — dynamika           |
| B — jakość         | E — obiekty poboczne   |
| C — ilość          | F — obiekty graniczne. |

Spośród podstawowych sposobów porządkowania (porządkowanie jedno-  
 wymiarowe, formalne i systematyczne oraz porządkowanie wielowymiarowe  
 i pojęciowe) stosuje się w tezaursie chemicznym wszystkie wymienione meto-  
 dy łącznie, a mianowicie: jednowymiarowe uporządkowanie formalne, w postaci  
 spisów alfabetycznych deskryptorów strukturalnych i pozastrukturalnych,  
 oraz jednowymiarowe porządkowanie systematyczne, w postaci monohierar-  
 chicznych podziałów wewnątrz tezaursów fachowych, i wreszcie porządko-  
 wanie wielowymiarowe. Ogólne podstawy klasyfikacji są podane w postaci  
 sformalizowanego układu pojęć tezaursu podstawowego, który jest schematem  
 porządkującym części rzeczowe tezaursów fachowych, jak i w postaci klasy-  
 fikacji fasetowej deskryptorów strukturalnych tezaursu substancji chemicz-  
 nych, stanowiących schemat porządkujący w tezaursach fachowych, zawie-  
 rających opisy substancji. Na koniec, wielowymiarowe uporządkowanie poję-  
 ciowe zostaje uzyskane przez możliwość swobodnego składania różnych des-  
 kryptorów przy zastosowaniu homogenicznych faset tezaursu podstawowego.

System tezaursu chemicznego dzieli się na trzy podstawowe części, a mia-  
 nowicie: na tzw. tezaurs podstawowy, tezaurs substancji oraz tezaursy  
 fachowe (dotyczące wąskich dziedzin chemii). Tezaurs substancji chemicz-  
 nych ma zawierać zdefiniowane struktury związków, struktury nie zdefinio-

TABLICA 86

*System tezaursu chemicznego*

Rodzaje informacji chemicznej	I. 1. Struktury zdefiniowane 2. Struktury ogólne 3. Reakcje 4. Klasy związków 5. Nazwy potoczne i inne	Tezaurs substancji
	II. 6. Treści ujęte kompleksowo 7. Treści ujęte częściowo	Tezaurs podstawowy
	III. 8. Dane liczbowe i jednostki	Tezaurs fachowy
	IV. 9. Specjalne terminy fachowe	

wane (ogólne), reakcje, klasy związków chemicznych, nazewnictwo połączeń i in. Stosowanie tezauryśa gólwnego i tezauryśów szczególowych wyjaśniajają tabl. 86 i 87, z których wynika literowo-cyfrowy opis procesu chemicznego.

TABLICA 87

*Zastosowanie tezauryśa podstawowego i fachowego*

Treść kompleksowa (SK)1

Decen I polimeryzuje się w izooktanie lub benzenie w obecności trójetyloglinu/ $\text{TiCl}_4$  jako katalizatora

Polimery ciekłe lub woskowate

Polimery ciekłe decenu stosuje się jako smary, a woskowate jako wypełniacze

Tezaurus fachowy M1

Decen (I)	A 12
Polimeryzacja	B 10
—	—
Trójetyloglin/ $\text{TiCl}_4$	D 9
Izooktan	E 7
Benzen	E 2
Polidecen	F 17
—	—
ciekły	H 3
woskowaty	H 18
—	—
smar	K 33
wypełniacz	K 47

Tezaurus podstawowy

A — substancja wyjściowa
B — typ przemiany
C — kinetyka reakcji
D — reagenty
E — rozpuszczalnik
F — produkt końcowy
G — struktura
H — właściwości
I — przeróbka
K — zastosowanie

Notacja literowo-cyfrowa treści (SK)1

M1—A12B10D9E2E7F17H3H18K33K47

Treści częściowe

1. Polimeryzacja decenu A 12 B 10
2. Trójetyloglin/ $\text{TiCl}_4$   
katalizator dla polimeryzacji decenu D 9 (A 12 B 10)
3. Polideceny (właściwości) F 17 (H 3 H 18)

W zakresie substancji chemicznych podstawą tezauryśa jest system klasyfikacji fasetowej. System ten jest wielowymiarową klasyfikacją, powstałą z kombinacji zarówno zhieraryzowanych, jak i abierarchicznych zasad porządkowania związków. Dzieląc wielowymiarową przestrzeń klasyfikacyjną dochodzimy do obszarów homogenicznych, które obejmują połączenia chemiczne o podobnych z danego punktu widzenia właściwościach.

Przeprowadzając klasyfikację związków chemicznych należy zwrócić uwagę na relacje występujące już w zakresie kategorii podstawowych, które dzieli się następnie na fasety. Podajemy poniżej przykłady relacji, które wystąpią między podstawowymi kategoriami związanymi z klasyfikacją związków chemicznych.

1. Rodzaje relacji związanych z kategorią „obiekty”:
  - 1.1. Aa — Ab całość — część atom — elektron
  - 1.2. Ab — Aa część — całość kation — struktura krystaliczna
  - 1.3. A — D obiekt — proces produkt korozji — korozja
2. Rodzaje relacji związanych z kategorią „właściwości”:
  - 2.1. Ba — A właściwość — obiekt palność — paliwo
  - 2.2. Ba — D właściwość — proces odporność na korozję — korozja
  - 2.3. B — EB właściwość — operacja kruchość dynamiczna — ruch
3. Rodzaje relacji związane z kategorią „ilość”:
  - 3.1. C — Ah ilość — obiekt promień atomu — rodzaj koordynacji
  - 3.2. C — B ilość — właściwość sprężanie — miękkość
  - 3.3. C — D ilość — proces szybkość dysocjacji — dysocjacja

Wewnątrz wyodrębnionego obszaru przeprowadza się podział na fasety, stanowiące ostro zdefiniowane części. Jest to jak gdyby cięcie homogenicznego obszaru wybranej kategorii płaszczyznami i wyodrębnianie takich elementów tej przestrzeni, które przylegają do siebie idealnie (stąd nazwa fasety — części szlachetnego kamienia, powstałe po jego rozcięciu). Tak np. kategoria „właściwości” może zostać podzielona na fasety w sposób następujący:

Kategorie	Fasety	Grupy terminów
B. Właściwości	chemiczne	trwałość
		zdolność do hydrolizy
		zdolność do koordynacji
	optyczne	współczynnik załamania światła współczynnik ekstynkcji współczynnik odbicia światła
	termodynamiczne itd.	ciepło adsorpcji ciepło hydratacji entalpia swobodna tworzenia

Istotną metodą klasyfikacji jest podział fasetowy fragmentów strukturalnych (grup charakterystycznych, grup funkcyjnych, rodników itp.). Podział podstawowy polega na wyróżnieniu przede wszystkim heteroatomu, który wchodzi w skład związku chemicznego. Bauer proponuje porządkowanie heteroatomów nie według ich charakteru chemicznego, lecz po prostu zgodnie z częstotliwością występowania w znanych związkach chemicznych. Z punktu widzenia informatyki założenia takie mogą być uznane za praktycznie użyteczne, mimo iż ich dowolność budzi zasadnicze sprzeczności teoretyczne. Wymienia się więc heteroatomy, biorąc pod uwagę przede wszystkim związki organiczne w następującym porządku:

Kategoria	Główny heteroatom
A	tlen
B	azot
C	siarka
D	chlorowce
E	fosfor
F	inne

Przyjmuje się przy tym następujące sposoby fasetowania fragmentów:

1. Podawanie fragmentów zgodnie ze zwiększającą się złożonością połączenia.

2. Podawanie fragmentów według wymienionej kolejności heteroatomów.

Szczegółowego podziału dokonujemy zgodnie z następującym porządkiem:

- 1) główny heteroatom,
- 2) inne heteroatomy wymienione w kolejności A-F,
- 3) atomy wodoru przy heteroatomie,
- 4) atomy wodoru przy jednakowych heteroatomach,
- 5) węgiel jako składnik struktury.

TABLICA 88

*Treści strukturalnochemiczne w teaurusie podstawowym (wycinek)*

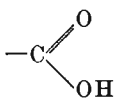
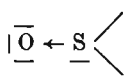

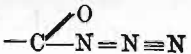
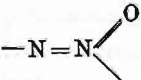
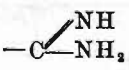

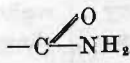
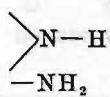
Kategorie podstawowe	Kategorie główne	Fasety		
		1 stopnia	2 stopnia	3 stopnia
A główne obiekty	Aa substancje	Aaa pierwiastki  Aab cząsteczki	Aabb fragmenty cząsteczek	
B jakość	Bb struktura	Bba porządek strukturalny    Bbb powiązanie struktur	Bbaa w układach acyklicznych Bbab w układach cyklicznych Bbac w układach niecyklicznych Bbba bez układów cyklicznych Bbbb z układami cyklicznymi	
C ilość	Cm liczby atomów	Cma liczby atomów H Cmb liczby atomów C Cmc liczby heteroatomów		
D dynamika	Da przemiany chemiczne	Daa reakcje chemiczne	Daaa typy reakcji Daab nazwy reakcji	porównaj teaurus substancji klasyfikacja fasetowa typów reakcji



Przy zastosowaniu wyżej wymienionych kombinacji można uzyskać, opierając się na wymienionych fasetach, wielowymiarowy system, który pozwala na ujmowanie związków chemicznych dla celów informatyki. W tablicach 88 i 89 podajemy podział treści strukturalnych w teaurusie podstawowym oraz podział na fasety fragmentów związków chemicznych.

TABLICA 89

*Klasyfikacje fasetowe fragmentów cząsteczek*

Kategoria	Złożoność				
	1	2	3	4	5
A	—O—	—O—O—	aac		
		O=N—			
					
		O—H			
		OH <sub>2</sub>			
B		O=C			
	=N—	—N=N—	aaa	aaab	aaabc
					
				aaac	aaacc
				aabc	aabcd
			aac	—NH—NH—	
			=N—NH <sub>2</sub>	—NH—NH <sub>2</sub>	
		—N=O			
			—N—OH	—NH—OH	
				—NH—CO—	
			H <sub>2</sub> N—O		
					

Kategoria	Złożoność				
	1	2	3	4	5
C	—S—	—S—S—  $\begin{array}{c} \diagup \\ \text{S} \rightarrow \overline{\text{O}}   \\ \diagdown \end{array}$	aac  $\begin{array}{c} \diagup \\ \text{S} \rightarrow \overline{\text{O}}   \\ \diagdown \end{array}$  abc  $\begin{array}{c} \text{S} \\ \diagup \text{C} \diagdown \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{S} \\ \diagup \text{C} \diagdown \\ \text{SH} \end{array}$ abbb $\begin{array}{c} \overline{\text{O}}   \\ \diagup \text{S} \diagdown \\ \text{OH} \end{array}$ $\begin{array}{c} \text{O} \\ \diagup \text{C} \diagdown \\ \text{SH} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{HO} \diagup \text{S} \rightarrow \overline{\text{O}}   \\ \diagdown \end{array}$
		$\begin{array}{c} \text{—S—H—} \\ \text{S}=\text{C} \diagup \diagdown \end{array}$			

Kategorie podstawowe pozwalają na ogólny, logiczny podział materiału całej chemii. W poszczególnych dziedzinach chemii dokonuje się podziałów mniej ogólnych. Przykładem może być następujący podział:

- |                                       |  |
|---------------------------------------|--|
| 1) substancje wyjściowe — Aadl a      | 8) aparatura i przyrządy — Ea            |
| 2) typ przemiany — Dbaa               | 9) produkty końcowe — Aadl p             |
| 3) szybkość reakcji — Dbab            | 10) właściwości (produktów) — Ba (Aadlp) |
| 4) substancje pomocnicze — Aadl f     | 11) struktura — Bb                       |
| 5) specjalne rozpuszczalniki — Aadl g | 12) metody analizy — Bc e                |
| 6) proces technologiczny — Deb        | 13) przeróbka — Dc m                     |
| 7) warunki doświadczenia — Beb        | 14) zastosowanie — Dd                    |

### § 35. Perspektywy rozwoju metod klasyfikacji związków

W miarę nagromadzania się ogromnej liczby informacji, dotyczących związków chemicznych, coraz bardziej wzrasta potrzeba ich porządkowania, jak i opracowania systemów klasyfikacyjnych, które w stosunku do poszczególnych klas połączeń mogłyby spełniać taką rolę jak układ okresowy w stosunku do pierwiastków. Skromne — jak dotychczas — usiłowania niewielkiej garstki ludzi, którzy w okresie ostatnich kilkudziesięciu lat zajmowali się problemami klasyfikacji połączeń, niewątpliwie nie zaspokajają istniejących potrzeb. Należy sądzić, że dalsze badania będą się rozwijały w zakresie dwóch wymienionych zasadniczych grup układów klasyfikacyjnych, zarówno w grupie klasyfikacji tablicowych, jak i metod opartych na ciągłych osiach współrzędnych.

Systemy tablicowe pozwoliły na ujęcie prostych podstawowych elementów połączeń. Należy sądzić, że z kolei uda się traktować związki złożone jako



składające się z drobin prostych i przedstawić je, w odpowiednim układzie, w kontekście struktur i wiążących te struktury przemian chemicznych. Pewne próby w tym względzie, które przeprowadzałem wraz z moimi współpracownikami, utknęły na trudności, której nie potrafiliśmy pokonać. Traktując drobinę prostą jako podstawowy element budowy związku złożonego, należy przede wszystkim dokonać jego rozbioru na drobiny proste w sposób jednoznaczny. Okazuje się, że bez wprowadzenia czysto formalnych umów jest to niemożliwe, a formalne umowy nie wydają się najszcześliwszym rozwiązaniem. Największa jednak trudność pojawiła się przy konstruowaniu takiej przestrzeni klasyfikacyjnej, w której liczba pól klasyfikacyjnych od początku układu zwiększałaby się tak szybko, jak szybko wzrasta liczba izomerów przy stopniowym wzroście cząsteczek związku chemicznego (np. w węglowodorach). Udało się zaledwie stworzyć układ, w którym możliwe jest przedstawienie w odrębnych polach pewnych klas izomerów, a więc np. odrębnie izomerów z pojedynczym rozgałęzieniem cząsteczki łańcuchowej, izomerów z rozgałęzieniem podwójnym itp. Przedstawiając drobinę złożoną jako wynik działania drobin prostych, należałoby zmienić również ich symbolikę, ujmując drobinę prostą w postaci zespołu cyfr lub też w postaci symbolu literowego. Prosta drobina daje się opisać układem czterech liczb, a mianowicie: liczbami  $e_z$  i  $e_w$  oraz co najmniej dwoma liczbami wskazującymi jakoś centrum koordynacji i jakoś ligandów. Oczywiście w drobinach heteropodstawnikowych dla opisu musimy stosować co najmniej pięć lub sześć liczb. Posługując się symbolami cyfrowymi w przypadku drobin złożonej, doszlibyśmy w rezultacie do bardzo skomplikowanego i nieczytelnego zapisu. Właściwsze byłoby więc opracowanie nowej symboliki drobin prostych, np. metodą „pisma obrazkowego”. Dochodzi się jednak w takiej sytuacji do bardzo wielkiej liczby znaków, co pociągałoby za sobą znów nieczytelność zapisu. Mówiąc ogólnie, dla opisu drobin złożonych należałoby stworzyć odrębny język symboliczny, który pozwalałby na ich jednoznaczne ujmowanie za pomocą drobin prostych, traktowanych jako podstawowe elementy struktury. Należy jednak mieć nadzieję, że wszystkie te problemy są do rozwiązania, i zostaną rozstrzygnięte w przyszłości.

Metody klasyfikacyjne oparte na układzie ciągłych osi współrzędnych obejmują w zasadzie całą różnorodność związków; ich poważniejszym mankamentem jest to, że są całkowicie „ślepe” na izomerię w najszerszym tego słowa znaczeniu. Jak już mówiliśmy, metody te pozwalają na zestawienie związków chemicznych w gruncie rzeczy również w układzie osi dyskretnych, gdyż nie każdemu punktowi osi liczbowej można przypisać udział pierwiastka w związku chemicznym. Osie te są raczej zbiorami bardziej oddalonych, a w niektórych miejscach bardziej skupionych punktów. Uzyskiwane w ten sposób zmienne odcinki osiowe w obszarze klasyfikacji pozwalają wyrażać „bardziej prawidłowo” odległości między związkami. Jednak, jak się okazuje, w ramach poznanych układów klasyfikacyjnych odległości te nie znajdują się w prostym stosunku do różnic wartości podstawowych cech fizycznych. Należy sądzić, że opracowanie układu klasyfikacyjnego, który by pozwalał na prawidłową, z punktu widzenia podstawowych cech, ocenę odległości między związkami, umożliwi

bardziej dokładne przewidywanie właściwości. Jest zrozumiałe, jak podstawowe znaczenie dla prac klasyfikacyjnych miałoby rozwiązanie tego problemu.

Duże zainteresowanie będą wzbudzały zapewne również nie uniwersalne, lecz ograniczone systemy klasyfikacyjne, zwłaszcza w układzie jednoosiowym (szeregi związków chemicznych), przede wszystkim ze względu na wielką elastyczność tej metody. Należy sądzić, że zostanie opracowana pełniejsza teoria nie tylko w zakresie szeregów homologicznych — jak się to stało dzięki pracom Jurkiewicza — ale również w przypadku różnych innego typu szeregów. Jest to w gruncie rzeczy metoda w tej chwili najpowszechniej stosowana w praktyce, zainteresowanie jednak teorią tworzenia szeregów jest znikome.

Właściwa klasyfikacja związków chemicznych powinna w zasadzie na podstawie znanych faktów doświadczalnych — umożliwiać dokładne przewidywanie faktów nie znanych. Traktując sprawę bardzo ogólnie, system klasyfikacyjny powinien pozwalać na rozstrzygnięcie głównego problemu chemii, który można by było sformułować jako odpowiedź na pytanie, w jaki sposób i z czego otrzymać związek chemiczny o żądanych właściwościach. Nie wydaje się, przynajmniej w chwili obecnej, by w wymiernym okresie czasu można było uzyskać odpowiedź na to podstawowe pytanie chemii, opierając się na zastosowaniu aparatu matematycznego w ścisłym tego słowa znaczeniu, natomiast dotychczasowe osiągnięcia w zakresie klasyfikacji związków rokują pewne nadzieje. Być może, że na podstawie prac klasyfikacyjnych można będzie stworzyć odpowiednią teorię matematyczną, która umożliwiłaby przeprowadzenie opartych na odpowiedniej formalistyce obliczeń. Nie sądzę jednak, by była to którakolwiek ze znanych metod matematycznych, przynajmniej w ich dzisiejszej postaci. Próby, które prowadziłem przy współudziale matematyków nad zastosowaniem rachunku macierzy, tensorów, teorii grup i topologii do opracowanego w moim Zakładzie tablicowego systemu klasyfikacji, nie wniosły w gruncie rzeczy nic nowego i nie pozwoliły na sensowne sformalizowanie systemu.

Poważnym kierunkiem badawczym, który stawia sobie za cel odpowiedź na sformułowane wyżej podstawowe pytania chemii, który dość luźno jest w tej chwili związany z metodami klasyfikacji w węższym tego słowa znaczeniu (przedstawionym w tej książce), są prace z dziedziny zastosowania maszyn matematycznych do rejestracji i przetwarzania danych chemicznych, a przede wszystkim właściwości i sposobów otrzymywania związków. Dzięki opracowaniu odpowiednich metod liniowego zapisu struktur chemicznych, który umożliwia wprowadzenie danych do pamięci maszyny cyfrowej, ułożono programy pozwalające obliczać niektóre cechy związków. Opierając się na metodzie fragmentaryzacji związków złożonych, a więc jak gdyby na ich podziale na drobiny proste, udało się stworzyć szereg systemów, które przy zastosowaniu wyspecjalizowanych maszyn matematycznych potrafią nie tylko wyszukiwać literaturę, ale również wyciągnąć wnioski z zarejestrowanych w pamięci maszyny danych doświadczalnych. Do tego rodzaju systemów należy m. in. japoński system FACOM [43], a także inne systemy, powstające w tej chwili w czołowych instytutach świata. W zakresie tym jednak bardziej liczy się na wielkie

pojemności pamięci maszyn matematycznych i możliwości dokonywania wielkiej liczby operacji w bardzo krótkim czasie niż na wykorzystanie znanych metod klasyfikacyjnych.

Właściwe kodowanie związków (przypisywanie związkom liczb) w sposób przyjęty w silnych dyskretnych systemach klasyfikacyjnych nie tylko uprościłoby znacznie programowanie, ale także pozwoliłoby zapewne na uzyskanie pewniejszych danych z mniejszej liczby doświadczeń. System kodowania powinien być taki, by przebiegi cech odkładanych jako wartości funkcji były w poszczególnych przekrojach stosowanej przestrzeni klasyfikacyjnej co najmniej monotoniczne. Łatwo uzasadnić, że dla określonej grupy związków istnieje co najwyżej jeden sposób kodowania spełniający ten warunek, a więc jedna tylko klasyfikacja.

Metody klasyfikacji będą nabierały poważniejszego znaczenia, zwłaszcza w swych zastosowaniach dla przewidywania i oceny danych liczbowych opisujących właściwości związków chemicznych.

Zainteresowanie metodami klasyfikacji związków chemicznych jako układami zmiennych niezależnych jest jednak w chwili obecnej bardzo małe, mimo iż wielu badaczy zdaje sobie sprawę z niedoskonałości naszych narzędzi w tej tak podstawowej dziedzinie. Natomiast dość burzliwy rozwój od kilku lat obserwujemy w klasyfikacji pojęć chemicznych dla celów informatyki, których część stanowią problemy klasyfikacji związków. Zainteresowanych tą dziedziną odsyłamy do licznych artykułów w czasopismach informacyjnych, a przede wszystkim — *Informatik* i *Journal of Chemical Documentation* [44, 45, 46, 47, 48, 49, 50, 51].



## LITERATURA

1. T. Miłobędzki, *Roczniki Chem.* **19**, 17 (1939).
2. Classical Scientific Papers — Chemistry, American Elsevier, New York 1968.
3. Classics in the Theory of Chemical Combination, Dover — New York 1963.
4. G. Urbain, *Podstawy naukowe chemii*, Mathesis Polska, Warszawa 1936.
5. Д. И. Менделеев, *Научный архив Тр.И.АН СССР*, 1953.
6. D. N. Trifonow, *Granice i ewolucja układu okresowego*, PWN, Warszawa 1966.
7. Petrenko-Kriczenko, *Z. f. Physikalische Chem.* **116**, 313 (1925).
8. W. Seelman-Eggebert, G. Pfennig, *Nuklid Karte*, Gersbach, München 1961.
9. Ахумов, *Журн. общ. хим.* **18**, 545 (1948).
10. Б. М. Кедров, Д. Н. Трихонов, *Закон периодичности и химические элементы*, Наука, Москва 1969.
11. В. К. Григорович, *Периодический закон Менделеева и электронное строение металлов*, Наука, Москва 1966.
12. Е. Ц. Макаров, *Журн. неорг. хим.* **1**, 1533 (1956).
13. W. W. Meissner, *Chemischer Grundatlas*, G. Westerman, Braunschweig 1931.
14. P. J. Durrant, B. Durrant, *Zarys współczesnej chemii nieorganicznej*, PWN, Warszawa 1965.
15. N. T. Sanderson, *Prawo okresowości w chemii*, WNT, Warszawa 1965.
16. W. Hückel, *Structural Chemistry of Inorganic Compounds*, Elsevier, Amsterdam 1951.
17. J. Brockington, *Students Guide to Inorganic Chemistry*, Butterworths, London 1966.
18. J. K. Senior, *J. Org. Chem.* **3**, 1 (1938).
19. Langmuir, *Collected Works*, Vol. 6, Pergamon Press, London 1961.
20. J. N. Frers, *Z. anorg. u. allg. Chem.* **186**, 145 (1930).
21. J. N. Frers, *Z. anorg. u. allg. Chem.* **240**, 1 (1938).
22. J. N. Frers, *Z. anorg. u. allg. Chem.* **249**, 281 (1942).
23. H. G. Grimm, *Angew. Chem.* **47**, 53 (1934).
24. H. G. Grimm, *Die Naturwiss.* **17**, 535 (1929).
25. H. G. Grimm, *Ztschr. Elektrochem.* **40**, 460 (1934).
26. W. Manchot, *Angew. Chem.* **48**, 65, 1953.
27. F. M. Szemiakin, *Z. physik. Chem.* **152**, 235 (1931).
28. J. Moszczyńska, *praca w druku*.
29. A. Górski, *Chemia ogólna*, wyd. III, PWN, Warszawa 1969.
30. E. Jänecke, *Z. anorg. u. allg. Chem.* **196**, 340 (1931).
31. E. Jänecke, *Ztschr. Elektrochem.* **40**, 462 (1934).
32. Ключковский, *Распределение атомных электронов*, Атомиздат, Москва 1968.
33. P. V. Van Krevelen, J. Schuyer, *Coal Science*, Elsevier, Amsterdam 1957.
34. J. H. Watterman, *Process Characterisation*, Elsevier, Amsterdam 1960.

35. H. J. Watterman, Correlation between Physical Constants and Chemical Structure, Elsevier, Amsterdam 1958.
36. J. Jurkiewicz, S. Rosiński, Karbochemia, PWN, Warszawa 1968.
37. J. Jurkiewicz, S. Rosiński, Coal Tar Compounds, Published for National Science Foundation by CINTe, Warszawa 1962.
38. G. Bauer, *ZIID Ztschr.* **15**, 61 (1968).
39. G. Bauer, *ZIID Ztschr.* **14**, 72 (1967).
40. G. Bauer, Symposium der wissenschaftlichen technischen Informationen, Moskau, 10. VI. 1965.
41. G. Bauer, M. Manneck, *Z. Chem.* **7**, 338 (1967).
42. G. Bauer, *Informatik*, **16**, 5 (1969).
43. FACOM 230-20 EDP System, Information Handling Equipment Exhibition of the 33-rd FID.
44. H. Hiz, *J. of Chem. Doc.* **4**, 173 (1964).
45. H. Penny, *J. of Chem. Doc.* **4**, 113 (1964).
46. H. T. Bonnet, D. W. Calhoun, *J. of Chem. Doc.* **2**, 1 (1962).
47. J. Frome, *J. of Chem. Doc.* **1**, 76, 84 (1961); **4**, 43 (1964).
48. W. Ihndris, *J. of Chem. Doc.* **4**, 274 (1964).
49. L. Spialter, *J. of Chem. Doc.* **4**, 261, 269 (1964).
50. H. T. Bonnet, *J. of Chem. Doc.* **3**, 235 (1963).
51. L. M. Huber, *J. of Chem. Doc.* **5**, 4 (1965).
52. F. Daniels, R. A. Alberty, Physical Chemistry, wyd. III, J. Wiley and Sons, New York 1966.

## **SKOROWIDZ NAZWISK**

Achumow 162, 168-178

Alberty R. A. 61

Bauer G. 237, 238, 240

de Boisbaudran 43

Bradley 156

Bryłka J. 105

Cieślak D. 105

Cruiskshank D. W. 154

Daniels F. 61

Durrant B. 66

Durrant P. J. 66

Frers J. N. 93, 95

Górska H. 105

Grigorowicz W. K. 25, 47-51

Grimm H. G. 95, 96

Hückel W. 91

Jänecke E. 162-165

Jolly 156

Jurkiewicz J. 162, 165, 178, 203, 223

Kapustinski 26

Kłoczko E. 105

van Krevelen P. V. 198

Langmuir I. 73

Manchot W. 96

Meissner W. W. 50, 91

Mendelejew D. I. 18, 43

Milobędzki T. 19, 66, 67, 68

Moseley H. G. J. 18

Moszczyńska J. 105, 153-157

Nilson L. F. 43

Sanderson R. T. 46, 91, 92

Szemiakin F. M. 95, 98, 99

Świdorski M. 105

Waterman H. J. 202

Werner A. 20

Winkler E. 43



Aldehydy, obszary istnienia 182  
 — w klasyfikacji Jurkiewicza 182  
 — w prawidłowym układzie węglowodorów 231  
 alkohole w klasyfikacji Jurkiewicza 181, 182  
 — w prawidłowym układzie węglowodorów 231  
 anionizacja 114, 118  
 antracen, pochodne plastrowe 227  
 atomy, rodzaje 17  
 —, zbiory 17

Benzen 220, 222  
 —, pochodne plastrowe 226, 227  
 —, — w prawidłowym układzie węglowodorów 220  
 —, — z łańcuchem bocznym 225

Ciała stałe, elementy symetrii struktury 61

ciepła spalania węglowodorów 190  
 — tworzenia pochodnych węglowodorów 191

cykloheksan, pochodne wielopierścieniowe 218

—, — — w prawidłowym układzie węglowodorów 217

cyklopentadien, pochodne w prawidłowym układzie węglowodorów 224

czworościennik klasyfikacyjny Achumowa-Jäneckego 169

Deanionizacja 114, 118

deelektronizacja 114, 115, 118, 136

diagram van Krevelena 198, 201

długości, temperatury wrzenia 232

drobina, długość wiązań 155

drobiny, ciepło tworzenia 158

—, kształt cząsteczki 58, 59

drobiny azotowe pierwiastków *d* 152

— — — *p* II okresu 138

— — — *p* III okresu 143

— — — *p* IV okresu 146

— fluorowe pierwiastków *d* 151

— — — *p* II okresu 137

— — — *p* III okresu 142

— — — *p* IV okresu 145

— — — *p* V okresu 147

— fosforu, ciepło tworzenia 158

— — fluorowo-tlenowe 122, 123, 124

— — nadtlénowe 126

— —, struktury elektronowe 112

— —, — przestrzenne 111

— — tlenowe 111, 125

— — tlenowo-wodorowe 125, 127

— heteropodstawnikowe, klasyfikacja morfologiczna 122-129

— homopodstawnikowe 103, 125

— —, klasyfikacja morfologiczna 110-122

— pierwiastków głównych 119

— — przejściowych 119, 120

— proste 58, 103, 106

— — azotowe 117, 118

— — fluorowe 116

— —, klasyfikacja morfologiczna 102-161

— —, — —, pojęcia podstawowe 102-110

— —, opis cyfrowy 108, 109

— — tlenowe 117

— — węgla z wodorem 119

— — — z tlenem 119

— — wodorowe 117, 132

— — pierwiastków rodzin przejściowych 149-153

— — — — wewnątrzprzejściowych 149-153

— siarki, ciepło tworzenia 158

— tlenowe azotu 156, 157

— — fosforu 111, 156

— — manganu 121

drobiny tlenowe węgla 157  
 — — pierwiastków *d* 149  
 — — — *f* 150  
 — — — *p* II okresu 134, 135, 136  
 — — — *p* III okresu 141  
 — — — *p* IV okresu 144  
 — tlenkowo-nadtlenkowe 123, 124  
 — wodorowe pierwiastków III okresu 132  
 — — — IV okresu 133  
 — — — V okresu 133  
 — złożone 104

elektronizacja 114, 115, 118, 136  
 elektroujemność pierwiastków Paulinga 45, 46

energje wiązania pierwszego elektronu 47

Fasety 239

fenole, obszary istnienia 181  
 — w klasyfikacji Jurkiewicza 181, 182

furan, pochodne 195

—, —, klasyfikacja Jurkiewicza 195  
 — —, temperatury wrzenia 234  
 —, — w prawidłowym układzie węglowodorów 229

fluorki dwuskładnikowe, ciepła tworzenia 92

grupy punktowe Schoenfliesa 62  
 — związków 55

Hydroksykwas, systematyka Jurkiewicza 184

— alifatyczne w klasyfikacji Jurkiewicza 198

Izotopy 17

— trwałe 41

Jednostki osiowe 14, 198

— —, zmienność 14

Klasyfikacja fasetowa 238, 242

— morfologiczna 102-161  
 — pierwiastków 17-52  
 —, rodzaje 12  
 — substancji prostych 17-52  
 — tablicowa 19  
 — —, wyróżniki 19  
 — morfologiczna drobin 102-161  
 — — — heteropodstawnikowych 122-129  
 — — — homopodstawnikowych 110-122  
 — —, układy cztero- i trójosiowe 114  
 — smół wg Jurkiewicza 193  
 — węglowodorów łańcuchowych 214, 216

klasyfikacja węglowodorów wg Jurkiewicza 13, 203-235

— związków wg Jäneckiego 13, 163, 168, 178

— — czteropierwiastkowych wg Jäneckiego 165, 166, 167

— — organicznych zawierających heteroatomy 228-231

— — pięciopierwiastkowych wg Jäneckiego 167, 168

— — trójpierwiastkowych wg Jäneckiego 164, 163-165

„koniec układu okresowego” 24

kwas azotowy, synteza w klasyfikacji morfologicznej 159

kwasy, stałe dysocjacji 86

— organiczne, obszary istnienia 182

— —, systematyka wg Jurkiewicza 183

— — w prawidłowym układzie węglowodorów 231

Metoda Jäneckiego 163, 168, 178

— Jäneckiego-Jurkiewicza 178, 189

metody klasyfikacji, podział 11-16

— — związków stosowane w informatyce 236

Naftalen, pochodne plastrowe 227

nuklidy 17

—, reakcje 42

„Odległości osiowe” 83

oleje tłuszczowe, diagram van Krevelena 201

osie współrzędnych, typy 12

Pierwiastki, elektroujemność 35, 86

—, podział 23, 35

—, potencjały normalne 50

—, struktura rdzeniowo-walencyjna 32-35

—, temperatury topnienia 51

—, — wrzenia 49, 51

—, typy strukturalne 22

— II okresu, drobiny wodorowe 131

— III okresu 136

— — —, drobiny azotowe 143

— — —, — fluorowe 142

— — —, — tlenowe 139-141

— — —, — wodorowe 132

— IV okresu 141

— V okresu 145

— — —, drobiny fluorowe 147

— VI okresu, drobiny tlenowe 148

— *d*, drobiny tlenowe 149

pierwiastki *d*, drobiny fluorowe 151  
 — — — azotowe 152  
 — *f*, drobiny tlenowe 150  
 — *p* III okresu, drobiny azotowe 143  
 — — — —, — fluorowe 142  
 — — — —, — tlenowe 139-141  
 — rodzin głównych, drobiny proste 132-149  
 piren, pochodne 211  
 pirol, pochodne w klasyfikacji Jurkiewicza 197  
 pirydyna, pochodne w prawidłowym układzie węglowodorów 230  
 plastry heksagonalne 78, 226  
 — romboidalne 77, 226  
 — tetragonalne 78, 226  
 pochodne benzenu 220  
 — cykloheksanu 219  
 — cyklopentadienu 224  
 — tiofenu, klasyfikacja Jurkiewicza 196  
 połączenia proste, klasyfikacja 90  
 — tlenowo-wodorowe, klasyfikacja wg Szemiakina 98  
 potencjały jonizacji 45, 47  
 — normalne pierwiastków 50  
 prawo Grimma 96, 132  
 procesy chemiczne w klasyfikacji Achumowa 177  
 proste macierzyste 207  
 przemiany chemiczne, klasyfikacja Jurkiewicza 188  
 — —, typy podstawowe 113  
 — kwasowo-zasadowe, typy 128  
 pseudoatom 67

**Rdzeń atomowy** 29, 102  
 — —, cechy pierwotne 48  
 — —, energia wiązania pierwszego elektronu 47  
 — —, ładunek 105  
 — —, promień 48  
 redukcja 114, 118  
 reguła „wolnego miejsca dla protonu” 129

rodnik metylowy, pochodne 186  
 — wodorowy, pochodne organiczne 185  
 „rzut tlenowy” drobiny 128, 129

Siarka Jurkiewicza 179, 207, 214  
 — pomocnicza prawidłowego układu węglowodorów 212, 213  
 — van Krevelena 199  
 stopień utlenienia 105  
 — zasadowości 105

substancje proste, charakterystyka strukturalna 51  
 — —, właściwości 48, 50  
 synteza cyjanianów 161  
 — kwasu azotowego 159  
 system FACOM 245  
 — klasyfikacji fasetowej 239  
 — klasyfikacyjny Jurkiewicza 178, 224, 228  
 — tezaursu chemicznego 238  
 systemat pochodnych cyklopentadienu 224  
 — wodoru 185  
 szereg cykloalkanów 82  
 — kompleksów chlorkowych 88  
 — kwasów 88  
 — pierwiastków wg elektroujemności Paulinga 87  
 — tlenków 88  
 układów redoks 86  
 — węglowodorów alifatycznych normalnych 82  
 — — nasyconych 83  
 szeregi homologiczne pochodnych cyklopentadienu 224  
 — — węglowodorów 76  
 — — — aromatycznych 220-225  
 — — — nasyconych 78  
 — — — pierścieniowych 219  
 — — — rodziny  $N=2$  215  
 — — — w klasyfikacji Jurkiewicza 203, 206  
 — związków 72-90  
 — — genetyczne 75, 76  
 — — homologiczne 76, 83, 215, 219  
 — — izologiczne 75, 76  
 — — izosteryczne 73, 75  
 — — „przecinające się” 80  
 — — steryczne 75  
 — — strukturalne 76  
 — — wg potencjałów redoks 86  
 — — wg temperatur wrzenia 85  
 — — wg współczynników załamania światła 85

Tablica klasyfikacyjna 12

— — Grimma 97  
 — — Kapustńskiego 18, 26, 28  
 — — Mendelejewa 13, 17-26  
 temperatura wrzenia, zależność od wskaźnika *N* 232, 233, 234  
 temperatury topnienia pierwiastków 51  
 — wrzenia dienów 232  
 — — pierwiastków 49, 51  
 tetracen, pochodne plastrowe 227



tezaursus chemiczny 237, 238  
 — fachowy 238, 239  
 — podstawowy 238, 239, 241  
 — substancji 238  
 tiofen, pochodne 196  
 —, —, klasyfikacja Jurkiewicza 196  
 —, — w prawidłowym układzie węglowodorów 230  
 —, —, zależność wskaźnika  $N$  od ciężaru cząsteczkowego 234  
 twardość pierwiastków 51  
 „typy chemiczne” 67  
 — Frersa 94

Układ okresowy 17-52  
 — —, wersja długa 20  
 — —, krótka 19  
 — —, — rozwinięta  
 — — izotopów 38, 39  
 — — Kapustńskiego 18, 26, 28  
 — — Mendelejewa 13, 17-26  
 — — pierwiastków 13, 17-52  
 — — rdzeni atomowych 18, 28, 31, 37  
 utlenianie 114, 118  
 utwardzanie paku wg Jurkiewicza 194  
 uwęglanie paliw wg Jurkiewicza 193  
 — w klasyfikacji van Krevelena 200

Węgle kopalne, w klasyfikacji Jurkiewicza 192

węglowodory, ciepła spalania 190  
 —, pochodne 191  
 —, siatka podstawowa 204  
 —, szeregi homologiczne 203  
 — aromatyczne o budowie wstęgowej 77  
 — — wielopierścieniowe 222  
 — — w prawidłowym układzie węglowodorów 220  
 — łańcuchowe 210, klasyfikacja 214-216  
 — —, klasyfikacja 216-220  
 — — nasycone 217

węglowodory pierścieniowe 216-231  
 — — o stałej liczbie pierścieni 219  
 — — plasterowe 218, 226  
 — — o zmiennej różnicy homologicznej 225  
 — —, szereg plastrów heksagonalnych 227  
 — szeregu acetyleny, temperatury wrzenia 233

węglowodór, klasyfikowanie do szeregu homologicznego 211  
 — startowy 208, 211, 223  
 wskaźnik  $\beta$  209  
 — Jurkiewicza  $N$  204, 205  
 — — —, zależność od ciężaru cząsteczkowego 234  
 — — —, — — liczby pierścieni aromatycznych 226  
 — — —, — — macierzysty  $N$  207  
 współczynnik załamania światła w zależności od wskaźnika  $N$  235  
 wyróżniki budowy 58  
 — klasyfikacji 54  
 — — grupowej 55, 56  
 — — morfologicznej  $e_w$  i  $e_z$  105  
 — — tablicowej 19  
 — konstytucyjne 56-69  
 — właściwości 69  
 — zastosowań 71

Zredukowany stopień utlenienia 105  
 — — zasadowości 105  
 związek chemiczny, cząsteczka 103  
 — —, definicja 53, 54  
 związki chemiczne heterodrobinowe 103  
 — — homodrobinowe 103  
 — —, klasyfikacja w układzie osi nieciągłej i ciągłej 203-235  
 — czteropierwiastkowe, klasyfikacja Achumowa 176  
 — —, Jänekego 165, 166, 167  
 — —, — Jurkiewicza 187  
 — dwupierwiastkowe 96  
 — —, klasyfikacja Achumowa 170  
 — —, — Jurkiewicza 179  
 — organiczne klasyfikacja 178-235  
 — —, — Szemiakina 99-101  
 — — tlenowe 179  
 — —, — van Krevelena 198-202  
 — pierścieniowe heteroatomowe 229  
 — pięciopierwiastkowe, klasyfikacja Jänekego 167, 168  
 — proste, klasyfikacja Grimma 96-102  
 — —, — Szemiakina 96-102  
 — siarki, klasyfikacja wg stopnia utlenienia 66  
 — trójpierwiastkowe, klasyfikacja Achumowa 170-176  
 — —, — Jänekego 164, 165



PAŃSTWOWE  
WYDAWNICTWO NAUKOWE

\*

Wydanie I. Nakład 1800+200 egz.  
Ark. wyd. 20. Ark. druk. 16+7 wkle-  
jek. Papier druk. sat. kl. III, 80 g,  
70×100. Oddano do składania 25. XI,  
1970 r. Podpisano do druku 24. VII.  
1971 r. Druk ukończono w sierpniu  
1971 r. Zam. 1366/70. K-9. Cena zł 6 0

\*

WROCŁAWSKA DRUKARNIA  
NAUKOWA

# ERRATA

Str.	Wiersz		Jest	Powinno być
	od góry	od dołu		
13		5	dwu osiach	trzech osiach
33	wzór	5	nad orbitalem $s$ jest $M$ , ma być $N$	
33	wzór	11	nad orbitalami $f$ jest $P$ , ma być $O$	
70	6		jej cechy	jego cechy
81	6	do 7	objaśnienie w tekście do rysunku 15 winno brzmieć: Na rysunku 15 przedstawiono czysto teoretycznie połączenie, które można zaliczyć do większej liczby szeregów związków. Szereg poziomy jest szeregiem homologicznym, pionowy wynika z następstwa pierwiastków w grupach układu okresowego, biegnący w lewo na ukos jest szeregiem następujących po sobie izosterów w okresie układu periodycznego a ostatni jest powiązany reakcją utleniania i redukcji.	
109	tablica 38 rubryka 1	od dołu	$e_z = 7$	$e_z = 6$
119	2		${}^0_5\text{C}^{-2}$	${}^0_5\text{C}_2^{2-}$
205	8		oznaczany .	oznaczamy $\dot{N}$ .