



Геометризиране на основите на химията – основни резултати

В. Пенев

Централна лаборатория по минералогия и кристалография, БАН, 1113 София;
e-mail: vpenev@gmail.com; vpenev@cclmc.bas.bg

Проектът „Геометризиране на основите на химията”, бе разработван в периода 1992 - 2000 г., с допълнително финансиране от Националния Фонд „Научни изследвания” към Министерството на науката и образованието (договор X - 595/95). В настоящата работа са представени получените основни научни резултати, публикувани в (Пенев, 1997; Penев *et al.*, 1999; 2000a; 2000b; 2002; Penев, Konstantinov, 2004a; 2004b; 2004c; 2004d; Penев, 2001). През началната фаза на проекта, включваща периода преди договора с НФНИ и първия етап от договора, изследователската работа протече в следните направления:

- Формулиране и обосноваване на философската рамка на изследването, включваща възгледа за същността и предназначението на научното познание и концепцията за съществуването на различни еволюционни етапи в развитието на научните езици;
- Формулиране и обосноваване на проблема за геометризиране на химията;
- Анализ на общата логическа структура на най-развитите научни езици и логически анализ на езика на химията;
- Геометризиране на част от основите на химията.

Първи етап

Основни резултати

1. В резултат от логически анализ на западния тип наука:

- Бе формулиран един цялостен възглед за същността и предназначението на научното познание, който е доста различен от обичайния за западната наука възглед, но е много близък до възгледа на философско-мистичната познавателна традиция. Въз основа на този възглед е формулирана и обоснована в общ вид една от основните цели на изследването, свързана с търсене и разкриване на връзките между научното познание и философско-мистичното познание.

- Формулирана е в общ вид една цялостна концепция за съществуването на качествено различни еволюционни етапи в развитието на научните дисциплини, науките и комплексите от науки. Въз основа на еволюционната концепция е формулиран и обоснован в общ вид проблемът за изследване на закономерностите, управляващи еволюцията на научното познание. Създаден е частично инструментариума за решаването на този проблем за случая на рационални ноосферни обекти, като са дефинирани някои основни класификационни категории и понятия (таксон, вид, род, семейство, онтогенеза, филогенеза и др.) и са формулирани в общ вид две обобщения на биогенетичния закон.

Разглеждани в тяхното единство, формулираните еволюционна концепция и възглед за същността и предназначението на научното познание, представляват един макар и частичен опит да бъдат разкрити както закономерностите, които управляват развитието на научното познание, така и крайната цел на това развитие.

2. Формулирана е система от три изходни хипотези, свързани със съществуването на различни еволюционни етапи в развитието на различните научни дисциплини и науки. Въз основа на тази система от хипотези е формулиран в общ вид проблемът за геометризиране на химията. Очертан е в общ вид пътя за решаването на този проблем чрез формулиране на система от четири основни задачи, които трябва да бъдат решени в процеса на геометризиране на езика на химията. Формулирани са конкретните задачи на изследването и са коментирани някои техни особености.

3. Анализирани са общата логическа структура на най-развитите научни езици с цел подготвяне на почвата за логически анализ и геометризиране на езика на химията. В резултат на този анализ е показано, че:

- основното „оръдие на труда” във всяка наука е нейният език;

- анализът на логическата структура на езика на дадена научна дисциплина или наука представлява анализ на нейното смислово съдържание;

- смисловото съдържание на основните понятия на всеки научен език се дефинира чрез задаването на системата от отношения между тези понятия.

4. Обосноваван, построен и изследван е един приближен пространствен математически модел $P=f(S, T_0)$ на множеството S на различните видове атоми, който същевременно е еднозначен математически модел и на една опростена таблична кратка форма на Периодичната Система (ПС), означена с T_0 . В процеса на построяване и изследване на този модел са:

- въведени пространството на Менделеев $V_M(3)$ и координатната система на Менделеев $K_M=Oz\rho\phi$, спрямо които се строят всички пространствени математически модели на различните видове прости химически обекти;

- въведени са редица специфични химико-математически означения;

- уточнени са дефинициите на някои основни химически понятия;

- определени са тримерните и двумерните математически образи (спрямо K_M във $V_M(3)$) на такива основни химически понятия като химически елемент, група и период от ПС, максимална стехиометрична валентност и др.;

- формулирана е система от математически твърдения с различен логически ранг (определения, аксиоми, теореми, леми, следствия, свойства и др.);

- формулирани са някои интересни изводи.

С построяването и изследването на приближения модел фактически: а) е въведена голяма част от идейния, логически и математически инструментариум, необходим за геометризиране на езика на химията (*пространство на Менделеев $V_M(3)$, координатна система на Менделеев $K_M(3)=(O_M; z, \rho, \phi)$* и редица други основни елементи от този инструментариум); б) предложен е и е демонстриран метод за построяване на еднозначни пространствени математически модели на основните химически понятия и отношения.

5. Обосновавани, построени и анализирани са два по-точни пространствени математически модела $Q=f_1(S, T_1)$ и $G=f_1(S, T_2)$ на множеството S на различните видове атоми и съответните дълги таблични форми на ПС, означени с T_1 и T_2 . В процеса на построяване и изследване на тези два модела:

- са въведени нови специфични химико-математически означения;

- проведен е сравнителен анализ на построените три пространствени математически модела P , Q и G ;

- определени са двумерните и тримерните математически образи в двата по-точни модела Q и G на редица основни химически и физически понятия (химически елемент, период от ПС; заета електронна орбитала, еднаква и почти еднаква електронна конфигурация на валентните слоеве и др.);

- за всеки от двата по-точни математически модела

Q и G е формулирана система от математически твърдения с различен логически ранг (определения, аксиоми, теореми, леми, следствия, свойства и др.), аналогична съответната система от твърдения за приближения математически модел P .

6. Уточнени са определенията на основните химически понятия *йонизация, рекомбинация* и *степен на окисления*. Обосновавани, построени и изследвани са два обобщени пространствени математически модела $Q=F_1(S, T_1)$ и $G=F_1(S, T_2)$ на множеството S на различните видове елементарни йони. В процеса на построяване и изследване на тези модели:

- е допълнен списъкът от химико-математически символи;

- с помощта на тези символи са представени математически връзките между някои основни химически понятия;

- проведен е сравнителен анализ на двата обобщени модела Q и G ,

- определени са тримерните и двумерните математически образи в моделите Q и G на елементарните йони на различните изотопи на един и същи химически елемент, които имат еднаква степен на окисление, определени са също тримерните и двумерните математически образи на различните химически елементи;

- за всеки от двата модела Q и G е формулирана съответната система от математически твърдения с различен логически ранг (определения, аксиоми, теореми, леми, следствия, свойства и др.), която е аналогична на системата от твърдения за съответния по-точен математически модел Q или G .

7. Анализирани са логическият смисъл и начините за въвеждане на основните понятия за означаване на обекти в различните научни дисциплини и науки. Показано е, че от логическа гледна точка:

- всички понятия за означаване на обекти представляват относително определени съвкупности от свойства (без каквито и да е реални притежатели), които се дефинират чрез задаване на съответните системи от отношения;

- в процеса на своето развитие природните науки постепенно изпразват своя език от сензитивно съдържание, като същевременно го преобразуват с помощта на аксиоматичния и структурния методи;

- целта на всяка природна наука е да ни помогне чрез езика да почувстваме съществуването на неделимото, и поради това принципно неописваемо ЦЯЛО.

8. За всеки един от построените математически модели е анализиран качествения смисъл на точките и разстоянията в пространството на Менделеев $V_M(3)$. Показано е, че във всяко от точковите множества P , Q , G , Q и G : точките са еднозначни математически образи на съответните относително определени съвкупности от свойства; разстоянията между точките представят едновременно разликите между съответните относително определени съвкупности от свойства и причините за тези разлики.

9. Представена е в таблична форма връзката между познатите символи на химическите елементи, символните означения на техните двумерни математически образи в моделите P, Q и G, както и координатите на тези математически образи в равнината $z=0$ от пространството на Менделеев $V_M(3)$.

10. Представена е идейна програма за по-нататъшни изследвания, свързани както с проблема за геометризиране на езика на химията, така и със значително по-общите въпроси за смисъла и предназначението на научното познание и еволюционните етапи в неговото развитие.

С резултатите, изброени в точки 4-6, 8 и 9 в общи линии е геометризиран изцяло първия дял от езика на химията – статиката на простите химически обекти, и са положени основите за геометризирането на останалите три дяла от езика на химията. Всички представени дотук резултати, заедно с резултатите от т. 11, са изложени подробно в монографията (Пенев, 1997).

Втори етап

През втория етап работата протече в следните направления:

- Продължение на логическия анализ на езика на химията.
- Построяване и изследване на основните елементи от математическия инструментариум (пространства, координатни системи и др.), необходими за математическото моделиране на останалите три дяла от езика на химията.
- Построяване на метод за изцяло математическо пространствено представяне на произволни сложни химически обекти.

Основни резултати

11. Анализирани са общата логическа структура на основите на химията. Показано е, че от логическа гледна точка езика на химията може да бъде разделен на следните четири основни дяла: *статика на простите химически обекти; динамика на простите химически обекти; статика на сложните химически обекти; динамика на сложните химически обекти*. Показано е, че във всеки един от четирите основни дяла се въвежда съответното *централно химическо* понятие, както и свързаната с него група от основни химически понятия. Дефинирани са централните и основните понятия за всеки от четирите дяла от езика на химията. Формулирани са идейните схеми за геометризиране на отделните дялове от езика на химията. Формулирана е система от четири фундаментални *предположения за съществуване* и е показано, че всяко от тези предположения играе ролята на *централна аксиома* по отношение на съответния дял от езика на химията, тъй като въвежда както централното понятие в дадения дял, така и останалите основни понятия, свързани с това централно понятие.

12. Анализирани са логически връзките между познавателните категории *структура, състав, строеж и процес*, таксономичните категории *семейство, род, вид и подвид* и съответните групи от централни и основни химически понятия. В резултат на този анализ е показано, че:

- Ролята на *централни понятия за означаване на обекти* в езика на химията играят понятията *прост химически обект* и *сложен химически обект*, а ролята на *основни класификационни категории* в съответните дялове от езика на химията играят понятията *вид прости химически обекти* и *вид сложни химически обекти*.

- Ролята на *централни понятия за означаване на процеси* в езика на химията играят понятията *прост химически процес* и *сложен химически процес*, а ролята на *основни класификационни категории* в съответните дялове от езика на химията играят понятията *вид прости химически процеси* и *вид сложни химически процеси*.

- Във всеки от четирите дяла от езика на химията съответното централно понятие и свързаните с него основни понятия представляват последователни конкретизации (за случая на химията) на съответната група от познавателни и таксономични категории.

В резултат на проведения логически анализ е установено също така, че:

- В химическата литература както споменатите познавателни и таксономични категории, така и свързаните с тях централни и основни химически понятия или изобщо не са дефинирани, или не са дефинирани достатъчно коректно, или има съществени разлики между техните дефиниции в различни литературни източници.

- За да можем успешно да моделираме математически основните химически понятия, най-напред трябва да ги дефинираме достатъчно добре;

- За да дефинираме коректно основните химически понятия трябва преди това да дефинираме коректно съответните централни химически понятия, и съответните познавателни и таксономични категории, с които тези понятия са свързани.

13. В рамките на проведения логически анализ са дефинирани коректно и анализирани както познавателните и таксономични категории, така и централните и основни химически понятия, които се използват при математическото моделиране на статиката и динамиката на простите и сложните химически обекти. По-конкретно:

- Дефинирани и анализирани са трите взаимноопределящи се гносеологически категории *структура, състав и строеж*.

- Дефинирани и анализирани са централните химически понятия за означаване на обекти – *прост химически обект* и *сложен химически обект*, както и основните химически понятия за означаване на обекти – *атом, йонизиран атом, молекула и многоатомен йон*.

- Дефинирани и анализирани са основни класифи-

кационни категории и понятия в химическата систематика – *химически индивид, химически вид, химически подвид и химически род*¹.

• Дефинирани и анализирани са гносеологическите категории *процес и движение*.

• Дефинирани и анализирани са централните химически понятия за означаване на процеси – *прост химически процес и сложен химически процес*.

14. Построени и анализирани са:

• Шестмерно *пространство на химическите структури* $V_S(6)$, дефинирано като декартово произведение $V_S(6) = V_E(3) \times V_M(3)$ на обикновеното тримерно физическо пространство $V_E(3)$ и тримерното пространство на Менделеев $V_M(3)$.

• Координатна система на химическите структури $K_S(6) = (O_S; u, v, w, z, \rho, \varphi)$ във $V_S(6)$, дефинирана като декартово произведение $K_S(6) = K_E(3) \times K_M(3)$ на коя да е подходящо избрана координатна система $K_E(3) = (O_E; u, v, w)$ във $V_E(3)$ и координатната система на Менделеев $K_M(3) = (O_M; z, \rho, \varphi)$ във $V_M(3)$.

15. Доказано е в общ вид, че:

• Всеки сложен химически обект може да бъде представен изцяло математически и еднозначно спрямо $K_S(6)$ във $V_S(6)$ с помощта на съответна функция, която е *дефинирана в* обикновеното физическо пространство $V_E(3)$ и *приема стойности в* пространството на Менделеев $V_M(3)$.

• Всички видове сложни химически обекти се представят изцяло математически и еднозначно спрямо $K_S(6)$ във $V_S(6)$ с помощта на *дискретни и необратими* функции.

• Всички видове сложни химически обекти, които имат *периодичен строеж*, се представят изцяло математически и еднозначно спрямо $K_S(6)$ във $V_S(6)$ с помощта на *периодични* функции.

• Определянето и класифицирането на *структурите* на различните видове сложни химически обекти представлява определяне и класифициране на тези видове дискретни и необратими еднозначни функции във $V_S(6)$, които имат химически смисъл.

16. Построени и анализирани са:

• Седеммерно *пространство на химическите процеси* $V_P(7)$, което е дефинирано като декартово произведение $V_P(7) = [V_T(1) \times V_E(3)] \times V_M(3)$ на едномерното пространство на времето $V_T(1)$, обикновеното тримерно физическо пространство $V_E(3)$ и тримерното пространство на Менделеев $V_M(3)$.

• Координатна система на химическите процеси $K_P(7) = (O_P; t; u, v, w, z, \rho, \varphi)$ във $V_P(7)$, която е дефинирана като декартово произведение $K_P(7) = [K_T(1) \times K_E(3)] \times K_M(3)$ на кои да са подходящо избрани координатни системи $K_T(1) = (O_T; t)$ и $K_E(3) = (O_E; u, v, w)$ във $V_T(1)$ и $V_E(3)$, и координатната система на Менделеев $K_M(3) = (O_M; z, \rho, \varphi)$ във $V_M(3)$.

17. Доказано е в общ вид, че:

• Всеки *химически процес* може да се представи изцяло математически и еднозначно спрямо $K_P(7)$ във

$V_P(7)$ с помощта на съответната функция, която е *дефинирана във* четиримерното физическо пространство-време $[V_E(3) \times V_T(1)]$ и *приема стойности в* пространството на Менделеев $V_M(3)$.

Трети етап

През третия етап работата протече в следните направления:

• Продължение на логическия анализ на езика на химията.

• Построяване на липсващите елементи от математическия апарат и на метод за изцяло математическо еднозначно представяне на произволни химически процеси.

• Изследване на връзките между езиците на химията и геометрията.

Основни резултати

18. Направен е кратък сравнителен анализ на *физическата и геометричната* идейни схеми за представяне на *промени*, и на тяхната приложимост за математическо преформулиране на езика на химията. В резултат на този анализ е установено, че:

• Във физиката *промените* се схващат преди всичко като *процеси, протичащи с течение на времето в обикновеното физическо пространство* $V_E(3)$, а същността на физическата идейна схема за представяне на *промени* в общи линии се свежда до еднозначното задаване: 1) на съответния набор от последователни във времето „моментни снимки” на физическите величини, представящи интересуващата ни система от обекти (респ. състоянията на тези обекти); 2) на причинно-следствените връзки между физическите величини, изобразени на отделните „моментни снимки” от този набор. Задаването на причинно-следствените връзки във физиката обикновено става чрез задаване на съответните уравнения (или системи уравнения), свързващи *моментните стойности* на физическите величини, представящи физическите обекти (или техните състояния) в отделните *моментни снимки* от даден набор².

• В геометрията *промяната* се схваща преди всичко като *преобразование*, а различните видове *геометрични преобразования* се схващат като различни *математически операции*, които се прилагат върху обекти от дадено абстрактно математическо пространство, в резултат на което изходните обекти (наричани *прообрази*) се

¹ В ([1], гл. 3) е показано, че понятието *химически елемент* играе ролята на *основна надвидова таксономична категория в химическата систематика*, т. е. понятието *химически елемент* и таксономичната категория *химически род* са пълни синоними.

² Задаването на причинно-следствените връзки във физиката обикновено става чрез задаване на съответните уравнения (или системи уравнения), свързващи *моментните стойности* на физическите величини, представящи физическите обекти (или техните състояния) в отделните *моментни снимки* от даден набор.

преобразуват в обекти (наричани *образи*) от същото пространство.

- Геометричната идейна схема е много по-обща и с много по-широка област на приложимост, в сравнение с физическата. Същевременно, на настоящия етап от развитието на химията, използването на физическата схема като идейна основа за математическото представяне на химическите процеси е по-целесъобразно, тъй като езика на химията засега е много по-близък до езика на физиката, отколкото до езика на геометрията.

- Едва след цялостното математическо преформулиране на химическите дисциплини с помощта на апарата, разработен в настоящия проект, и след изясняването на тяхната логическа структура би могло да се мисли и за тяхното преформулиране изцяло в геометрични термини (т. е. за истинската им *геометризация* в същинския смисъл на това понятие), както и за тяхното истинско *аксиоматизиране* (в строгия логически и математически смисъл на това понятие).

19. Построени са липсващите елементи от математическия апарат и е разработен метод за изцяло математическо и еднозначно представяне на произволни *прости химически процеси* спрямо предварително избрана координатна система $K_p(7)$ във $V_p(7)$. За целта е показано, че:

- *Видът* на физическите частици (неутроните, протоните или валентните електрони), които в момента t се поглъщат или излъчват от даден прост химически обект, се представя изцяло математически и еднозначно чрез задаването на съответния вид оператори \hat{E}_z , \hat{E}_p или \hat{E}_ϕ в пространството на Менделеев $V_M(3)$, като с \hat{E}_z е означен *кванта на трансляция по оста Oz във $V_M(3)$* , \hat{E}_p е *кванта на трансляция по оста Oφ във $V_M(3)$* , а \hat{E}_ϕ е *кванта на ротация около оста Oz във $V_M(3)$* .

- *Броят* на физическите частици от даден вид, които в момента t се поглъщат или излъчват от даден прост химически обект, се представя изцяло математически и еднозначно чрез задаването на *целочисления степенен показател* n , m или h на съответния вид оператор $(\hat{E}_z)^n$, $(\hat{E}_p)^m$ или $(\hat{E}_\phi)^h$.

- В *процесите на поглъщане* операторите действат по посока на положителното направление на съответната ос, а в *процесите на излъчване* действат по посока на отрицателното направление на тази ос.

- *Видът* и *броят* на *свободните* физически частици, които участват в химическите процеси, може да се представи математически еднозначно чрез задаването съответния вид *свободни* оператори $n\hat{E}_z$, $m\hat{E}_p$ и $h\hat{E}_\phi$ във $V_M(3)$.

- *Процесите на поглъщане или излъчване на n*

неутрона от даден прост химически обект се представят изцяло математически и еднозначно (спрямо $K_p(7)$ във $V_p(7)$) чрез действието на оператора на трансляция $(\hat{E}_z)^n$ върху z -координатата на математическия образ във $V_M(3)$ на този прост химически обект. В резултат от действието на този оператор z -координатата в момента t_1 след поглъщането или излъчването на n неутрона е:

$$z(t_1) = [(\hat{E}_z)^n]z(t_0) = z(t_0) + n\hat{E}_z,$$

където: $z(t_0)$ е z -координатата на простия химически обект в момента t_0 преди поглъщането или излъчването на n неутрона; цялото число n е положително ($n > 0$) при процесите на поглъщане и отрицателно ($n < 0$) при процесите на излъчване на неутрони.

- *Процесите на поглъщане или излъчване на m протона* от даден прост химически обект се представят изцяло математически и еднозначно (спрямо $K_p(7)$ във $V_p(7)$) чрез действието на оператора на трансляция $(\hat{E}_p)^m$ върху p -координатата на математическия образ на този прост химически обект във $V_M(3)$. В резултат от действието на този оператор p -координатата в момента t_1 след поглъщане или излъчване на m протона е:

$$p(t_1) = [(\hat{E}_p)^m]p(t_0) = p(t_0) + m\hat{E}_p,$$

където: $p(t_0)$ е p -координатата на простия химически обект в момента t_0 преди поглъщането или излъчването на m протона; цялото число m е положително ($m > 0$) при процесите на поглъщане и отрицателно ($m < 0$) при процесите на излъчване на протони.

- *Процесите на реално или формално поглъщане или излъчване на h валентни електрона* от даден прост химически обект (т. е. процесите, водещи до промяна на *степеня на окисление* на даден прост химически обект с h), се представят изцяло математически и еднозначно (спрямо $K_p(7)$ във $V_p(7)$) чрез действието на оператора на ротация $(\hat{E}_\phi)^h$ върху ϕ -координатата на математическия образ на този обект във $V_M(3)$. В резултат от действието на този оператор ϕ -координатата в момента t_1 след поглъщането или излъчването на h валентни електрона е:

$$\phi(t_1) = [(\hat{E}_\phi)^h]\phi(t_0) = \phi(t_0) + h\hat{E}_\phi,$$

където: $\phi(t_0)$ е ϕ -координатата на простия химически обект в момента t_0 преди реалното или формално поглъщане или излъчване на h валентни електрона; цялото число h е положително ($h > 0$) при процесите на поглъщане и отрицателно ($h < 0$) при процесите на излъчване на валентни електрони.

20. Въз основа на *физическата* идейна схема за представяне на промени е разработен и анализиран метод за изцяло математическо и еднозначно представяне на произволни *сложни химически процеси* с помощта на построения математически апарат. За целта е показано, че:

- За да представим изцяло математически и едно

значно произволно избран сложен химически процес трябва: 1) Да изберем подходяща седеммерна координатна система $K_p(7) = (O_p; u, v, w; z, \rho, \varphi; t)$ в пространството на химическите процеси $V_p(7)$; 2) Спрямо избраната координатна система $K_p(7)$ да изберем тези шестмерни *моментни разрези* $[V_S(6), t_0]$ и $[V_S(6), t_1]$ на пространството $V_p(7)$, които съответстват на моментите от време t_0 и t_1 , приети за *начало* и *край* на представяния химически процес; 3) Да зададем две шестмерни *моментни снимки* на математическите образи във $V_p(7)$ на съвкупността от химически и физически обекти, които участват в представяния химически процес. Първата *моментна снимка* трябва да съдържа шестмерните математически образи спрямо $K_p(7)$ на интересувашите ни химически и физически обекти в моментния разрез $[V_S(6), t_0]$, съответстващ на началото t_0 на представяния химически процес. Втората *моментна снимка* трябва да съдържа шестмерните математически образи спрямо $K_p(7)$ на съответните химически и физически обекти в моментния разрез $[V_S(6), t_1]$, съответстващ на края t_1 на химическия процес; 4) Да представим изцяло математически и еднозначно (чрез задаване на съответното уравнение или система уравнения) дадения химически процес, т. е. да зададем изцяло математически и еднозначно съответната конкретна *система от химически причинно следствени връзки* между шестмерните математически образи на химическите и физическите обекти, изобразени на двете шестмерни „моменти снимки“.

- Построяването на изцяло математическо и еднозначно пространствено представяне на произволно избран химически процес по същество представлява построяване на съответното конкретно еднозначно изображение (функция), което *преобразува* дадено конкретно множество от математически образи на химически и физически обекти, принадлежащи към един шестмерен моментен разрез $[V_S(6), t_0]$ на $V_p(7)$, в друго конкретно множество от математически образи на химически и физически обекти, принадлежащи към друг шестмерен моментен разрез $[V_S(6), t_1]$ на $V_p(7)$.

21. Методът за построяване на изцяло математически и еднозначни представяния на химическите процеси е демонстриран практически върху примера на един прост химически процес.

22. В термините на разработения математически апарат са формулирани в общ вид *закона за запазване на електрическия заряд* и *закона за запазване на масата при химическите реакции*.

23. Дефинирани и анализирани са основните понятия *свободна химическа точка*, *свързана химическа точка* и *химически граф*, представляващи *геометрични образи* във $V_S(6)$ съответно на *свободните прости химически обекти* и *свързаните прости химически обекти* и *сложните химически обекти*.

24. Показано е, че:

- Във всеки момент от времето: а) всеки *прост химически обект* може да се представи изцяло *геометрично* чрез задаването на координатите на съответната *химическа точка* във $V_S(6)$; б) всеки *сложен химически обект* може да се представи изцяло *геометрично* чрез задаването на съответния *химически граф* във $V_S(6)$.

Понятията *свободна химическа точка*, *свързана химическа точка* и *химически граф* обхващат цялото многообразие от химически обекти и са достатъчни за геометричното представяне на произволни съвкупности от химически обекти.

- *Структурата* на всеки сложен химически обект се представя изцяло *геометрично* чрез задаването във $V_S(6)$ на *съответния химически граф*, представлящ дадения сложен химически обект.

- *Съставът* на всеки сложен химически обект се представя изцяло *геометрично* чрез задаването във $V_S(6)$ на *множеството от върховете на съответния химически граф*, представлящ дадения сложен химически обект, т. е. чрез съответното *множество от свързани химически точки*.

- *Строежът* на всеки сложен химически обект се представя изцяло *геометрично* чрез задаването във $V_S(6)$ на *множеството от ребрата на съответния химически граф*, представлящ дадения сложен химически обект.

- Ролята на *химически фигури* в пространството на химическите структури $V_S(6)$ играят *химическите точки* и *химическите графи*, а ролята на *преобразувания* в това пространство играят добре познатите *геометрични преобразувания* на обикновеното физическо пространство $V_E(3)$ и *движенията* $(\hat{E}_Z)^n$, $(\hat{E}_\rho)^m$ и $(\hat{E}_\varphi)^h$ в пространството на Менделеев $V_M(3)$.

- От геометрична гледна точка изследването на различните химическите процеси представлява изследване на *преобразуванията* на съответните множества от *химически фигури* (т. е. *химически точки* и *химически графи*) във $V_S(6)$.

- Химията е наука за *химическите фигури* във $V_S(6)$, тяхното *взаимно разположение* и *размера* на техните части, а също за *преобразуванията* на *химическите фигури*.

25. С помощта на разработения математически апарат и въведените основни понятия е формулиран един изцяло геометричен *критерий за еднаквост на химическите обекти* (т. е. на *химическите фигури* във $V_S(6)$).

Изводи и предложения за използване на получените резултати. Възможни области на приложение

- Идеията, логическият и математическият апарат, разработени в проекта, се съгласуват напълно както с идеите на стереохимията, така и с използването на теорията на графите за представяне на химическите обекти и процеси в съвременната теоретична химия.

- Още с въвеждането на стереохимичните идеи, и

след това с използването на теорията на графите, фактически е било поставено началото (макар и неявно) на процеса на геометризиране на езика на химията. *Настоящият проект представлява просто едно естествено продължение на този процес.*

- *С изпълнението на настоящия проект в общи линии е завършена предварителната работа, която е необходима както за цялостното преформулиране на химията в истински дедуктивен вид, така и за построяването на истински математически и аксиоматични формулировки на различните химически дисциплини.*

- *Основните теоретични задачи, които предстои да бъдат решавани във всяка отделна химическа дисциплина, са изясняването на нейната логическа структура и нейното изцяло математическо преформулиране с помощта на разработения математически апарат и въз основа на физическата идейна схема. С решаването на тези теоретични задачи фактически ще бъде извършена подготвителната работа за построяването на истински аксиоматични формулировки на химическите дисциплини.*

- *Едва след като бъдат построени изцяло математизирани дедуктивни формулировки на химическите дисциплини, основаващи се на физическата идейна схема, би могло да се мисли за тяхното истинско аксиоматично преформулиране въз основа на геометричната идейна схема.*

- *Дискретната математика* вероятно ще играе ролята на теоретична основа при изцяло математическото и аксиоматично преформулиране на езика на химията.

- *Преформулирането на езика на химията в термините на дискретната математика* значително ще опрости и ускори широкото навлизане в химията на редица мощни кибернетични методи и технологии - както теоретични, така и приложни.

Литература

- Пенев, В. 1997. *Геометризиране на основите на химията*. София, изд. „РИВА”, 224 стр. (с резюме на английски)
- Penev, V., L. Konstantinov, M. Marinov. 1999. Geometrization of the language of chemistry. Formulation of the problem. - *Compt. rend. Acad. bulg. Sci.*, 52, 1-2, 49-52.
- Penev, V., L. Konstantinov, M. Marinov. 2000a. The problem of geometrization of the language of chemistry. - *Academic Open Internet Journal*, vol. 2, Part 2: Chemistry (<http://www.acadjournal.com/2000/v2/part2/p2/index.html>).
- Penev, V., L. Konstantinov, M. Marinov. 2000b. Logical structure of the fundamentals of chemistry, conceptual schemes of its geometrization and spatial mathematical models of the sets of different species of simple chemical objects. - *Academic Open Internet Journal*, vol. 2, Part 2: Chemistry (<http://www.acadjournal.com/2000/v2/part2/p3/index.html>).
- Penev, V., L. Konstantinov, M. Marinov. 2002. Geometrization of the language of chemistry: Approximate spatial mathematical model of different species of atoms and Mendeleev's Periodic Law. - Published in the official site of the scientific project „*Geometrization of the language of Chemistry*”. (<http://gcl.hit.bg/Publications/Papers/p4/paper4.pdf>)
- Penev, V., L. Konstantinov. 2004a. Geometrization of the language of chemistry: Mathematical representation of the complex chemical objects. - *Academic Open Internet Journal*, vol. 11, Part 2: Chemistry – <http://www.acadjournal.com/2004/v11/part2/p3/>.
- Penev, V., L. Konstantinov. 2004b. Mathematical representations of chemical processes: Part I. Conceptual schemes for representing changes; space and coordinate system; method. - *Academic Open Internet Journal*, vol. 11, Part 2: Chemistry – <http://www.acadjournal.com/2004/v11/part2/p4/>
- Penev, V., L. Konstantinov. 2004c. Mathematical representation of chemical processes: Part II. Representation of the free physical particles and of the laws for preservation of the electric charge and the mass in chemical reactions. - *Academic Open Internet Journal*, vol. 11, Part 2: Chemistry – <http://www.acadjournal.com/2004/v11/part2/p5/>
- Penev, V., L. Konstantinov. 2004d. Geometrical images of the simple and complex chemical objects in the space of chemical structures $V_M(3)$. Investigation of the connections between the languages of chemistry and geometry. - *Academic Open Internet Journal*, vol. 11, Part 2: Chemistry – <http://www.acadjournal.com/2004/v11/part2/p6/>
- Penev, V. 2001. *Geometrization of the language of chemistry*. - Official site of the scientific research project – http://www.clmc.bas.bg/staff/V_Penev/gcl/