

**ESTUDIO TOPOLÓGICO DE LA RED DE FORMACIÓN DE COMPUESTOS
BINARIOS A PARTIR DE LOS ELEMENTOS QUÍMICOS**

ROSANA DEL PILAR SUÁREZ JAUREGUI

**UNIVERSIDAD DE PAMPLONA
FACULTAD DE CIENCIAS BÁSICAS
DEPARTAMENTO DE BIOLOGÍA Y QUÍMICA
PAMPLONA
2016**

**ESTUDIO TOPOLÓGICO DE LA RED DE FORMACIÓN DE COMPUESTOS
BINARIOS A PARTIR DE LOS ELEMENTOS QUÍMICOS**

ROSANA DEL PILAR SUÁREZ JAUREGUI
Trabajo de grado para optar al título de magíster en química

Director
GUILLERMO RESTREPO RUBIO
Químico, MSc., Dr. rer. nat.

UNIVERSIDAD DE PAMPLONA
FACULTAD DE CIENCIAS BÁSICAS
DEPARTAMENTO DE BIOLOGÍA Y QUÍMICA
PAMPLONA
2016

Nota de aceptación

Jurado

Jurado

Director

Pamplona, 27 de julio de 2016

DEDICATORIA

A Dios, a mi madre y a mi hermana, por darme la fuerza que me levanta día a día y me ayuda a vencer las dificultades

AGRADECIMIENTOS

Agradezco a:

Dios, por ser mi amigo, mi padre, mi fuerza y mi sabiduría.

Guillermo Restrepo, por aceptar ser el director de esta investigación, por acompañarme en mi proceso de formación profesional y hoy de posgrado, y por ser un ejemplo de excelencia, respeto e inspiración para desarrollarme en esta joven disciplina "*la química matemática*".

María Esther Rivera, Edgar Eduardo Daza Caicedo y Juan Pablo Rada Rincón, por aceptar ser jurados de esta investigación, por su tiempo, por su disponibilidad para evaluarla y por sus grandes aportes.

Pierre Villars y la empresa Pearson's Crystal Data, por permitirnos, sin costo alguno, la base de datos de los compuestos químicos, compuestos que son parte del corazón de esta investigación.

Alexandra Torres, directora de la maestría en química, por su apoyo incondicional en el desarrollo de una maestría de calidad y asequible a los docentes de la Universidad de Pamplona. Por su cariño maternal, por su comprensión y por la confianza depositada en sus estudiantes.

Tatiana del Pilar Suárez Jauregui, por ser apoyo incondicional en el desarrollo de esta investigación, por levantarme el ánimo para seguir adelante, por ser mi amiga y mi escucha en los momentos más difíciles, por entregarme a mi trabajo parte de los códigos para obtener los resultados y finalmente por su paciencia. Hermanita gracias.

Nancy Quintero Reyes, por su amistad, por sus enseñanzas personales y profesionales, por su apoyo y por el tiempo entregado al desenlace de esta investigación.

Adrián Rojas, por su amistad, por su apoyo y por sus valiosas correcciones en esta investigación.

Eugenio Llanos y Andrés Bernal, por su apoyo en el desarrollo de algunos programas para el tratamiento de los datos de esta investigación.

Mis compañeros inseparables *Fernando Pinzón, Yaneth Cardona y Tatiana Suárez*, por construir esta bella amistad, por soñar conmigo esta meta y hacerla posible, por sus locuras, trasnochos, lágrimas, abrazos, consejos y apoyo incondicional.

Blanca Alix Suárez Jauregui, mi ejemplo, mi amiga y mi madre, por sus oraciones, por su paciencia constante, por su amor, servicio y guía en los momentos más difíciles. Por ser el mayor modelo de mi vida, por ser un ejemplo de superación y por mostrarme siempre su infinito amor.

Mis hermanos *Frank y familia*, *Geovanny y familia*, mis primas *Belkis y familia*, *Elizabeth y familia* y mis tías *Idda y Dora*, por ser mi apoyo en los días difíciles, por la acogida que me brindaron en sus hogares donde pasé largas horas construyendo esta investigación, y por los momentos de alegría y distracción que siempre me brindaron.

Mis sobrinos *Gabriela*, *Mafer*, *Yulian*, *Johan y Alejandro*, por sus pequeñas risas, alegrías, besos y apoyo, por ser mi motor de lucha para construir con mi ejemplo un mundo mejor para ellos. Los amo.

Mis amigos invaluable *Patricia*, *Víctor y Adrián*, por darme la alegría para seguir luchando, por sus consejos justo cuando más lo necesitaba, por enseñarme a superar las dificultades y por compartir junto a mí una amistad sencilla, humilde, honesta, llena de sonrisas, abrazos y excelente comida. Gracias mi pequeño Chef.

CONTENIDO

INTRODUCCIÓN	14
1. MARCO REFERENCIAL	16
1.1 LOS ELEMENTOS QUÍMICOS A LO LARGO DE LA HISTORIA.....	16
1.2 HERRAMIENTAS MATEMÁTICAS.....	17
1.2.1 Análisis de agrupamientos jerárquico	17
1.2.1.1 Selección de un coeficiente de similitud y construcción de una matriz de semejanza	17
1.2.1.2 Selección de un metodología de agrupamiento	18
1.2.1.3 Representación gráfica de la semejanza entre los elementos	18
1.2.2 Teoría de redes.....	21
1.2.2.1 Redes químicas	23
2. METODOLOGÍA	25
2.1 CONSTRUCCIÓN Y VISUALIZACIÓN DE LAS REDES QUÍMICAS	25
2.2 PARTICIONES Y RELACIONES DENTRO DE LA RED	27
2.2.1 Extracción global.....	29
2.2.2 Extracción local.....	30
2.2.3 Extracción contextual.....	30
2.3 PROPIEDADES DE LAS REDES.....	31
2.3.1 Cohesión y núcleos.....	31
2.3.2 Centralidad y centralización de grado.....	33
2.4 ARQUITECTURA Y CARACTERÍSTICAS TOPOLÓGICAS DE LA RED	34
3. RESULTADOS Y ANÁLISIS	36
3.1 RED SIMPLE DE FORMACIÓN DE LOS COMPUESTOS BINARIOS A PARTIR DE LOS ELEMENTOS QUÍMICOS.....	36

3.1.1 CONSTRUCCIÓN DE LA RED SIMPLE.....	36
3.1.2 PARTICIONES Y RELACIONES DENTRO DE LA RED SIMPLE	36
3.1.2.1 Clasificación de la tabla periódica	37
3.1.2.1.1 Análisis familia-elemento de cada familia	38
3.1.2.1.1 Análisis elemento-elemento de cada familia	47
3.1.2.1 Clasificación a partir del análisis de agrupamientos jerárquico.....	49
3.1.3 ALGUNAS PROPIEDADES DE LA RED SIMPLE	56
3.1.3.1 Los subgrupos cohesivos.....	56
3.1.3.2 La centralidad y centralización de grado.....	57
3.1.4 LA DISTRIBUCIÓN DE GRADO DE LA RED SIMPLE	58
3.2 RED DE PROPORCIONES DE FORMACIÓN DE LOS COMPUESTOS BINARIOS A PARTIR DE LOS ELEMENTOS QUÍMICOS	60
3.2.1 CONSTRUCCIÓN Y DISTRIBUCIÓN DE GRADO DE LA RED DE PROPORCIONES.....	60
3.2.2 PARTICIONES Y RELACIONES DENTRO DE LA RED DE PROPORCIONES.....	63
3.2.3.1 Clasificación de la tabla periódica	63
3.2.3.2 Clasificación a partir del análisis de agrupamientos jerárquico.....	67
3.2.3 ALGUNAS PROPIEDADES DE LA RED DE PROPORCIONES	70
3.2.3.1 Los subgrupos cohesivos.....	70
3.2.3.2 La centralidad y centralización de grado.....	71
CONCLUSIONES	72
RECOMENDACIONES	75
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	76

LISTA DE TABLAS

1. Tabla 1. Ejemplo hipotético de la aplicación del HCA para los objetos y sus características de ausencia (0) ó presencia (1) 19
2. Tabla 2. Matriz de semejanza calculada para los objetos de la tabla 1, usando la diferencia simétrica.....20
3. Tabla 3. Matriz reducida usando la metodología de unión promedio a los objetos de la tabla 2.....20
4. Tabla 4. Matriz reducida final usando la metodología de unión promedio a los objetos de la tabla 3.....20
5. Tabla 5. Clasificación de los elementos químicos de acuerdo con la IUPAC.....37
6. Tabla 6. Agrupamientos de los elementos químicos para $n=5$52
7. Tabla 7. Estadísticos de la distribución de las conexiones de los elementos químicos en la red simple.....60
8. Tabla 8. Estadísticos de la distribución de las conexiones de los elementos químicos en la red de proporciones.....64

LISTA DE FIGURAS

1. Figura 1. Ejemplo de un dendrograma y sus partes.....	18
2. Figura 2. Dendrograma del ejemplo planteado, utilizando el cardinal de la diferencia simétrica como función de distancia y la unión promedio como metodología de agrupamiento.....	21
3. Figura 3. Clasificación de las redes según su estructura topológica	23
4. Figura 4. Ejemplo de la red simple.....	26
5. Figura 5. Ejemplo de la vecindad química del H.....	26
6. Figura 6. Ejemplo de la red de proporciones.....	27
7. Figura 7: Forma larga de la tabla periódica de los elementos químicos según la IUPAC.....	28
8. Figura 8. Ejemplo de una extracción global.....	30
9. Figura 9. Ejemplo de una extracción local.....	30
10. Figura 10. Ejemplo de una extracción contextual.....	31
11. Figura 11: Ejemplo de una red para calcular el conjunto cohesivo con la metodología de k -núcleo.....	32
12. Figura 12: Subgrupo cohesivo ($k=2$).....	32
13. Figura 13. Ejemplo del grado de centralización para dos redes a) y b).....	34
14. Figura 14. Red simple de formación de compuestos binarios a partir de los elementos químicos.....	36
15. Figura 15. a) Relaciones entre las familias (tabla 5), donde la etiqueta del vértice representa el grado y el número adyacente al vértice, su familia. b) Gráfica de distribución de grado de las familias.....	38
16. Figura 16. Relaciones entre las familias de los alcalinos y otras familias.....	39

17. Figura 17. Relaciones entre la familia de los alcalinotérreos y otras familias.....	39
18. Figura 18. Relaciones entre la familia del escandio según la IUPAC a) 1 y b) 2, con otras familias.....	40
19. Figura 19. Relaciones entre las familias del titanio y otras familias.....	40
20. Figura 20. Relaciones entre las familias del vanadio y otras familias.....	41
21. Figura 21. Relaciones entre las familias del cromo y otras familias.....	41
22. Figura 22. Relaciones entre las familias del manganeso y otras familias.....	41
23. Figura 23. Relaciones entre las familias del hierro y otras familias.....	42
24. Figura 24. Relaciones entre las familias del cobalto y otras familias.....	42
25. Figura 25. Relaciones entre las familias del níquel y otras familias.....	42
26. Figura 26. Relaciones entre la familia del cobre y otras familias.....	43
27. Figura 27. Relaciones entre la familia del zinc y otras familias.....	43
28. Figura 28. Relaciones entre la familia de los térreos y otras familias.....	43
29. Figura 29. Relaciones entre la familia de los carbonoides y otras familias.....	44
30. Figura 30. Relaciones entre la familia de los nitrogenoides y otras familias.....	44
31. Figura 31. Relaciones entre la familia de los calcógenos y otras familias.....	45
32. Figura 32. Relaciones entre la familia de los halógenos y otras familias.....	45
33. Figura 33. Relaciones entre la familia de los gases nobles y otras familias.....	46
34. Figura 34. Relaciones entre la familia del hidrógeno y otras familias.....	46
35. Figura 35. Relaciones entre la familia de los lantánidos y otras familias.....	47
36. Figura 36. Relaciones entre la clasificación 1 de la familia de los actínidos y otras familias.....	47
37. Figura 37. Relaciones entre la clasificación 2 de la familia de los actínidos y otras familias.....	46

38. Figura 38. Relaciones intrafamiliares.....	48
39. Figura 39. Dendrograma de los elementos químicos usando la diferencia simétrica como métrica, la unión promedio como metodología de agrupamiento, <i>ties in proximity</i> y el método estricto consenso.....	51
40. Figura 40. Relaciones entre los grupos 1, 2, 3 y otros agrupamientos.....	54
41. Figura 41. Relaciones entre los elementos de los grupos 12, 13, 14, 16, 17 del sexto periodo y los elementos de los grupos 6, 18, 19 del séptimo periodo, y otros agrupamientos.....	54
42. Figura 42. Relaciones entre los elementos del grupo 23 y otros agrupamientos.....	54
43. Figura 43. Relaciones entre los elementos del grupo 28 y otros agrupamientos.....	56
44. Figura 44. a) Relaciones entre los grupos del HCA (tabla 6), donde la etiqueta del vértice representa el grado, y el número adyacente al vértice, su agrupamiento. b) Gráfica de distribución de grado de los grupos del HCA.....	55
45. Figura 45. Relaciones entre los grupos generados a partir del HCA.....	56
46. Figure 46. Partición de la red simple de los elementos químicos a partir de k -núcleo.....	56
47. Figura 47. Desconexión de la red simple por la eliminación de los elementos centrales en amarillo.....	57
48. Figura 48. Distribución de grado de los elementos químicos en la red simple....	59
49. Figura 49. Histograma de la distribución de conexiones de la red simple.....	60
50. Figura 50. Distribución de grado de los elementos químicos de la red de proporciones: Grado vs. Elemento.....	62
51. Figura 51. Histograma de la distribución de conexiones de la red de proporciones.....	63
52. Figura 52. Distribución de grado de los elementos químicos clasificados de acuerdo a las familias químicas de la tabla periódica (IUPAC): Grado vs. Elemento-Familia.....	65

53. Figura 53. Distribución de grado del promedio de las familias en la red de proporciones: Grado vs. Familia.....	66
54. Figura 54. Grado de los elementos químicos vs. Agrupamientos: los elementos de cada agrupamiento producto del HCA son ordenados ascendentemente acorde a su peso atómico.....	68
55. Figura 55. Grado de los elementos químicos vs. Elementos ordenados ascendentemente acorde a su peso atómico y distinguidos por colores según los agrupamientos generados a partir del HCA.....	69
56. Figura 56. Subgrupo cohesivo de la red de proporciones.....	70

INTRODUCCIÓN

*“La tabla periódica es, para los químicos como las notas musicales de una sonata de Beethoven”
Bill Nye. 100 greatest discoveries chemistry*

La química con su reciente reflexión sobre el comportamiento sistémico de las sustancias, ha permitido estudiar los elementos químicos como un conjunto de objetos y relaciones (Restrepo, G., 2005). Dichas relaciones han sido analizadas a través de las propiedades químicas, o lo que Schummer, J., 1998 ha llamado “El núcleo químico de la química”. Este núcleo es entendido como la unión de las reacciones individuales que podrían ser representadas a través de una red, base para la clasificación en química.

Así, el objetivo general de esta investigación es estudiar la red de elementos químicos a partir de la formación de compuestos binarios para caracterizar su estructura. Los objetivos específicos son:

- 1) Analizar las interacciones clase-clase, clase-elemento y elemento-elemento en la tabla periódica y en clasificaciones resultantes del HCA.
- 2) Estudiar los subgrupos cohesivos de la red simple y la red de proporciones para determinar los subconjuntos de elementos químicos que presentan mayor número de relaciones al formar compuestos binarios.
- 3) Buscar los elementos centrales de la red simple y de la red de proporciones para determinar cuáles de ellos influyen en la estructura de conectividad de la red.
- 4) Analizar la conectividad entre los vértices a partir de la centralización de grado, para conocer si la red simple depende de un solo elemento, o de un subconjunto de elementos, o de todos los elementos para formar los compuestos binarios.
- 5) Determinar la arquitectura topológica que describe la red simple y la red de proporciones de formación de compuestos binarios a partir de los elementos químicos para saber si presentan un modelo aleatorio, libre de escala, de mundo pequeño o regular.

Este trabajo permite entender más a fondo el comportamiento de 97 elementos de la tabla periódica, pues al analizar su capacidad para formar compuestos binarios se pueden determinar las nuevas relaciones que emergen de sus interacciones.

Así, a través de esta investigación se estudiaron relaciones no abarcadas antes por otros trabajos, donde se muestran las características generadas como producto de las interacciones entre las familias de la tabla periódica y se explica el comportamiento de cada elemento, teniendo en cuenta no solamente su posición

en la tabla, sino también las relaciones con todos los demás elementos ó familias. Del mismo modo se generó una clasificación nueva y más completa que incluye 18931 compuestos binarios. Estos compuestos fueron tomados de la literatura científica existente que incluyen la base de datos de Leal, W. et al., 2012 y la base de datos *Pearson's Crystal Data* de Villars, P. y Cenzual, K., 2015. Las metodologías de HCA, *ties in proximity* y dendrograma consenso (Restrepo, G. et al., 2004; Leal, W. et al., 2016) fueron seleccionadas y aplicadas sobre los elementos que forman compuestos binarios; las dos últimas metodologías mencionadas, así como el alto número de compuestos binarios con proporciones estequiométricas y no estequiométricas (antes no analizados en otros estudios), se utilizaron para caracterizar adecuadamente los elementos químicos y agruparlos de acuerdo a su mayor semejanza.

Esta investigación aporta la posibilidad de completar la visión actual que se tiene de los elementos químicos, estudiados desde una red que permite extraer conclusiones que van más allá de las ya conocidas. Este trabajo centrado en la teoría de redes permite analizar de manera más integral, las relaciones existentes entre los elementos químicos y sirve de base para estudiarlos más profundamente, como un aporte al entendimiento de las implicadas relaciones que existen entre ellos. Dicha metodología y visión conjuntista de la química puede ser usada para el estudio de los diferentes campos de la química, como bioquímica, orgánica, inorgánica, entre otros, con el fin de conocer nuevas propiedades producto de las interacciones entre las sustancias químicas.

1. MARCO REFERENCIAL

1.1 LOS ELEMENTOS QUÍMICOS A LO LARGO DE LA HISTORIA

En la primera década de 1800 se conocían alrededor de cincuenta elementos con propiedades que variaban extensamente y mostraban poca relación entre ellos; sin embargo, conforme se descubrían más elementos los científicos empezaron a observar regularidades y patrones en sus propiedades físicas y químicas, lo que condujo a clasificarlos. Las primeras clasificaciones se hicieron a partir de la formación de óxidos ácidos y básicos, la clasificación desarrollada por Guyton en 1787 que expresaba a través de sus nombres la composición química de los elementos y el concepto de valencia química* que se conocía hasta la mitad del siglo XIX. Otros científicos, incluyendo a Berzelius en 1814, mostraron una clasificación en metales y no metales, a partir de las propiedades físicas y químicas de los elementos (Osorio, R. y Alzate, M., 2010). Newth pensó en una reclasificación de estos grupos y encontró los llamados metaloides o elementos que tenían semejanzas con los metales y los no metales (Goldsmith, R., 1982).

Las investigaciones continuaron y mostraron agrupaciones como las triadas de Döbereiner, el tornillo telúrico de Chancourtouis, las octavas de Newlands, las relaciones entre el volumen atómico y el peso atómico de Meyer, y finalmente la tabla de Mendeleiev, que dio respuesta al ordenamiento de los elementos a través de relaciones periódicas. Este científico reunió el conjunto de conocimientos de la química, incluyendo los pesos atómicos de Cannizzaro, el orden de las relaciones de la reactividad de las sustancias y la posibilidad de predecir reacciones químicas, y lo integró en la organización racional de los elementos químicos; esto le permitió fundamentar la ley periódica y realizar predicciones de elementos químicos, aún no descubiertos en su época. De esta manera, demostró que la química puede ser una ciencia organizacional, enlazada a la capacidad de inferir y predecir (Osorio, R. y Alzate, M., 2010).

Esta visión hace parte hoy de una disciplina conocida como química matemática (Restrepo, G. y Villaveces, J., 2012; Restrepo G., 2016). Una aproximación al estudio de la tabla periódica a través de técnicas de agrupamiento, combinadas con propiedades topológicas, que ha permitido estudiar las relaciones entre las sustancias químicas, es el trabajo de Restrepo, G. et al., 2004, quienes estudiaron el comportamiento de los elementos de acuerdo a cada familia. Por otra parte, Chen, D., 2010 mostró un mapa bidimensional para estudiar la interacción entre los elementos; del mismo modo Leal, W. et al., 2012 reprodujeron algunas familias de la tabla periódica y encontraron a partir de relaciones topológicas, propiedades particulares para ciertos subconjuntos de elementos (alcalinos, halógenos, entre

* El concepto de valencia química que se conocía hacia la mitad del siglo XIX de Frankland, E., 1852, expresaba que *“cada elemento forma compuestos con cantidades definidas de otros elementos, ya que cada uno de ellos tiene una atomicidad definida”* (Rodríguez, E. y Ospina J., 2010).

otros). Sin embargo, en la actualidad no hay un estudio disponible que muestre las relaciones familia-familia, familia-elemento y elemento-elemento (Chen, D., 2010), siendo este uno de los objetivos de esta investigación; y a diferencia de las relaciones de semejanza estudiadas por Leal, W. et al., 2012 usando 4700 compuestos binarios, este trabajo genera una nueva clasificación con información más completa, usando 18931 compuestos binarios y la metodología de *ties in proximity* que tiene en cuenta todas las clasificaciones probables productos del HCA

1.2 HERRAMIENTAS MATEMÁTICAS

1.2.1 Análisis de agrupamientos jerárquico

Este es un método no supervisado de clasificación que permite descubrir asociaciones y estructuras en los datos. El HCA consta de los siguientes pasos (Suárez, T., 2010):

1. Selección de un coeficiente de similitud y construcción de una matriz de semejanza.
2. Selección de una metodología de agrupamiento.
3. Representación gráfica de las semejanzas entre los objetos.

1.2.1.1 Selección de un coeficiente de similitud y construcción de una matriz de semejanza

Para cuantificar qué tan semejantes o diferentes pueden ser los objetos en estudio, se usan los coeficientes de semejanza, que pueden ser de similaridad o de disimilaridad. En este último caso, el coeficiente de semejanza es una métrica o función matemática que mide la distancia que hay entre dichos objetos, de tal forma que una distancia más grande indica una menor semejanza entre ellos y viceversa. Matemáticamente una función de distancia debe cumplir las propiedades de la definición 1 (Chávez, E. y López, N., 2005; Neira, C., 2011):

Definición 1: Sea X un conjunto. La función $S = X \times X \rightarrow \mathbb{R}$ se llama semejanza o proximidad en X si para todo $x, y \in X$, se cumple:

- $d(x, y) \geq 0$. La distancia entre dos objetos es siempre no negativa.
- $d(x, y) = 0 \leftrightarrow x = y$. La distancia entre dos objetos es cero si y solo si los objetos son iguales.
- $d(x, y) = d(y, x)$. La distancia entre x y y es la misma que entre y y x .
- $d(x, y) \leq d(x, z) + d(z, y)$. La distancia entre dos objetos es siempre menor o igual que la suma de la distancia de estos dos objetos a un tercero.

Teniendo en cuenta que el concepto de distancia es muy importante para una clasificación, su selección depende de la naturaleza de los datos (cualitativos o cuantitativos) y la escala de esos datos (binarios o continuos).

Para construir la matriz de semejanza, se organizan los coeficientes de semejanza obtenidos para todos los posibles pares de objetos, en una matriz cuadrada y simétrica donde la primera fila y la primera columna contienen a los objetos en el mismo orden (Suárez, T., 2010).

1.2.1.2 Selección de una metodología de agrupamiento

Existen dos tipos de metodologías de agrupamiento, las no jerárquicas, donde el número de agrupamientos se conoce por anticipado y se calculan los objetos de estos grupos; y los métodos jerárquicos que reúnen los objetos que están más próximos en términos de distancia y construyen una jerarquía de grupos, es decir, generan niveles de agrupamientos y los ordenan de forma estructurada (Quintero, N., 2012).

1.2.1.3 Representación gráfica de la semejanza entre los elementos

El resultado final del análisis de agrupamientos jerárquico es un dendrograma, que se define como un grafo acíclico y conexo que muestra la semejanza entre los objetos de estudio.

Como se observa en la figura 1, un dendrograma está compuesto por los vértices de grado 1, que son los objetos: a, b, c, d, un único vértice de grado 2 llamado nodo raíz y vértices de grado 3, llamados nodos (Suárez, T., 2010):

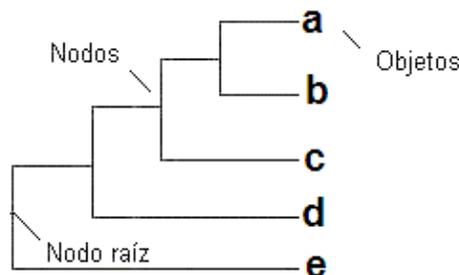


Figura 1. Ejemplo de un dendrograma y sus partes

Una vez que se tiene el dendrograma como producto final de la clasificación, es necesario tener un criterio para la partición o corte y determinar el número óptimo de agrupamientos. Aunque existen revisiones bibliográficas de métodos para la determinación del número de agrupamientos, en general un método puede funcionar mejor que otro dependiendo de los datos y del criterio del investigador (Quintero, N., 2012). El parámetro que se usó en esta investigación fue el número de selección (ecuación 1):

$$S = C \prod_i |C_i|$$

Ecuación 1

donde:

C es el número de agrupamientos para un n^\dagger dado.

$\prod_i |C_i|$ es el producto de los cardinales o poblaciones i de los agrupamientos obtenidos.

Se ha observado que S aumenta a medida que aumenta el número de agrupamientos y su población; por lo tanto, el mejor valor de n es el que maximiza el valor de S (Quintero, N., 2012; Restrepo, G., 2006).

Cuando $n = 1$, se obtiene una base cuyos elementos son conjuntos unitarios y allí cada elemento es su propia vecindad; se obtienen muchos agrupamientos, mostrando que cada elemento se parece solamente a sí mismo; si $n =$ número de elementos en estudio, se obtiene un conjunto unitario que contiene todos los elementos, es decir un solo agrupamiento donde todos los elementos tienen relación de semejanza entre ellos (Restrepo, G. et al., 2006).

El HCA tradicionalmente estudia objetos caracterizados a través de algunas de sus propiedades (Ibid), por ejemplo los elementos químicos a través de sus propiedades como puntos de fusión y entalpías de formación.

Un ejemplo hipotético de la aplicación del HCA, que usa la diferencia simétrica como coeficiente de similitud y la unión promedio como metodología de agrupamiento, se muestra a continuación:

En este caso los objetos son elementos químicos y las propiedades son las relaciones entre estos elementos, es por ello que la matriz de partida para el HCA tiene los objetos a,b,c,d caracterizados por los objetos a,b,c,d, donde cada celda indica si existe la relación entre los dos objetos (1) o no existe (0).

Para este caso se ha seleccionado la diferencia simétrica como coeficiente de similitud debido a que los objetos de estudio de la tabla 1 están caracterizados por variables binarias. De esta manera se calcula con la diferencia simétrica (ecuación 2) la semejanza entre cada par de objetos, determinando cuántos vecinos no son comunes a ellos y se obtiene la matriz de semejanza (tabla 2).

Tabla 1. Ejemplo hipotético de la aplicación del HCA para los objetos y sus características de ausencia (0) ó presencia (1)

	a	b	c	d
a	0	0	1	1
b	0	1	1	1
c	1	1	0	0
d	1	1	0	0

[†] n se define como el máximo número de objetos que componen el agrupamiento.

$$|A\Delta B| = (A\setminus B)\cup(B\setminus A)$$

Ecuación 2

donde:

$|A\Delta B|$ = cardinal de la diferencia simétrica entre cada par de objetos A y B.

$(A\setminus B)$ = los objetos de A que no pertenecen a B.

$(B\setminus A)$ = los objetos de B que no pertenecen a A.

Tabla 2. Matriz de semejanza calculada para los objetos de la tabla 1, usando la diferencia simétrica

	a	b	c	d
a	0	1	4	4
b	1	0	3	3
c	4	3	0	0
d	4	3	0	0

A continuación se usa una metodología de agrupamiento conocida como unión promedio; aquí se selecciona el valor mínimo en la matriz de semejanza, en este caso entre los objetos c y d, y se genera una nueva matriz reducida con la unión de ambos objetos (tabla 3); se sigue el procedimiento y se obtiene la tabla 4.

Tabla 3. Matriz reducida usando la metodología de unión promedio a los objetos de la tabla 2

	a	b	{c,d}
a	0	1	4
b	1	0	3
{c,d}	4	3	0

Tabla 4. Matriz reducida final usando la metodología de unión promedio a los objetos de la tabla 3

	{a,b}	{c,d}
{a,b}	0	3,5
{c,d}	3,5	0

La representación gráfica del presente ejemplo, se muestra a continuación a través del dendrograma de la figura 2:

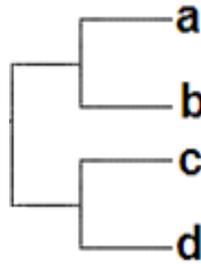


Figura 2. Dendrograma del ejemplo planteado, utilizando el cardinal de la diferencia simétrica como función de distancia y la unión promedio como metodología de agrupamiento

1.2.2 Teoría de redes

La teoría de redes se ha alimentado y ha evolucionado gracias a las investigaciones de la sociología, la antropología, la matemática y las ciencias de la computación, que han permitido estudiar y entender el comportamiento de diferentes sistemas y representarlos a través de un grafo como un conjunto de actores, nodos o vértices (que pueden ser personas, cosas, comunidades, grupos, moléculas, animales, etc) vinculados unos a otros a través de un conjunto de relaciones (Rodríguez, A. et al., 2008).

Matemáticamente la definición de red está basada en la teoría de grafos, ya que ofrece una base para la notación e identificación topológica de la red. A continuación se muestran las expresiones matemáticas que permiten formalizar la definición de red (Aguirre, J., 2011; Nooy, W. et al., 2006).

Definición 2: Un grafo G es un par ordenado $G = (V, E)$, donde V es un conjunto de objetos (vértices) y E es un conjunto de pares de vértices (aristas).

De esta manera se define el grado de un vértice:

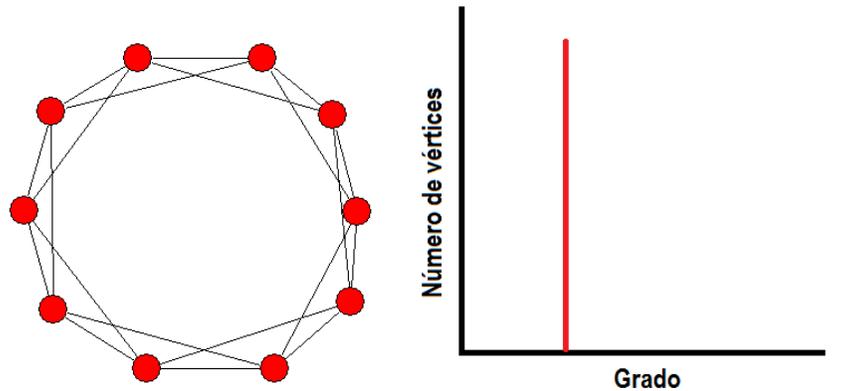
Definición 3: El grado de un vértice $x \in V$ del grafo G es el número de líneas que inciden sobre x .

Así, una red se define como:

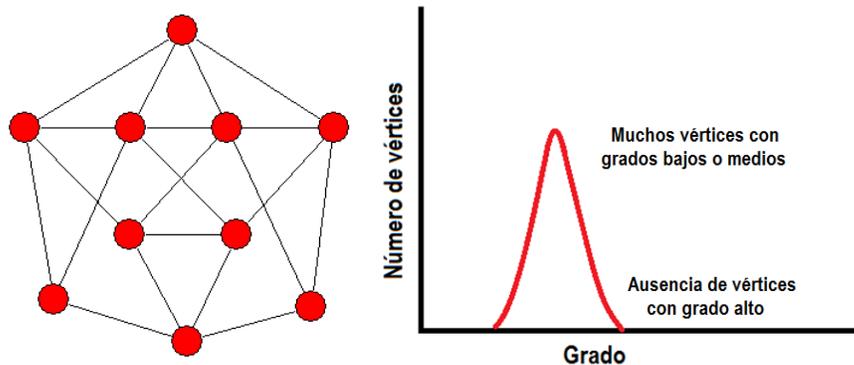
Definición 4: Una red se compone de un grafo $G = (V, E)$ con información adicional, ya sea en los vértices o en las aristas.

Algunos ejemplos de redes son las redes cerebrales, que se estructuran gracias a las conexiones o sinapsis que tienen las células a través de los axones; la red celular de las moléculas que se conectan a partir de reacciones bioquímicas; otros ejemplos, son las redes sociales que se generan gracias a las relaciones humanas y las redes lingüísticas de comunicación que se crean por las relaciones sintácticas entre palabras (Aguirre, J., 2011).

Topológicamente existen cuatro modelos de redes conocidas que dependen de las distribuciones de los vértices y sus aristas: redes regulares, redes aleatorias, redes de mundo pequeño y redes libres de escala. Las redes regulares (figura 3a) modelan los sistemas que nos rodean al estilo de un retículo euclidiano, donde todos los vértices cuentan con el mismo número de conexiones. Las redes aleatorias (figura 3b) tienen comportamientos totalmente al azar, donde el número de conexiones por vértice tiene una distribución de Poisson, con forma de campana. Las redes de mundo pequeño (figura 3c), presentan una distribución de conexiones que decae exponencialmente, lo que significa que la mayor cantidad de vértices en la red tiene el mismo número de conexiones y la mayoría de los vértices pueden ser alcanzados desde cualquier vértice origen a través de un número relativamente bajo de aristas entre ellos. Finalmente las redes libres de escala (figura 3d) presentan vértices con conexiones que están descritas por una función de potencia decreciente continua, donde la mayoría de los vértices presentan muy pocas conexiones y unos pocos, llamados *hubs* que tienen un gran número de conexiones. Este tipo de redes representa la arquitectura de los sistemas complejos, como la WWW, los sistemas metabólicos y las relaciones de los actores de Hollywood (Barabasi, A. y Bonabeau, E., 2003; Newman, M., 2003).



a)



b)

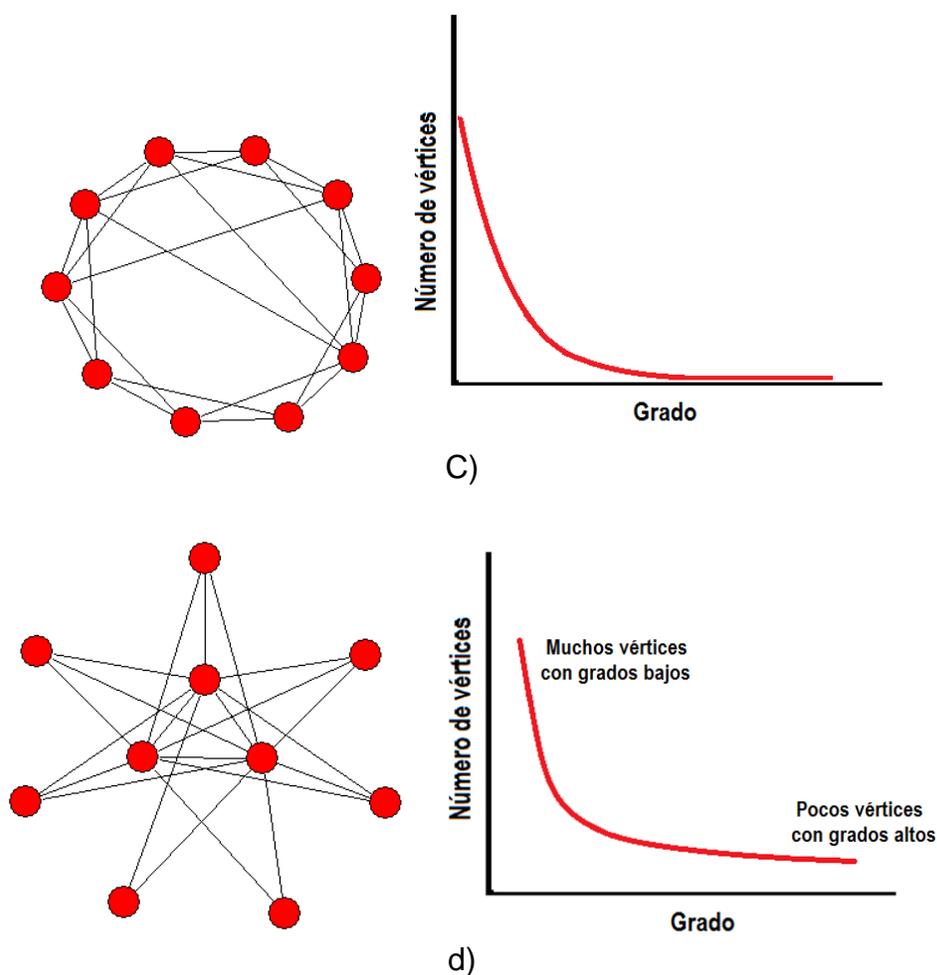


Figura 3. Clasificación de las redes según su estructura topológica

1.2.2.1 Redes químicas

Durante los últimos años, Grzybowski y su equipo han estudiado redes gigantescas de reacciones químicas. Así, por ejemplo, en Fialkowski, M. et al., 2005, Bishop, K. et al., 2006, Grzybowski, B. et al., 2009, Gothard, C. et al. y Kowalik, M. et al., 2012, construyeron y analizaron la red de la química orgánica (NOC, del inglés *Network of Organic Chemistry*) a partir de la base de datos más grande de sustancias orgánicas y reacciones químicas, la *Beilstein Database* (actualmente *Reaxys*, que agrupa las bases de datos *Beilstein* y *Gmelin*, más patentes). En estos estudios las sustancias químicas fueron representadas como vértices y cada arista representaba a dos sustancias que participaban en una reacción, como reactivo y como producto lo que generó una red descrita como un grafo dirigido.

Con base en lo anterior, estos investigadores analizaron la dinámica de la NOC, observando el cambio de las masas moleculares con respecto al tiempo y la relación síntesis-costo, encontrando que desde 1850 a 2004 la masa ha aumentado en

promedio de 200g/mol a 350g/mol. También observaron que el valor de venta de una sustancia disminuye en la medida en que dicha sustancia tenga más reacciones que la produzcan y participe en más reacciones como reactivo. Tal vez una de las contribuciones más interesantes de estos trabajos es el comportamiento libre de escala que presenta esta red y que la hace similar a las redes que se presentan en otros contextos de la naturaleza (Fialkowski, M. et al., 2005; Grzybowski, B. et al., 2009).

Por otra parte, trabajando con la misma red y a partir de la teoría de redes y técnicas estadísticas, demostraron que existe un pequeño conjunto de sustancias altamente conectadas denominados núcleos (*hubs*); a partir de ellos, se pueden sintetizar la mayoría de las sustancias orgánicas que hacen parte de la llamada periferia de la NOC, en tres o menos reacciones. Además, usando el método de Monte Carlo se han desarrollado algoritmos de búsqueda para identificar pequeños conjuntos de productos químicos útiles, seleccionados según las necesidades de las empresas químicas (Bishop, K. et al., 2006).

Así, mostraron cómo a partir de la NOC y de diferentes algoritmos se pueden encontrar rutas sintéticas que cumplan con las necesidades económicas de una empresa, profundizando en la búsqueda de rutas para reacciones multicomponentes y desarrollando algoritmos computacionales eficientes para descubrir nuevas reacciones (Gothard, C. et al. y Kowalik, M. et al., 2012).

Otros acercamientos en el campo de las redes químicas son los estudios farmacológicos y celulares (interacciones genes, proteínas, metabolitos, entre otros), que han tenido un impacto importante en el desarrollo de fármacos sin efectos secundarios significativos (Hopkins, A., 2008) y han contribuido al desarrollo de la comprensión de los procesos biológicos con el fin de entender cómo funcionan las células y cómo se originan nuestras enfermedades (Bernal, A. y Daza, E., 2011; Han, J. et al., 2004). Aunque estas investigaciones no están directamente relacionadas con este trabajo, es importante mencionarlas ya que son los trabajos más cercanos al campo de la química donde ha tenido gran influencia la teoría de redes.

2. METODOLOGÍA

2.1 CONSTRUCCIÓN Y VISUALIZACIÓN DE LAS REDES QUÍMICAS

Se recolectaron 18931 compuestos binarios[‡] usando las base de datos de Leal, W. et al, 2012, la base de datos *Pearson's Crystal Data* (Villars, P. y Cenzual, K., 2015) y la búsqueda bibliográfica. De esta manera se generó una sola base de datos con estas fuentes bibliográficas, eliminando a aquellos compuestos repetidos y se seleccionaron todos los posibles elementos químicos presentes en estos compuestos, obteniéndose un total de 97 elementos que se muestran a continuación:

H, He, Li, Be, B, C, N, O, F, Ne, Na, Mg, Al, Si, P, S, Cl, Ar, K, Ca, Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Ga, Ge, As, Se, Br, Kr, Rb, Sr, Y, Zr, Nb, Mo, Tc, Ru, Rh, Pd, Pt, Cd, In, Sn, Sb, Te, I, Xe, Cs, Ba, La, Ce, Pr, Nd, Pm, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu, Hf, Ta, W, Re, Os, Ir, Pt, Au, Hg, Tl, Pb, Bi, Po, At, Ra, Ac, Th, Pa, U, Np, Pu, Am, Cm, Bk, Cf, Es

Con base en la información obtenida se construyeron dos tipos de redes: la red simple de formación de compuestos binarios a partir de los elementos químicos, basada en la definición de Leal et al., que se abrevió como “**red simple**”, y la red de proporciones de formación de compuestos binarios a partir de los elementos químicos, que se abrevió como “**red de proporciones**”.

A continuación se muestran las definiciones más importantes para caracterizar dichas redes (Leal, W. et al., 2012).

Definición 5: Sea X un conjunto de elementos químicos y B un conjunto de compuestos binarios. Sea $E = \{\{x, y\} \mid x, y \in X \wedge \exists \text{ un compuesto } x_a y_b \in B \text{ con } a, b \in \mathbb{R}^+\}$. Llamamos $G = (X, E)$ **la red simple de formación de compuestos binarios a partir de los elementos químicos, abreviada como “red simple”**.

Ejemplo de la red simple

Sea $X = \{\mathbf{B}, \mathbf{H}, \mathbf{F}, \mathbf{Li}\}$ y $B = \{\mathbf{B}_2\mathbf{H}_6, \mathbf{B}_5\mathbf{H}_9, \mathbf{B}_{10}\mathbf{H}_{14}, \mathbf{H}_1\mathbf{F}_1, \mathbf{Li}_1\mathbf{F}_1, \mathbf{Li}_1\mathbf{H}_1\}$ [§]. Entonces la red simple es la unión de los elementos que forman al menos un compuesto binario, como se muestra en la figura 4:

[‡] En este trabajo se entiende un compuesto binario como un compuesto químico que está formado sólo por dos elementos diferentes. Dichos elementos se combinan en proporciones simples y enteras (compuestos binarios estequiométricos) y mixtas y variables (compuestos binarios no estequiométricos).

[§] En el presente trabajo se hace énfasis en los coeficientes estequiométricos con valor de 1, aunque en química se suele escribir sin este valor, por ejemplo: HF se muestra en el trabajo como $\mathbf{H}_1\mathbf{F}_1$.

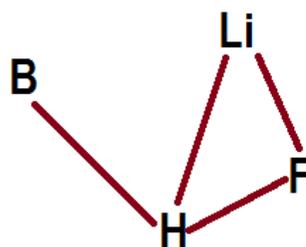


Figura 4. Ejemplo de la red simple

En el ejemplo el B tiene grado 1, el F y Li grado 2, y el H grado 3, lo que expresa que el H es el elemento que forma mayor número de compuestos binarios (generando compuestos que son químicamente más diversos) y que por el contrario el B presenta menor diversidad en sus relaciones.

Para definir la segunda red es necesario precisar el concepto de vecindad química, así:

Definición 6: Sea X un conjunto de elementos químicos, B un conjunto de compuestos binarios que involucran elementos de X . Se define **un vecino químico de un elemento** x como $y_{b/a}$ tal que se verifica que :

- 1) $y \wedge x \in X$
- 2) \exists un compuesto para $y \wedge x$ de la forma $x_a y_b \vee y_b x_a \in B$
- 3) $y \in X$ cumple la relación (b/a) con $a, b \in \mathbb{R}^+$

Entonces se define **la vecindad química** N_x como la unión de todos los $y_{b/a}$

Ejemplo de la vecindad química para el H

Sea $X = \{B, H, F, Li\}$ y $B = \{B_2H_6, B_5H_9, B_{10}H_{14}, H_1F_1, Li_1F_1, Li_1H_1\}$. La vecindad química de H es $N_H = \{B_{2/6}, B_{5/9}, B_{10/14}, F_{1/1}, Li_{1/1}\}$, como se observa en la figura 5:

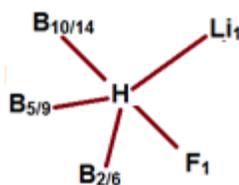


Figura 5. Ejemplo de la vecindad química del H

Asimismo, las demás vecindades de los elementos del conjunto X , son:

$$N_B = \{H_{6/2}, H_{9/5}, H_{14/10}\}, N_F = \{H_{1/1}, Li_{1/1}\}, \text{ y } N_{Li} = \{F_{1/1}, H_{1/1}\}$$

Definición 7: Sea X un conjunto de elementos químicos, B un conjunto de compuestos binarios que involucran elementos en X y N el conjunto de todas las vecindades químicas de X . Si X_S es el conjunto de vértices, separado en dos conjuntos distintos X y N ; y E_S son las relaciones que existen entre X y N , entonces $G_S = (X_S, E_S)$ es **la red de proporciones de formación de compuestos binarios a partir de los elementos químicos**, abreviada como **red de proporciones**.

Ejemplo de la red de proporciones

La red de proporciones tiene la estructura de una red bipartita donde existen dos conjuntos de vértices $X = \{B, H, F, Li\}$ y $N = \{H_{6/2}, H_{9/5}, H_{14/10}, B_{2/6}, B_{5/9}, B_{10/14}, F_{1/1}, Li_{1/1}, H_{1/1}\}$, además se cumple que sus aristas relacionan entre sí a elementos de los dos conjuntos y no los elementos de un mismo conjunto. Así $X_S = \{X, N\}$ y $E_S = \{(B, H_{6/2}), (B, H_{9/5}), (B, H_{14/10}), (H, B_{2/6}), (H, B_{5/9}), (H, B_{10/14}), (H, F_{1/1}), (H, Li_{1/1}), (F, H_{1/1}), (F, Li_{1/1}), (Li, F_{1/1}), (Li, H_{1/1})\}$. La red de proporciones $G_S = (X_S, E_S)$ se muestra en la figura 6:

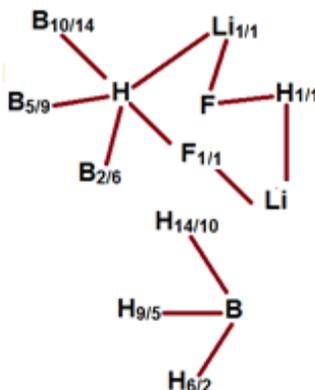


Figura 6. Ejemplo de la red de proporciones

La red muestra los diversos tipos de elementos y estequiometrías con los que se combina cada elemento químico, lo que permite distinguir por ejemplo que el B tiene mayor número de compuestos binarios que el Li; por el contrario, la red simple muestra las interacciones entre elementos diferentes. Un ejemplo es el Li que muestra interacciones mucho más diversas que el B, al formar compuestos binarios.

2.2 PARTICIÓN Y RELACIONES DENTRO DE LAS REDES

Se define una partición como (Nooy, W. et al., 2006):

Definición 8: Una partición de una red es una clasificación de los vértices en la red de tal manera que cada vértice se asigna exactamente a una clase.

simétrica ($|Nu\Delta Nv|$) y el cardinal de la unión sus vecinos ($|Nu \cup Nv|$). Esta relación se denota como: $\frac{|Nu\Delta Nv|}{|Nu \cup Nv|}$

3. Se usó la metodología de agrupamiento unión promedio.
4. A partir de la metodología de unión promedio y las diferentes distancias mínimas se generaron tres dendrogramas probables aplicando la metodología de *ties in proximity* (Leal, W. et al., 2016), que tiene en cuenta las posibles equidistancias presentes en la matriz de distancia y genera todos los dendrogramas posibles para una matriz de distancias.
5. Se aplicó el método estricto consenso usando el programa libre Dendroscope versión 3.4.4, con el objetivo de obtener un solo dendrograma que mantuviera todas aquellas porciones monofiléticas del árbol, es decir, aquellas porciones que tuvieran un nodo en común en todos los árboles productos de *ties*, sin generar nuevos agrupamientos.
6. Se representó de manera gráfica la semejanza de los elementos, con ayuda del programa libre TreeViewX versión 0.5.0.
7. Se realizó el corte más representativo del dendrograma, usando el número de selección, definido en el capítulo anterior.

Finalmente para cada partición se realizó una reducción local, global y contextual, con el fin de analizar las relaciones entre elemento-elemento, clase-clase y elemento-clase, respectivamente. El objetivo fue encontrar patrones en las relaciones mencionadas.

2.2.1 Extracción global

Se redujeron los elementos de cada clase a un solo vértice con el fin de estudiar las interacciones clase-clase.

Por ejemplo, la figura 8, a la izquierda de la flecha, muestra los elementos clasificados en sus familias: alcalinos (amarillo), halógenos (rojo), gases nobles (rosado) e hidrógeno (azul). Cada familia, a la derecha de la flecha, es reducida a un solo vértice que contiene las conexiones con las que al menos uno de sus elementos forma un compuesto binario. Esto muestra para el ejemplo, cómo las familias se relacionan entre sí, con excepción de los gases nobles que tienen preferencia sólo por los halógenos.

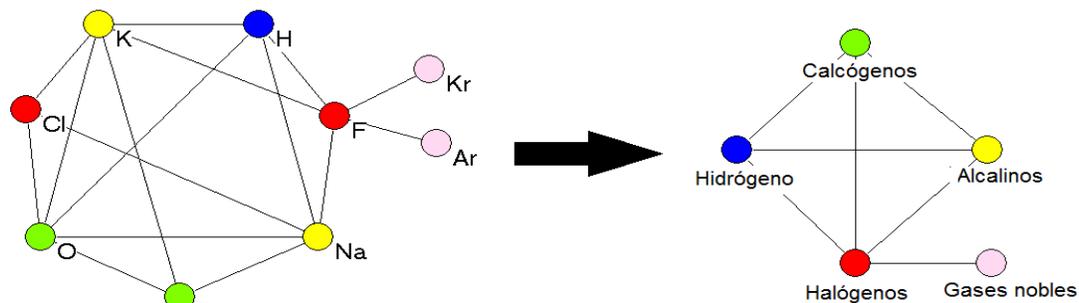


Figura 8. Ejemplo de una extracción global

2.2.2 Extracción local

Se extrajeron por separado subgrafos correspondientes a las clases de cada partición con el fin de analizar las interacciones internas elemento-elemento de cada clase y además realizar un análisis elemento-elemento de clases diferentes.

Como se observa en el ejemplo de la figura 9, se toma una clase específica de elementos; en este caso los halógenos y se estudian sus relaciones internas, observándose que, en el ejemplo, no existen relaciones entre los miembros de esta familia.

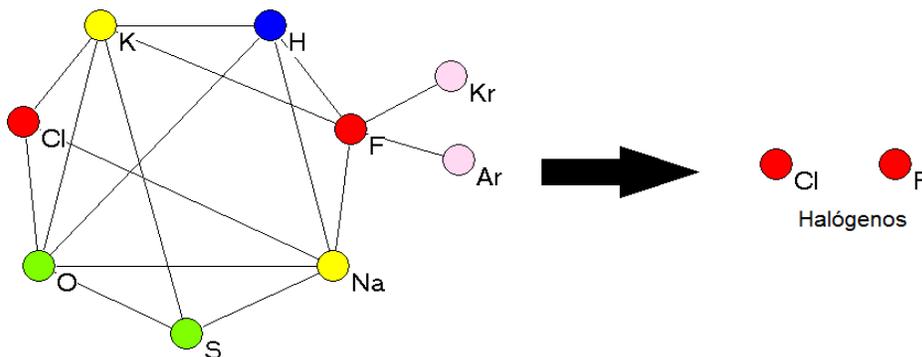


Figura 9. Ejemplo de una extracción local

2.2.3 Extracción contextual

La extracción contextual es una combinación de la extracción local y global; el procedimiento consiste en extraer los elementos de un grupo (extracción global) y relacionarlos con los demás elementos reducidos o con un grupo específico de elementos. El objetivo es estudiar las relaciones clase-elemento que se dan entre estas sustancias.

En la figura 10 se observa una extracción global para todas las familias, con excepción de los alcalinos; esto se hizo con el fin de conocer cuáles elementos tienen las mayores y las menores interacciones de esta familia y caracterizar dichas interacciones.

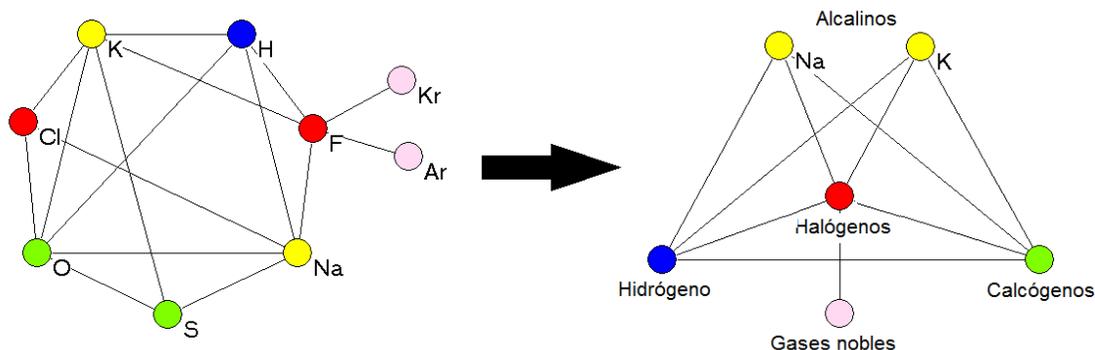


Figura 10. Ejemplo de una extracción contextual

2.3 PROPIEDADES DE LAS REDES

Estudiar los elementos químicos como un conjunto a través de sus interacciones permite conocer y entender aquellas relaciones que emergen, como consecuencia de las relaciones principales. Dichas relaciones fueron encontradas a través de la cohesión, la centralidad y la centralización de las redes.

La cohesión muestra en la red simple la compatibilidad entre elementos diferentes que al unirse forman la diversidad de compuestos binarios; esta diversidad se entiende como la relación entre pares de elementos diferentes. A su vez, la cohesión en la red de proporciones muestra el conjunto de los elementos y sus vecinos comunes que al unirse forman el mayor número de compuestos binarios.

La centralidad muestra los elementos más conectados en la red; en el caso de la red simple expone los elementos que forman un gran número de compuestos binarios con elementos diferentes (los elementos más diversos de la red). Para la red de proporciones, la centralidad permite determinar el conjunto de elementos que a través de sus vecinos, forma el mayor número de compuestos binarios. La centralización de la red simple representa la distribución de las interacciones entre elementos diferentes y en la red de proporciones no aplica por su comportamiento bipartito.

2.3.1 Cohesión y Núcleos

Se estudiaron los subgrupos cohesivos dentro de ambas redes, simple y de proporciones. Estos subgrupos fueron hallados a través de la metodología de k-núcleo. La definición de k-núcleo está basada en la definición de subred maximal, como se muestra a continuación (Nooy, W. et al., 2006):

Definición 10: Una subred maximal es el conjunto más grande de vértices y sus aristas que pertenecen a una red, de tal manera que no existe otro vértice fuera de la subred que cumpla con las características de conexión que la definen.

Definición 11: Un k -núcleo es la subred maximal en la que cada vértice tiene un grado $\geq k$ dentro de la subred, con $k \in \mathbb{N}$.

La metodología del k -núcleo consiste en buscar los k más altos para cada vértice en la red y eliminar los k más bajos, hasta encontrar el conjunto de vértices que contenga el mayor valor de k . Dicha metodología se explica con el siguiente ejemplo (figura 11):

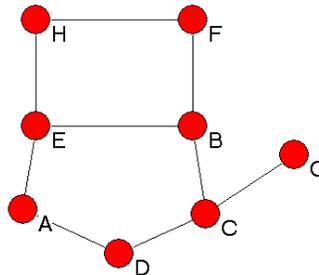


Figura 11: Ejemplo de una red para calcular el conjunto cohesivo con la metodología de k -núcleo

Dada la red de la figura 11, se buscan todos los vértices con $k=1$ (grado ≥ 1) y se genera una subred con los vértices de grado > 1 (usando los vértices A hasta H y eliminando a G del ejemplo). Sobre la subred resultante, se buscan los vértices con $k=2$ y se genera una nueva subred con los vértices de grado > 2 (usando los vértices E y B). Para un $k=3$, la nueva subred en el ejemplo no cumple con esta condición (B y E ahora tienen grado=1), así que la metodología de k -núcleo encuentra su mayor k en 2. Este conjunto de vértices es llamado el subgrupo cohesivo de la red (figura 12).

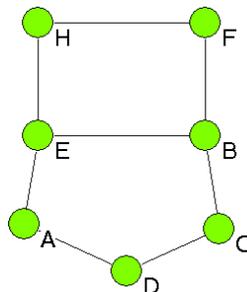


Figura 12: Subgrupo cohesivo ($k=2$)

Este subgrupo cohesivo es la parte más densa y representa para la red simple los elementos que interactúan con el fin de formar el mayor número de compuestos binarios diversos; para la red de proporciones, muestra el conjunto de los elementos y sus vecinos comunes que al unirse forman el mayor número de compuestos binarios.

2.3.2 Centralidad y centralización de grado

Dentro de las redes simple y de proporciones existen vértices que se consideran el centro de la red. Los vértices centrales de la red simple representan aquellos elementos que forman una gran cantidad de compuestos con elementos diferentes, calculados a partir del grado de cada elemento; en tanto que los vértices centrales de la red de proporciones representan aquellos elementos que forman compuestos binarios con una gran variedad de estequiometrías, calculándolos a partir del grado de cada elemento del conjunto X de la definición 7. Así los elementos más centrales tendrán mayor grado.

En esta parte del trabajo se estudió la centralización de la red simple, a partir del grado de centralización. Dicho grado se define como la variación en el grado de los vértices de la red respecto al máximo grado posible (dado el número de vértices de cada red), según la ecuación 2. Debido al comportamiento bipartito de la red de proporciones no se pudo calcular su centralización de grado.

$$CG = \frac{\sum_{i=1}^{|V|} (gmax - g(i))}{(|V| - 1)(|V| - 2)}$$

Donde:

CG = centralización de grado

$gmax$ = máximo grado de un vértice en la red

$g(i)$ = grado del vértice i

$|V|$ = número de vértices

Ecuación 2

Para ilustrar la ecuación 2, se muestra el siguiente ejemplo:

En la figura 13 se muestran dos tipos de redes; el grado de centralización para a) es 1, que representa el valor máximo y expresa que existe un vértice central conectado al resto de la red. El grado de centralización para b) es 0 y representa el mínimo valor, que muestra el comportamiento de una red igualmente conectada donde no existen vértices centrales.

En el presente trabajo la centralización de grado permite conocer si 1) la red tiene unos pocos elementos fundamentales para formar la mayor cantidad de compuestos binarios (red centralizada); 2) si muestra un conjunto grande de elementos base para esta formación (red descentralizada); o 3) si no existen elementos centrales y todos forman en promedio el mismo número de compuestos binarios (red distribuida).

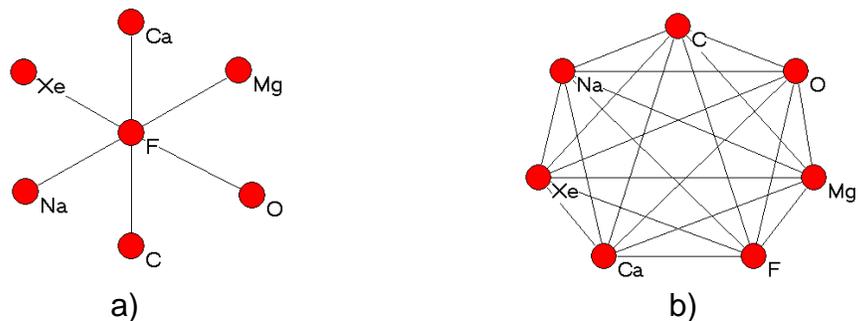


Figura 13. Ejemplo del grado de centralización para dos tipos de redes a) y b)

2.4 ARQUITECTURA Y CARACTERÍSTICAS TOPOLÓGICAS DE LAS REDES

La distribución de grado es la distribución de probabilidad relativa de las conexiones de los elementos en la red. Dicha distribución fue caracterizada a través de la estadística descriptiva, usando los 97 elementos químicos distinguidos por dos clases de variables. La primera variable obtenida de la red simple, muestra el número de elementos (grado) con los que el elemento de estudio forma al menos un compuesto binario y la segunda obtenida de la red de proporciones, muestra cuántos compuestos binarios (grado) forma el elemento en estudio. De esta manera, se realizaron dos gráficos de barras verticales, uno para cada variable, mostrando cada elemento químico y su respectivo grado ordenados de menor a mayor. Las variables fueron analizadas a través de las medidas de tendencia central (media, mediana, moda), las medidas de forma (curtosis y asimetría), la desviación estándar como medida de dispersión y un histograma. La normalidad de los datos se evaluó usando la prueba no paramétrica de Kolmogorov-Smirnov; esta prueba que no supone una forma específica de la distribución de donde provienen los datos de las propiedades en estudio se denomina no paramétrica o de distribución libre. La aplicación de esta prueba se desarrolla siguiendo las siguientes fases del ritual de la significancia estadística (Quintero, N., 2012):

- Planteamiento de las hipótesis a contrastar. Es importante definir las hipótesis estadísticas que se van a contrastar para evaluación de la normalidad; estas hipótesis son de dos tipos, la hipótesis nula o hipótesis de trabajo, H_0 y la hipótesis alterna o hipótesis del investigador, H_1 ; dicho sistema de hipótesis es el siguiente:

H_0 (Hipótesis nula): el grado de los elementos químicos en la red de proporciones sigue una distribución normal.

H_1 (Hipótesis alterna): el grado de los elementos químicos en la red de proporciones no sigue una distribución normal.

- Establecimiento del nivel de significancia. Según Fisher, el nivel de significancia estadística equivale a la magnitud del error que el investigador está dispuesto a asumir si se rechaza una hipótesis nula verdadera; se denota con la letra griega alfa y para este estudio fue establecido en el 5% ($\alpha = 0,05$) para la prueba no paramétrica. Este nivel de significancia se considera significativo para todo p -valor que se encuentre debajo de este nivel.
- Comportamiento normal, se escoge la prueba Kolmogorov-Smirnov (K-S), y se aplica con el programa SPSS. En esta prueba el grado de la red de proporciones se contrasta con una distribución normal; se obtiene la significancia asintótica, es decir el p -valor para cada una de las propiedades en estudio.
- Lectura del p -valor y toma de la decisión. El estadístico de prueba, K-S permite calcular el error establecido como límite en el nivel de significancia. Para saber si no se ha excedido este límite, se procede a calcular el p -valor y su magnitud debe estar por debajo del límite planteado preliminarmente ($\alpha = 0,05$). El p -valor en este caso, ayuda a tomar la decisión de rechazo de la hipótesis nula, H_0 , cuando es menor al nivel de significancia y de no rechazo, si su valor es mayor al nivel de significancia $\alpha = 0,05$. Entonces, para la pruebas no paramétrica utilizada, K-S se establece que:

* Si p -valor es menor que el nivel de significancia se rechaza H_0 .

* Si p -valor es mayor que el nivel de significancia se acepta H_0 .

De esta manera los datos que presentaron un comportamiento normal fueron divididos en tres intervalos aplicando la regla empírica 3-sigma (Stephens, L., 1998) con el fin de caracterizar su distribución y los datos con una distribución anormal fueron comparados con los demás modelos topológicos conocidos (redes libres de escala y de mundo pequeño) usados como un patrón de referencia para explicar su comportamiento.

Algunas tendencias conocidas entre los elementos, que permitieron explicar algunas relaciones en esta investigación fueron⁹:

- Principio de singularidad (efecto del segundo periodo): Los elementos del segundo periodo son químicamente diferentes a los elementos de sus respectivas familias. Esto es debido posiblemente a su tamaño extremadamente pequeño, su capacidad para formar enlaces y la carencia de orbitales *d* energéticamente accesibles.
- Efecto del par inerte: Los elementos que siguen la serie de transición, pertenecientes al sexto periodo, son menos reactivos ya que presentan estados de oxidación dos veces menores que el mayor de sus grupos.

3.1.2.1 Clasificación de la tabla periódica

Se particionó la red simple de acuerdo a la tabla 5, que muestra las familias de la tabla periódica distinguidas por números de acuerdo con la IUPAC y al H como una familia adicional. Sobre esta clasificación se realizó una extracción global, generando la red de la figura 15a. Dicha red muestra las relaciones entre las familias (vértices), donde cada línea indica que por lo menos existe un compuesto binario formado por miembros de las dos familias conectadas. Esta partición muestra que en la mayoría de los casos existen altas relaciones entre las familias, con grados por encima de 18 (figura 15b). Se resalta que hay 21 familias, ergo 20 es el máximo grado posible.

En general, no se nota una preferencia de una familia por otra, sino más bien una tendencia a relacionarse homogéneamente con otras familias. Sin embargo, un caso particular es el de los gases nobles (18), que sólo se relacionan con cinco familias: alcalinos (1), carbonóideos (14), nitrogenoideos (15), calcógenos (16) y halógenos (17). Es decir, los gases nobles muestran preferencias de combinación por los elementos no metálicos.

Tabla 5. Clasificación de los elementos químicos de acuerdo con la IUPAC

FAMILIA	1	2	3		4	5	6	7	8	9	10		11	
			1	2							1	2		
ELEMENTOS	Li	Be	Sc	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu		
	Na	Mg	Y	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Rh				Pd	
	K	Ca	Lu	La	Hf	Ta	W	Re	Ir				Pt	Ag
	Rb	Sr		Ac										Au
	Cs	Ba												
	Ra													
FAMILIA	12	13	14		15	16	17	18	19	20		21		
ELEMENTOS	Zn	B	C		N	O	F	He	H	1	2	1	2	
			Si	P										S
	Cd	Al	Ge	As	Se	Br	Ar			Ce <td>Pr</td> <td>Th <td>Pa</td> </td>	Pr	Th <td>Pa</td>	Pa	
	Hg	Ga	Sn	Sb	Te	I	Kr			Pr	Nd	Pa	U	
		In	Pb	Bi	Po	At	Xe			Nd	Pm	U	Np	
		Tl								Pm	Sm		Pu	

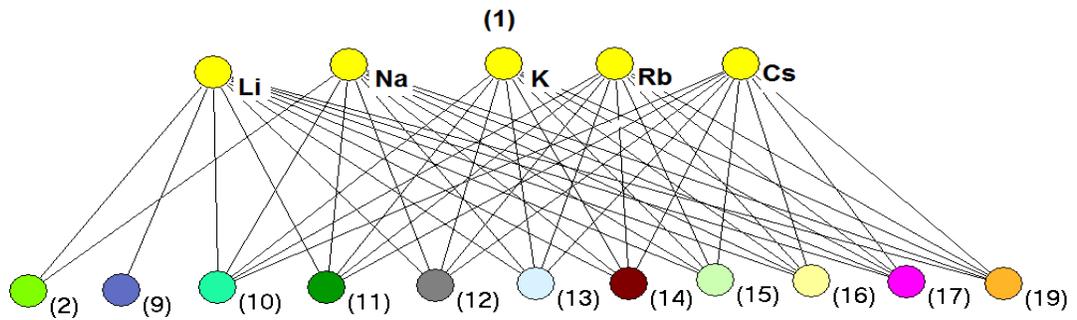


Figura 16. Relaciones entre las familias de los alcalinos y otras familias

Los **alcalinotérreos** (figura 17) se relacionan con la familia de los calcógenos (16) y halógenos (17), sin embargo, todos los elementos de esta familia exceptuando el Ra muestran interacciones con la familia de los alcalinos (1), la familia del cobalto (9) hasta la familia del cobre (11), la familia de los térreos (13) hasta la familia de los halógenos (17) y la familia del hidrógeno (19). El Ra muestra interacciones solo con dos familias (16 y 17) debido a su inestabilidad y naturaleza radiactiva. El Be es el elemento que presenta más interacciones en esta familia, incluyendo la familia del escandio (3) hasta la familia del hierro (8), debido al efecto del segundo periodo.

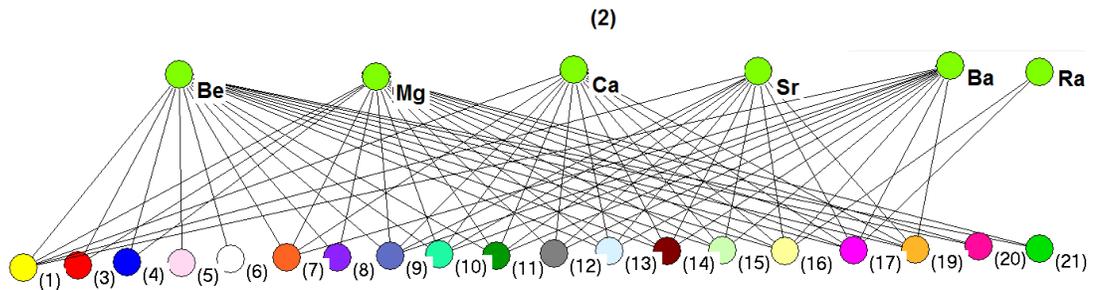


Figura 17. Relaciones entre la familia de los alcalinotérreos y otras familias

En la **familia del escandio** no existe un consenso sobre cuáles son sus miembros, por esta razón se estudiaron las dos clasificaciones (tabla 5) aceptadas por la IUPAC (figura 18). Debido a que no se cuenta con información para el Lr, no es posible decidir si lo más acertado es que el Lr o el Ac pertenezcan a la familia 3, pero sí podemos analizar la situación para el La y el Lu, donde se observa que ambos se relacionan con las familia de los alcalinotérreos (2) hasta la familia de los actínidos (21), excepto la familia de los gases nobles (18), lo cual no establece realmente una diferencia entre ellos.

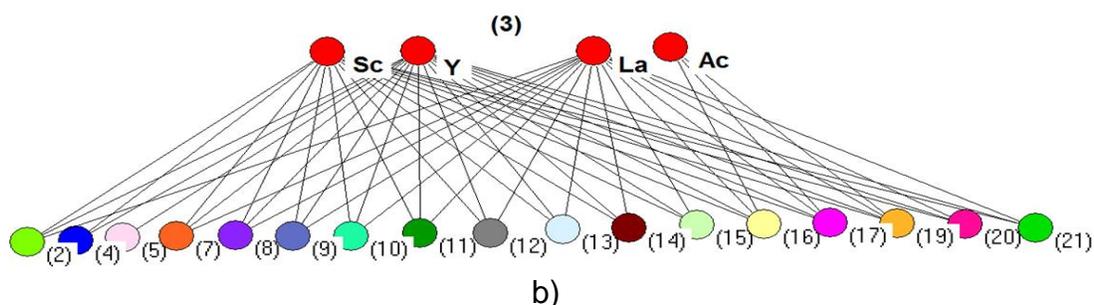
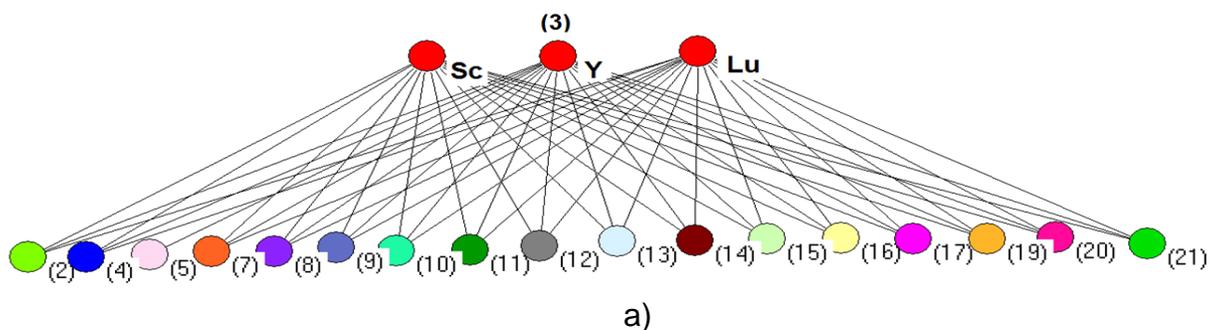


Figura 18. Relaciones entre la familia del escandio según la IUPAC a) 1 y b) 2, con otras familias

La **familia del titanio** (figura 19) se relaciona con por lo menos un elemento de la familia de los alcalinotérreos (2) hasta la familia de los actínidos (21) con excepción de la familia del escandio (3), los gases nobles (18) y los lantánidos (20). El Zr y Hf se relacionan con dos familias más (3 y 20) mostrando menores relaciones para el Ti en esta familia.

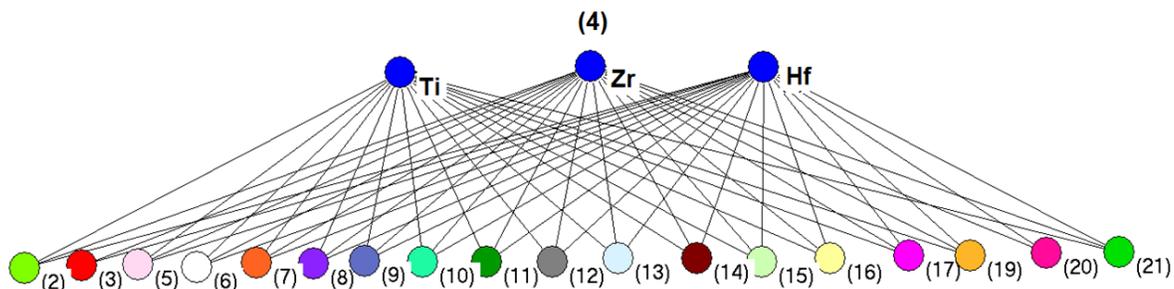


Figura 19. Relaciones entre las familias del titanio y otras familias

La **familia del vanadio** (figura 20) se relaciona con por lo menos un elemento de la familia de los alcalinotérreos (2) hasta la familia del hidrógeno (19), con excepción de las familias del escandio (3) y los gases nobles (18). El Nb tiende a relacionarse con tres familias más (3, 20, 21).

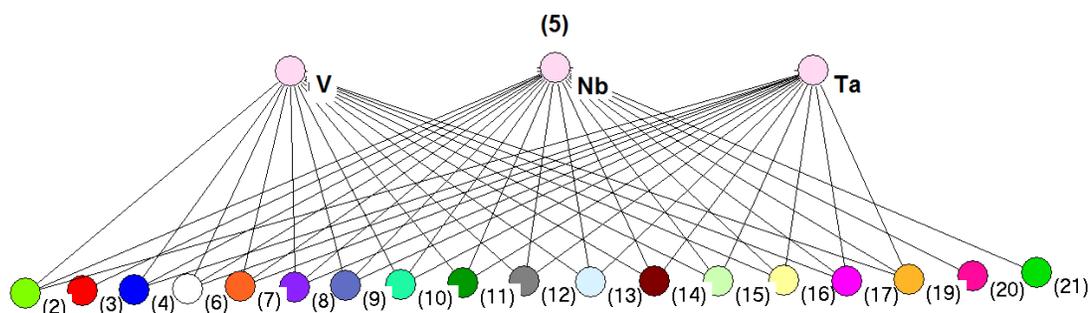


Figura 20. Relaciones entre las familias del vanadio y otras familias

La **familia del cromo** (figura 21) se relaciona con por lo menos un elemento de la familia de los alcalinotérreos (2) hasta la familia del hidrógeno (19), con excepción de las familias del zinc (12) y de los gases nobles (18). El Cr y el Mo se relacionan además con dos familias (12 y 21).

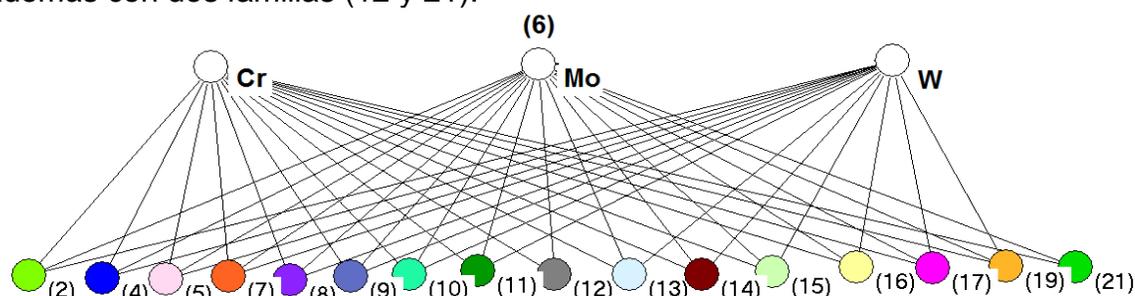


Figura 21. Relaciones entre las familias del cromo y otras familias

La **familia del manganeso** (figura 22) se relaciona con por lo menos un elemento de la familia de los alcalinotérreos (2) hasta la familia de los actínidos (21), con excepción de la familia del cobre (11), zinc (12) y los gases nobles (18). Se observa que desde el Mn hasta el Re las interacciones disminuyen a medida que aumenta el periodo.

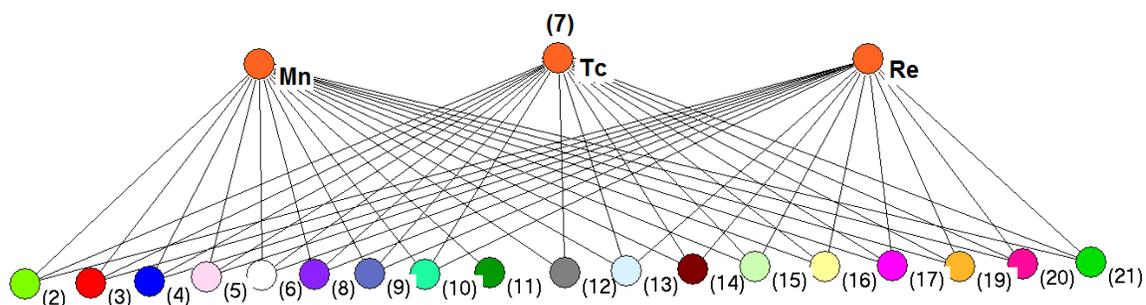


Figura 22. Relaciones entre las familias del manganeso y otras familias

La **familia del hierro** (figura 23) se relaciona con por lo menos un elemento de la familia de los alcalinotérreos (2) hasta la familia de los actínidos (21), con excepción de las familias del cobre (11), zinc (12), gases nobles (18) e hidrógeno (19). Se

observa una disminución de las interacciones de sus elementos a medida que aumenta el periodo, donde el Fe se relaciona además con tres familias (11, 12, 19) y el Ru con dos familias (11,12).

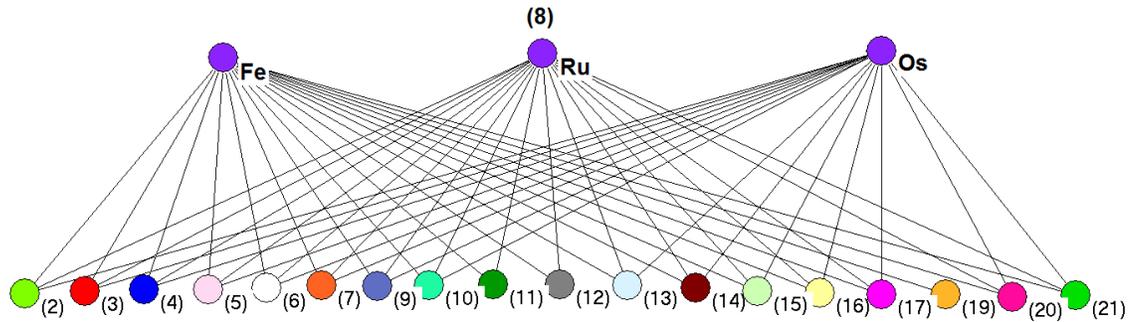


Figura 23. Relaciones entre las familias del hierro y otras familias

La **familia del cobalto** (figura 24) se relaciona con por lo menos un elemento de la familia de los alcalinotérreos (2) hasta la familia de los actínidos (21) con excepción de las familias de los gases nobles (18) y el hidrógeno (19). El Co interactúa con una familia (19), el Rh con dos familias (1, 19) y el Ir con una familia (1), además de las que tienen en común.

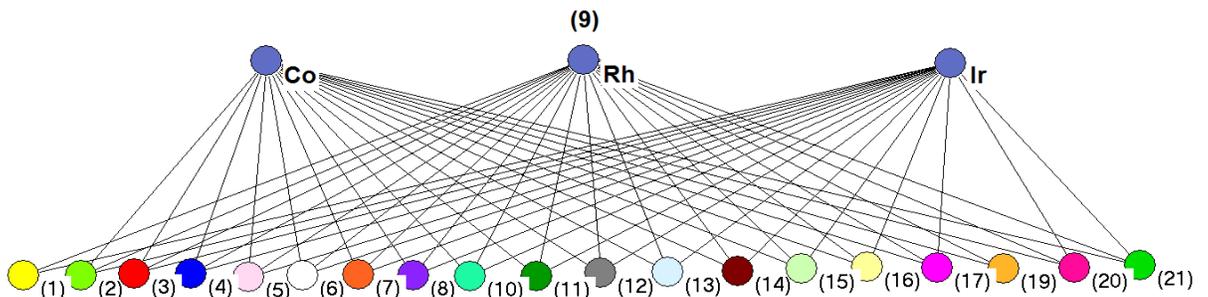


Figura 24. Relaciones entre las familias del cobalto y otras familias

La **familia del níquel** (figura 25) se relaciona con por lo menos un elemento de las familias de los alcalinos (1) hasta los actínidos (21) con excepción de la familia de los gases nobles (18) y el hidrógeno (19). El Ni y Pd se relacionan además con una familia (19) a diferencia del Pt.

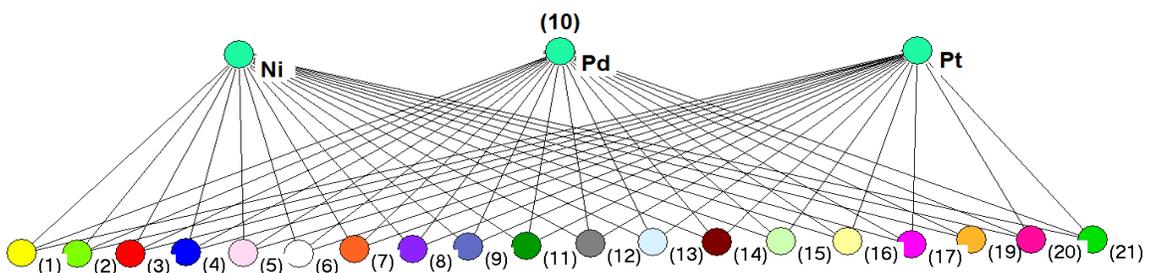


Figura 25. Relaciones entre las familias del níquel y otras familias

La **familia del cobre** (figura 26) se relaciona con por lo menos un elemento de las familias de los alcalinotérreos (2) hasta los actínidos (21) con excepción de las familias del vanadio (5), del cromo (6), de los gases nobles (18) y del hidrógeno (19). El Cu y Au tienden a ser mucho más reactivos que la Ag ya que ambos se relacionan con dos familias (5 y 6).

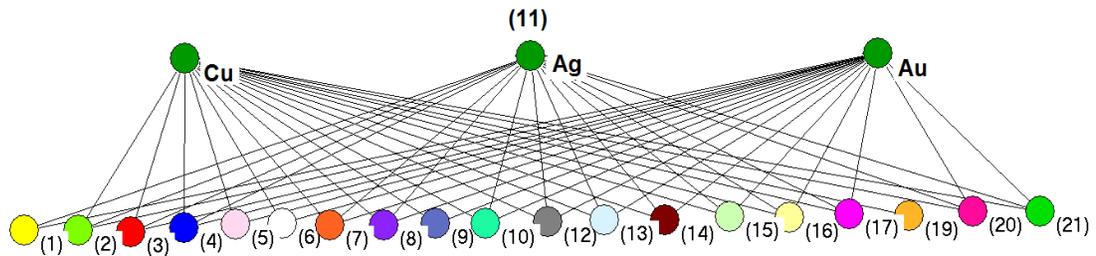


Figura 26. Relaciones entre la familia del cobre y otras familias

La **familia del zinc** (figura 27) se relaciona con por lo menos un elemento de las familias de los alcalinos (1) hasta los actínidos (21) con excepción de las familias del vanadio (5), cromo (6), hierro (8) y gases nobles (18). El Zn presenta interacciones adicionales con tres familias (5, 6, 8).

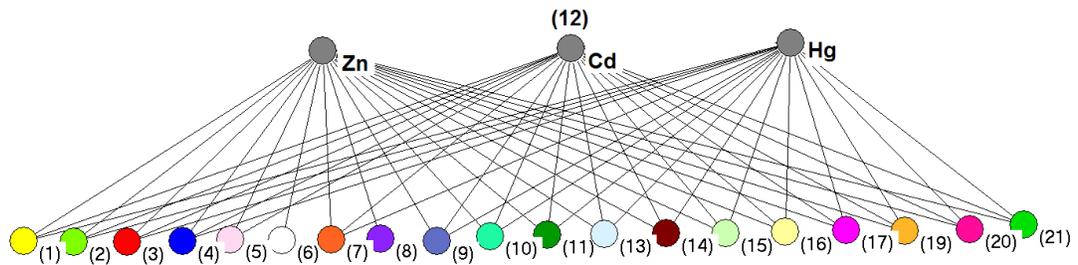


Figura 27. Relaciones entre la familia del zinc y otras familias

Los **térreos** (figura 28) se relacionan con por lo menos un elemento de las familias de los alcalinos (1) hasta los actínidos (21) con excepción de las familias del cromo (6) hasta la familia del cobalto (9), gases nobles (18) e hidrógeno (19). El B, Al y Ga interactúan con todas las familias de la tabla periódica a excepción de los gases nobles (18). A medida que los periodos aumentan las interacciones disminuyen para el In que no se relaciona con dos familias (18, 19) y el Tl que no se relaciona con seis familias (6, 7, 8, 9, 18, 19).

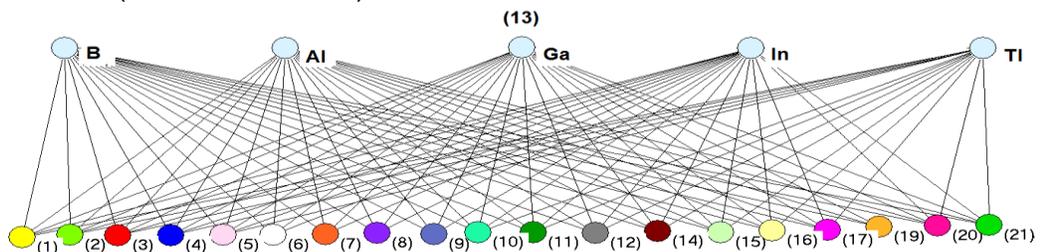


Figura 28. Relaciones entre la familia de los térreos y otras familias

Los **carbonoideos** (figura 29) se relacionan con por lo menos un elemento de las familias de los alcalinos (1) hasta los actínidos (21) con excepción de las familias del cromo (6), manganeso (7), cobre (11), zinc (12) y gases nobles (18). El Si interactúa con todas las familias a excepción de los gases nobles (18) y el Pb es el elemento que presenta menos interacciones en esta familia. El C a diferencia de los demás miembros de su familia se relaciona con la familia de los gases nobles.

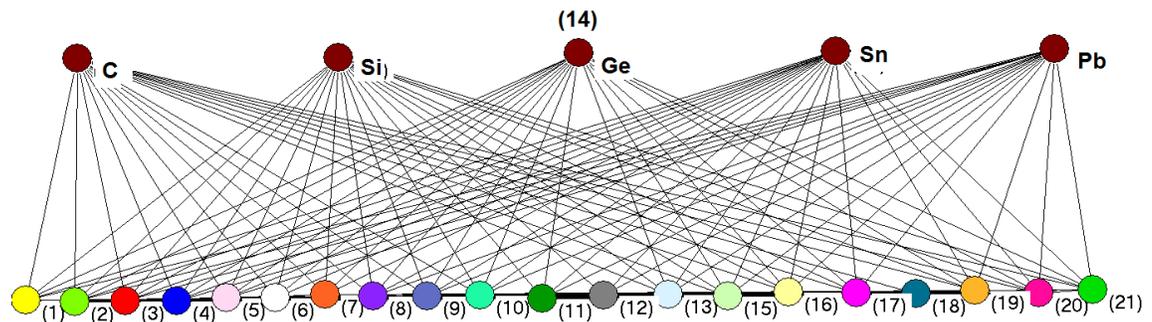


Figura 29. Relaciones entre la familia de los carbonoideos y otras familias

Los **nitrogenoideos** (figura 30) se relacionan con por lo menos un elemento de las familias de los alcalinos (1) hasta los actínidos (21) con excepción de las familias del cromo (6), hierro (8), zinc (12) y gases nobles (18). El N se relaciona con todas las familias, el P, As, Sb se relaciona con todas las familias a excepción de los gases nobles (18) y el Bi presenta muy pocas relaciones comparado con los demás miembros de su familia.

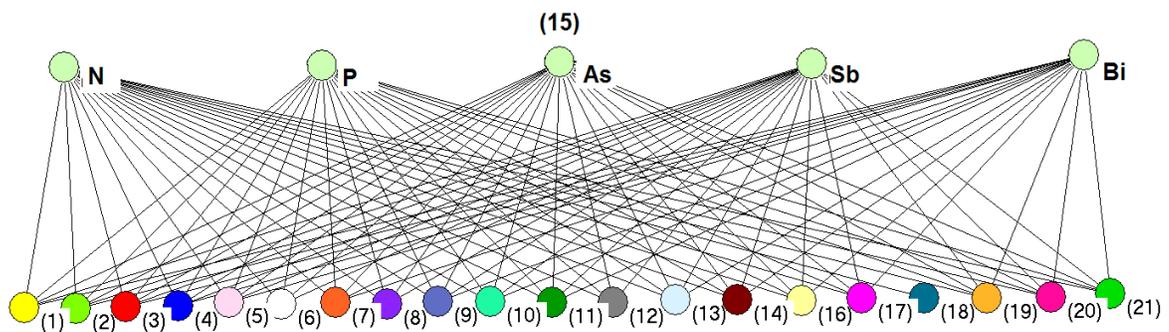


Figura 30. Relaciones entre la familia de los nitrogenoideos y otras familias

Los **calcógenos** (figura 31) se relacionan con por lo menos un elemento de las familias de los alcalinos (1) hasta los actínidos (21) con excepción de las familias del vanadio (5) hasta el cobalto (9), cobre (11), térreos (13), nitrogenoideos (15), gases nobles (18) y actínidos (21). El O se relaciona con todas las familias, el S, Se, Te se relaciona con todas las familias a excepción de los gases nobles (18) y el Po presenta muy pocas relaciones comparado con los miembros de su familia.

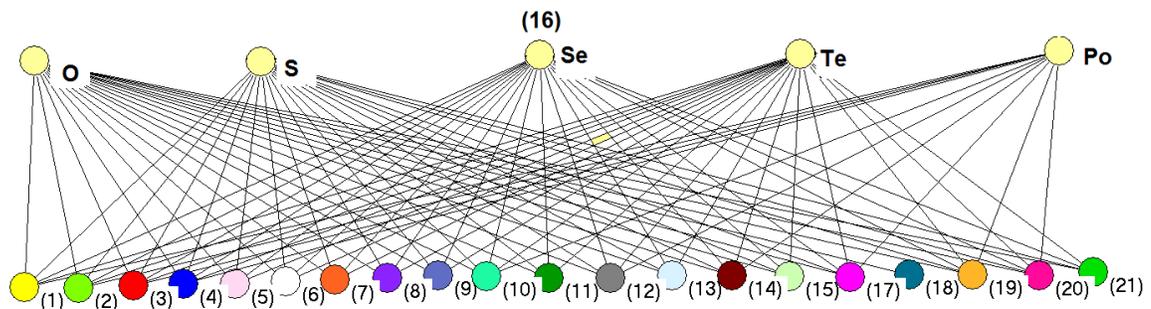


Figura 31. Relaciones entre la familia de los calcógenos y otras familias

Los **halógenos** (figura 32) se relacionan con la familia del hidrógeno. El F se relaciona con todas las familias, el Cl, Br, I se relaciona con todas las familias a excepción de los gases nobles (18) y el At con un comportamiento contrario al de los halógenos se relaciona solo con la familia del hidrógeno.

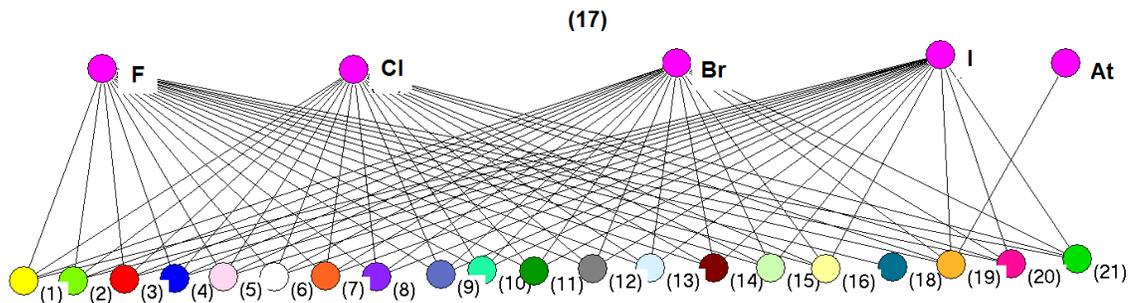


Figura 32. Relaciones entre la familia de los halógenos y otras familias

Se observa que los últimos elementos de las familias de los térreos (figura 28), carbonóideos (figura 29), nitrogenóideos (figura 30), calcógenos (figura 31) y halógenos (figura 32), es decir, el Tl, Pb, Bi, Po, At disminuyen respectivamente sus interacciones, comparado con los miembros de sus familias y se hacen más pequeñas cuando nos movemos de izquierda a derecha de la tabla periódica sobre estos elementos. Estos comportamientos muestran el efecto del par inerte, debido al aumento de la carga nuclear efectiva y la energía de ionización de estos elementos.

Los **gases nobles** (figura 33) no muestran relaciones en común que los caractericen. Se observan tres tipos de elementos en esta familia: el He que se relaciona con la familia de los nitrogenóideos (15), el Ar, Kr, Xe se relacionan con los carbonóideos (14) y el Ne que no se relacionan con ninguna familia diferente a su misma familia (ver análisis: elementos de cada familia).

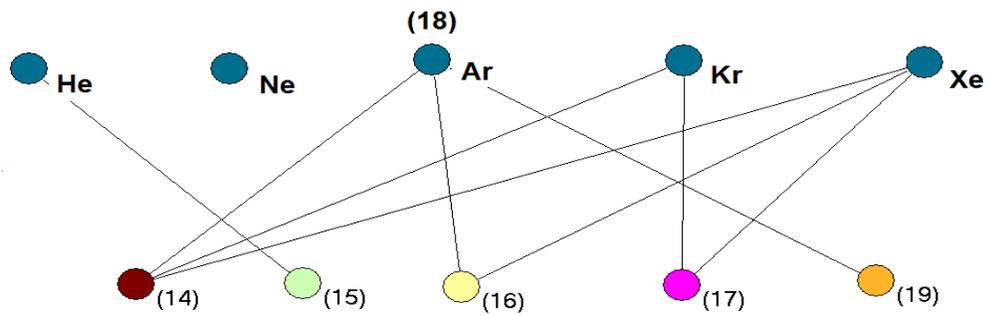


Figura 33. Relaciones entre la familia de los gases nobles y otras familias

La **familia del hidrógeno** (figura 34) solo incluye al elemento H que se relaciona al menos con un elemento de todas las familias de la tabla periódica.

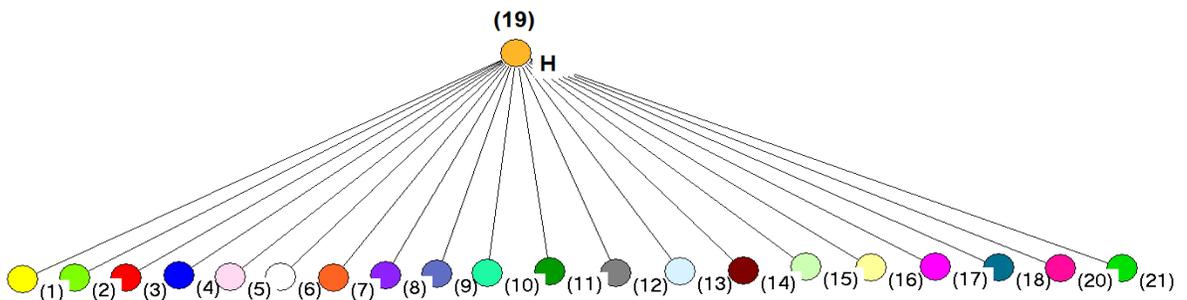


Figura 34. Relaciones entre la familia del hidrógeno y otras familias

Los **lantánidos** (figura 35) se relacionan con por lo menos un elemento de las familias de los térreos (13) y los calcógenos (16). El Pm muestra muy bajas relaciones comparado con los otros elementos ya que solo se relaciona con dos familias (13, 16). No se observa diferencia en las dos clasificaciones establecidas por la IUPAC.

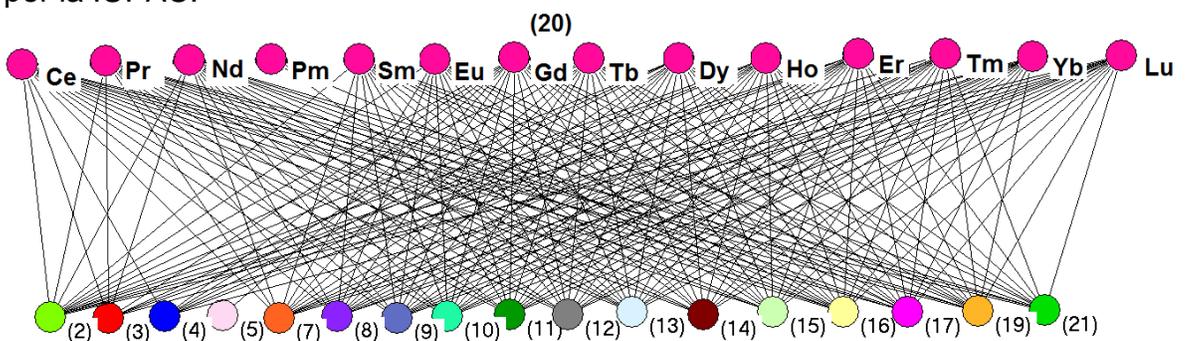


Figura 35. Relaciones entre la familia de los lantánidos y otras familias

Los **actínidos clasificación 1** (figura 36) se relacionan con por lo menos un elemento de las familias de los calcógenos (16) y halógenos (17). Se observan dos tipos de elementos, los que presentan altas conexiones como: Th, Pa, U, Np, Pu, Am y los que presentan bajas conexiones: Ac, Cm, Bk, Cf, Es.

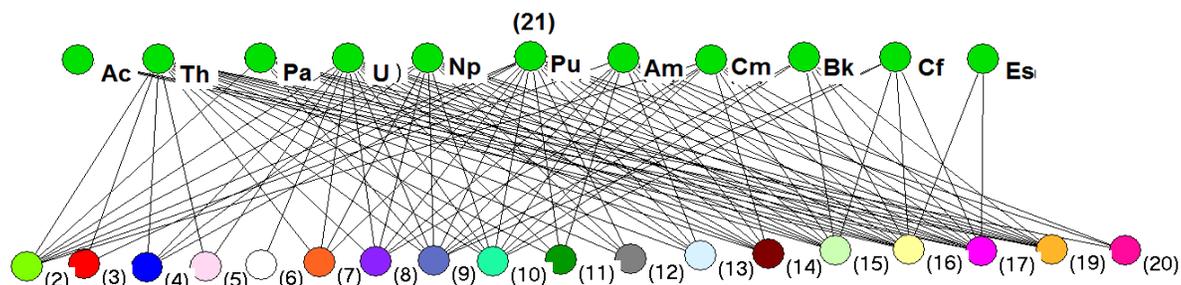


Figura 36. Relaciones entre la clasificación 1 de la familia de los actínidos y otras familias

Los **actínidos clasificación 2** (figura 37) se relacionan con por lo menos un elemento de las familias de los nitrogenoideos (15), calcógenos (16) y halógenos (17). Se observa una disminución en las interacciones de los elementos de esta familia de izquierda a derecha como se muestra en la figura y en la posición en la que se encuentran en la tabla periódica.

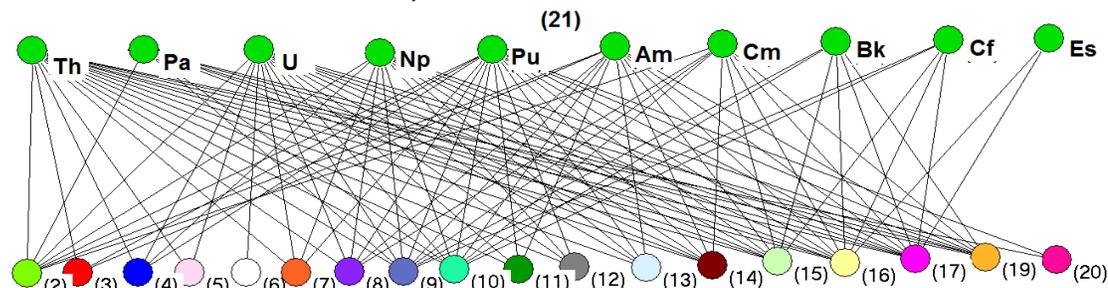


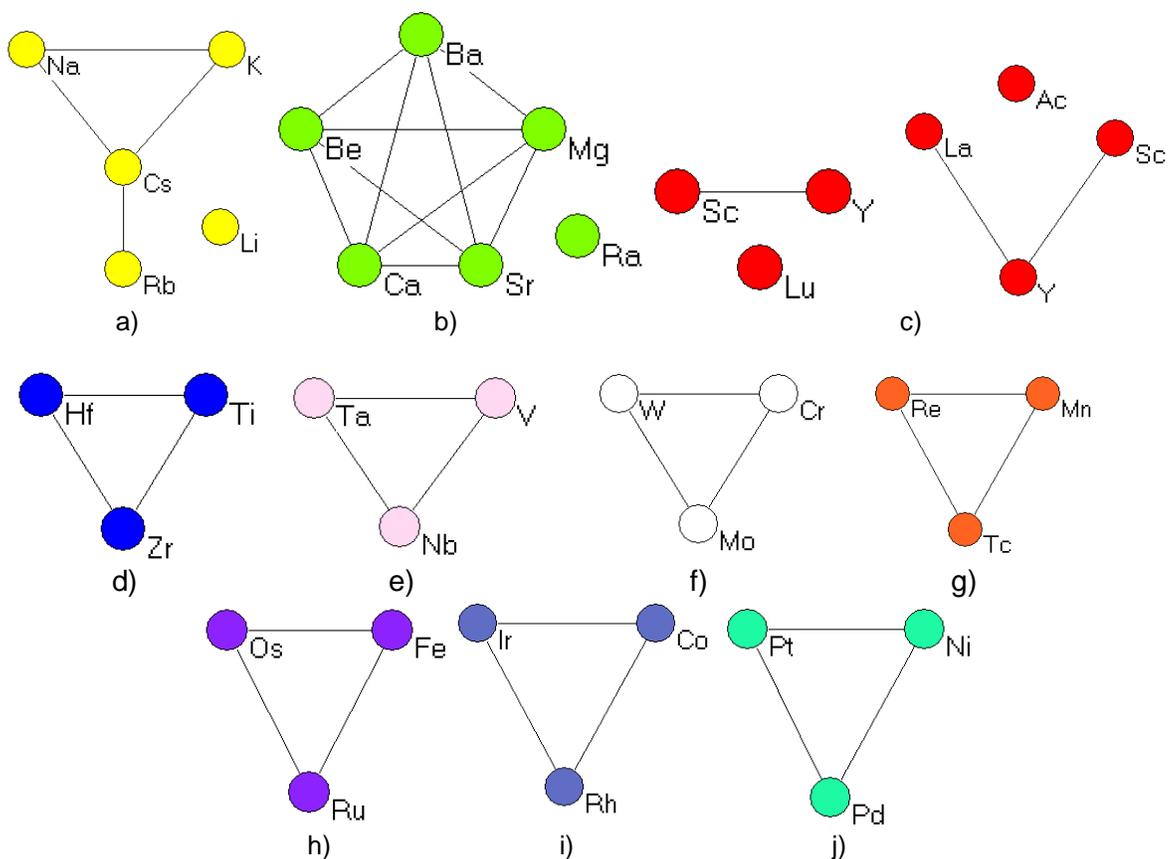
Figura 37. Relaciones entre la clasificación 2 de la familia de los actínidos y otras familias

3.1.2.1.2 Análisis elemento-elemento de cada familia

Se tomaron los elementos de cada familia (tabla 5) con el fin de analizar sólo los vínculos intrafamiliares, como se observa en la figura 38. Las familias muestran que siempre hay interacciones intrafamiliares, es decir, para ninguna familia se observa un grafo desconexo, ni siquiera para la familia de los gases nobles. En algunos casos se observan relaciones entre todos los miembros de la familia, lo que lleva a grafos completos, como las familia del titanio (figura 38d) hasta la familia del zinc (figura 38l), llamados en conjunto metales de transición. Los alcalinos con excepción del Li (figura 38a) se conectan al Cs quien gobierna las relaciones de su familia, posiblemente debido a su baja energía de ionización que le permite donar electrones más fácilmente. Los alcalinotérreos (figura 38b) muestran un grafo completo con excepción del Ra que no presenta conexiones intrafamiliares y del cual como se mencionó antes presenta inestabilidad química. Para las dos clasificaciones de la familia del escandio (figura 38c) se muestran interacciones entre los elementos Sc e Y; también se observa una diferencia intrafamiliar entre las dos clasificaciones de la IUPAC, ya que Lu no se relaciona con el Sc y el Y, como lo hace el La con el Y. Los lantánidos (figura 38r) presentan

relaciones intrafamiliares (con excepción del Pm), donde todos sus elementos están conectados al Ce. Los actínidos (figura 38s) presentan bajas interacciones comparadas con los lantánidos y aproximadamente la mitad de sus elementos están desconectados. Cabe resaltar que para los lantánidos y actínidos no se muestra la clasificación 2, porque no hay cambio significativo en los resultados.

En los térreos (figura 38m) se presentan interacciones completas entre el B, Al y Ga e interacciones entre el Ga e In, e In y Tl. Los carbonoideos (figura 38n) muestran un grafo completo con excepción del C que sólo se conecta al Si y al Sn. Los nitrogenoideos (figura 38ñ) están conectados por el N, que se relaciona con todos los elementos de su familia. Los calcógenos (figura 38o) presentan un grafo completo con excepción del Po que solo se conecta al O. Los halógenos (figura 38p) muestran un grafo completo con excepción del At que no muestra relaciones intrafamiliares. Los gases nobles muestran dos grupos en sus relaciones intrafamiliares: las interacciones entre Ar, Kr, Xe y entre Ne y He.



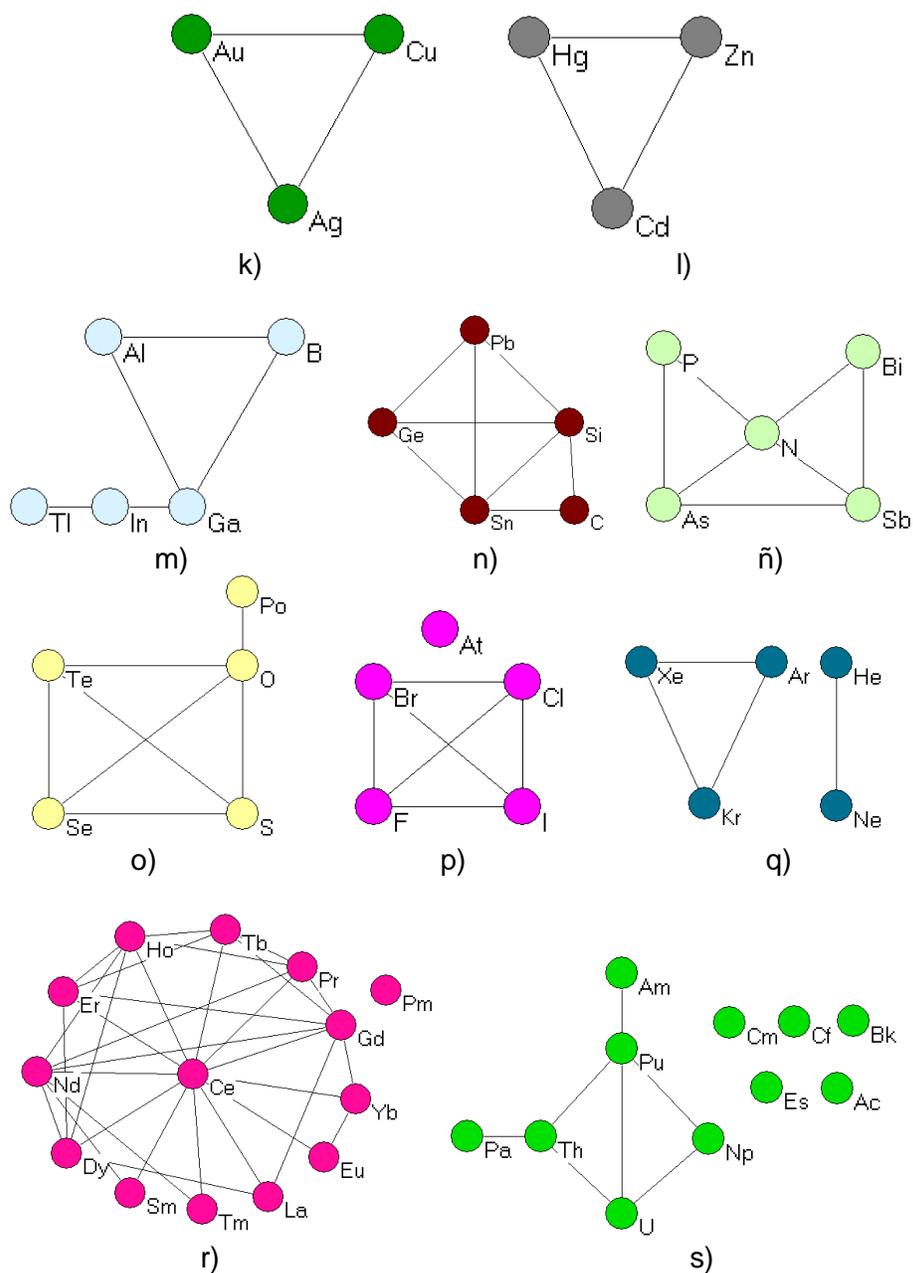


Figura 38. Relaciones intrafamiliares

3.1.2.2 Clasificación a partir del análisis de agrupamientos jerárquico

Se clasificaron los 97 elementos químicos a través sus vecindades (definición 6), aplicando la diferencia simétrica como función de distancia y la unión promedio como metodología de agrupamiento. Debido a las diferentes distancias mínimas que se formaron a medida que se iban agrupando los elementos químicos, se generaron tres dendrogramas productos de *tíes* de la metodología de Leal, W. et

al., 2016. Sobre estos dendrogramas se aplicó el método estricto consenso con el programa libre Dendroscope versión 3.4.4, para obtener un solo dendrograma que mantuviera todas aquellas porciones monofiléticas del árbol, es decir, aquellas porciones que tuvieran un nodo en común con todos los árboles productos de *ties*, sin generar nuevos agrupamientos. Finalmente se representó gráficamente la semejanza de los elementos con ayuda del programa libre TreeViewX versión 0.5.0, obteniendo el dendrograma de la figura 39.

Usando la metodología de Restrepo, G. et al., 2004, se aplicó sobre el dendrograma el número de selección que se muestra en la ecuación 1. El valor de n que maximiza el número de selección (S) es $n = 5$ es decir, se obtiene un número máximo de 35 agrupamientos y su población que se muestran en la tabla 6.

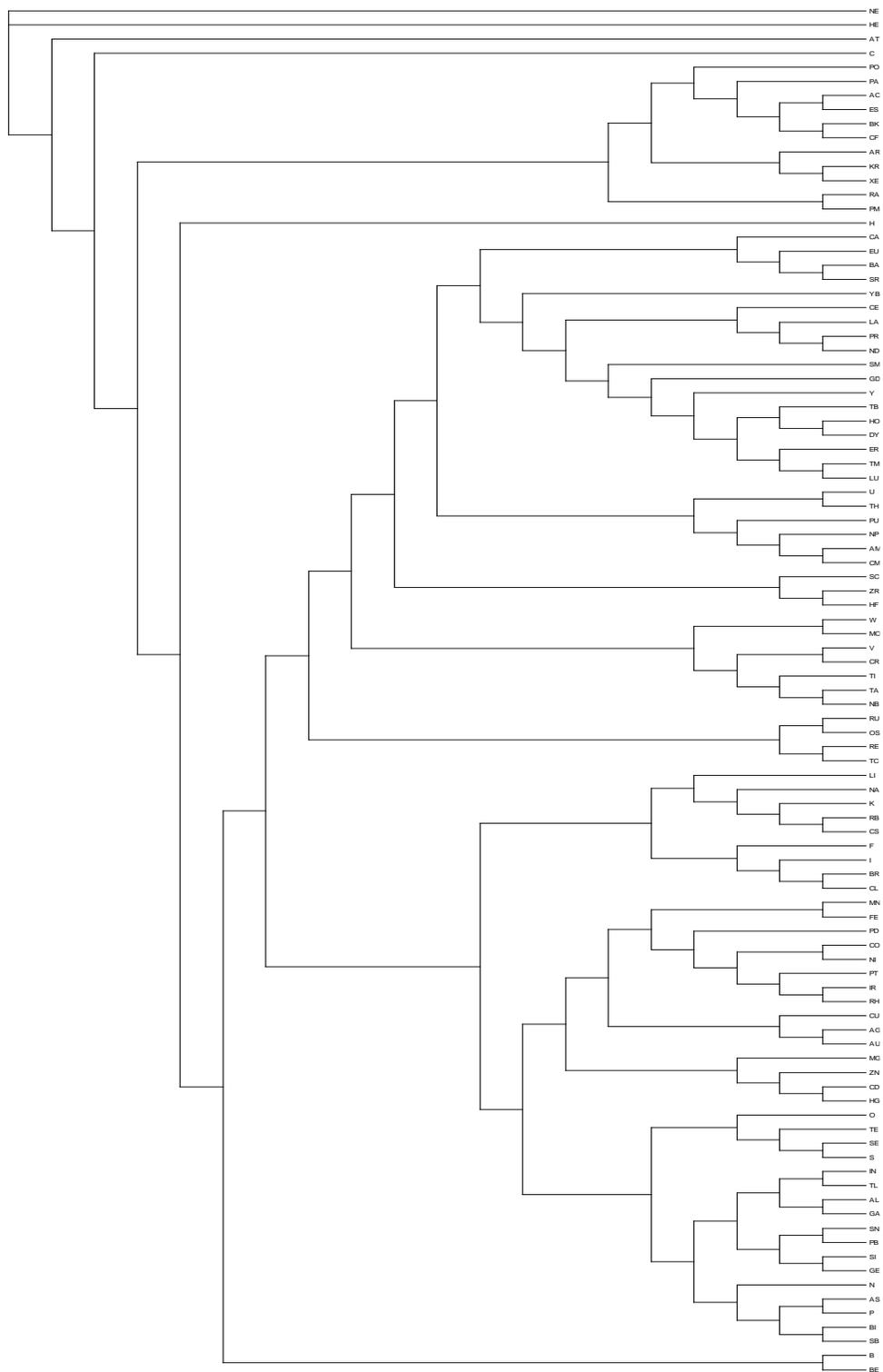


Figura 39. Dendrograma de los elementos químicos usando la diferencia simétrica como métrica, la unión promedio como metodología de agrupamiento, *ties in proximity* y el método estricto consenso

Tabla 6. Agrupamientos de los elementos químicos para $n = 5$

GRUPO	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
ELEMENTOS	Ne	He	At	C	Po	Pa Ac Es Bk Cf	Ar Kr Xe	Ra, Pm	H	Ca Eu Ba Sr
GRUPO	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
ELEMENTOS	Yb	Ce La Pr Nd	Sm	Gd	Y	Tb Ho Dy	Er Tm Lu	U Th	Pu Np Am Cm	Sc Zr Hf
GRUPO	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
ELEMENTOS	W Mo	V Cr Ti Ta Nb	Ru Os Re Tc	Li Na K Rb Cs	F I Br Cl	Mn Fe	Pd	Co Ni Pt Ir Rh	Cu Ag Au	Mg Zn Cd Hg
GRUPO	31	32	33	34	35					
ELEMENTOS	O Te Se S	In Tl Al Ga	Sn Pb Si Ge	N As P Bi Sb	B Be					

Los agrupamientos generados en la tabla 6 y la partición de la red producto de estos agrupamientos mostraron que:

Los elementos considerados gases nobles no aparecen en un mismo grupo, esto es debido a que He (grupo 1) y Ne (grupo 2) tienen muy pocas interacciones entre sí y son muy diferentes al grupo generado por Ar, Kr, Xe (grupo 7), dichas interacciones se muestran en la subred de la figura 40.

Los lantánidos y actínidos están distribuidos en varios grupos: 11, 12, 13, 14, 16, 17 y 6, 18, 19, respectivamente, con la particularidad de que estos elementos se agrupan de acuerdo al sexto o séptimo periodo pero no combinados, debido a la semejanza de sus interacciones (figura 41). Sin embargo, el Pm no está agrupado con estos elementos ya que muestra más similitud con Ra, posiblemente porque estos dos elementos son muy inestables y limitan el estudio de nuevas sustancias. El Gd se agrupa sólo ya que tiene muy poca similitud con otros elementos y el Eu está agrupado con la familia de los alcalinotérreos (excepto Mg y Ra) ya que muestra alta similitud con esta familia.

Por otro lado, At (grupo 3) y Po (5) se agrupan solos a diferencia de los otros miembros de sus familias, debido posiblemente al efecto del par inerte.

Entre los miembros de la familia del escandio, Y (grupo 15) es igual a sí mismo y Sc se agrupa con la familia vecina Zr y Hf (grupo 20), exceptuando a Ti que se agrupa con la familia del vanadio y el Cr (grupo 22), mientras que W y Mo se agrupan juntos (grupo 21).

Las familias del manganeso e hierro presentan similitudes y generan los agrupamientos: Re, Os, Ru, Tc (grupo 23) y Mn y Fe (grupo 26), respectivamente. Las relaciones del agrupamiento 23 se observan en la figura 42 y muestran la semejanza entre estos elementos.

Las familias cobalto y níquel presentan altas similitudes, ya que generan un solo agrupamiento: Co, Ni, Rh, Pt, Os (grupo 28) con excepción del Pd que se parece solo a sí mismo. Las relaciones que permiten este agrupamiento se observan en la figura 43.

Se reproducen completamente las familias de: los alcalinos (grupo 24), el zinc que incluye al Mg (grupo 30), los calcógenos excepto Po (grupo 31), los térreos (grupo 32), excepto el B que es más similar al Be (grupo 35), debido al efecto del segundo período, los carbonoideos excepto el C, que sólo se asemeja a sí mismo debido al efecto del segundo período (grupo 4), los nitrogenoideos (grupo 34) y los halógenos (grupo 25) excepto el At (grupo 3) debido al efecto del par inerte.

Tradicionalmente el hidrógeno es ubicado en el grupo de los alcalinos, por la similitud de sus valencias; sin embargo, no existe una posición unívoca para este controversial elemento. Su ubicación en la tabla periódica ha sido debatida desde Linus Pauling, quién lo adaptó en la cabeza y en el centro de la tabla con una línea que indicaba la relación con los alcalinos y los halógenos. En la actualidad se han mostrado muchas posibilidades para su ubicación; las más debatidas han sido las de Kaesz, H. y Atkins, P., 2003, quienes adaptaron la idea de Pauli y centraron el hidrógeno a la cabeza de la tabla; Cronyn, M., 2003 quien a través de las relaciones entre el radio atómico, la configuración electrónica y la electronegatividad mostró la posibilidad de ubicarlo como miembro de la familia de los carbonoideos, y la de Scerri, E., 2004 (CI, 2016), filósofo de la química, quien contradice la ubicación de Kaesz y Atkins y sostiene que el no tener una posición fija hace que este elemento sea mal excluido de la ley periódica. Scerri propone buscar cualquier tipo de regularidad donde este elemento como los demás, cumpla la ley periódica; así sugiere que una posible opción es empezar cada nuevo periodo con un nuevo valor de $n+l$ (suma de los dos primeros números cuánticos) o estudiar la posibilidad del ingreso de este elemento a la familia de los carbonoideos. En esta investigación mostramos al hidrógeno como un elemento que tiene características únicas, que no se asemejan a otro agrupamiento (grupo 9), apoyando la idea general de estas discusiones y basado solo en propiedades químicas.

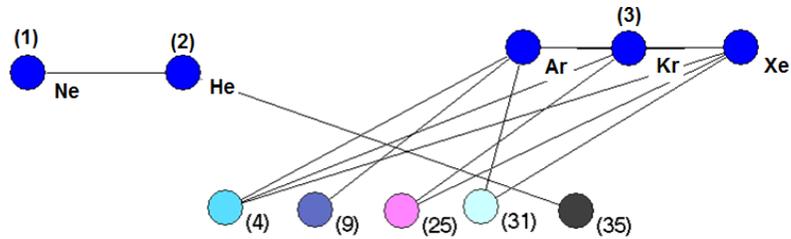


Figura 40. Relaciones entre los grupos 1, 2, 3 y otros agrupamientos

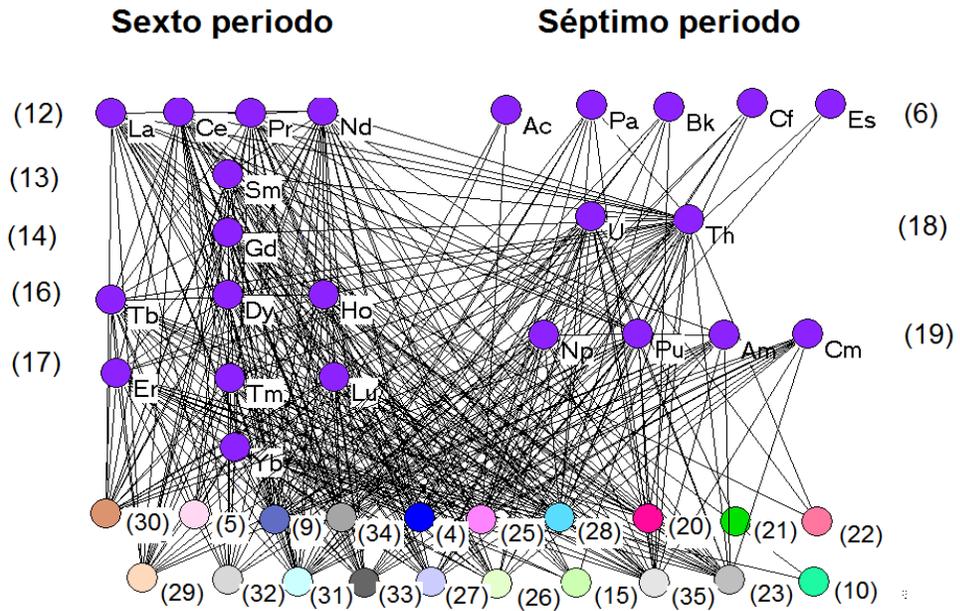


Figura 41. Relaciones entre los elementos de los grupos 12, 13, 14, 16, 17 del sexto periodo y los elementos de los grupos 6, 18, 19 del séptimo periodo, y otros agrupamientos

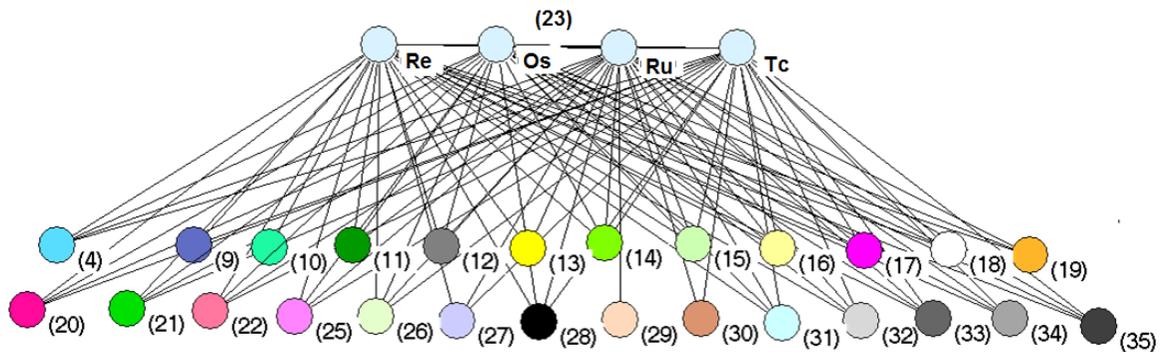


Figura 42. Relaciones entre los elementos del grupo 23 y otros agrupamientos

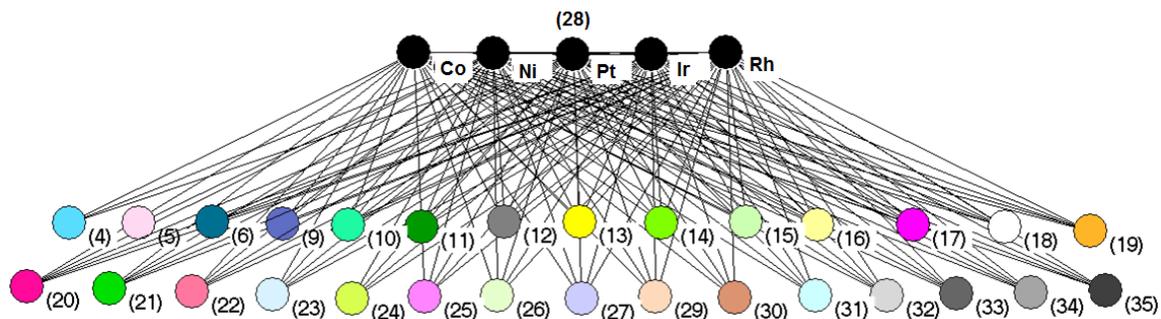


Figura 43. Relaciones entre los elementos del grupo 28 y otros agrupamientos

Se particionó la red simple de acuerdo a la tabla 6, que muestra las grupos generados a partir del análisis de agrupamientos jerárquico, distinguidas por números. Sobre esta clasificación se realizó una extracción global, generando la red de la figura 44, donde cada línea indica que por lo menos existe un compuesto binario formado por los miembros de los agrupamientos conectados. Esta partición muestra dos tipos de agrupamientos, los grupos más conectados que se encuentran en el centro, formados por no metales, semimetales y unos pocos metales, y los grupos externos que dependen en su mayoría del centro para generar compuestos binarios, conformados por los otros elementos metálicos. Si se eliminan los grupos del centro, los del exterior se desconectan casi por completo (figura 45), es decir, que la diversidad de interacciones entre grupos depende de elementos tales como los no metales, semimetales y muchos de los metales de transición que a diferencia de los demás metales presentan diversos estados de oxidación.

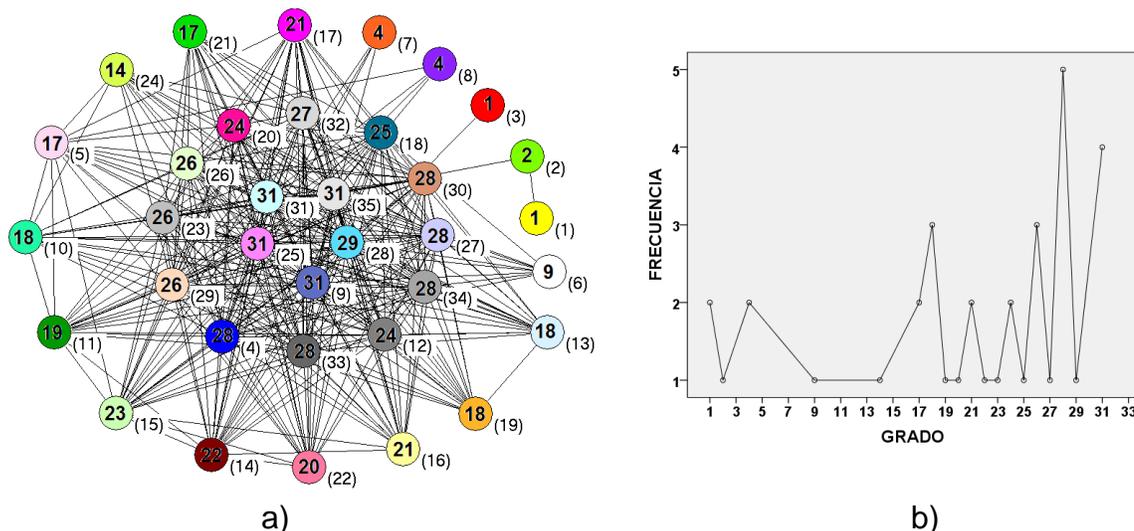


Figura 44. a) Relaciones entre los grupos del HCA, donde la etiqueta del vértice representa el grado, y el número adyacente al vértice, su agrupamiento. b) Gráfica de distribución de grado de los grupos del HCA

3.1.3.2 La centralidad y centralización de grado

Dentro de la red hay vértices que se consideran centrales, es decir, aquellos elementos químicos que interactúan con una gran cantidad de elementos en la red, formando diversidad de compuestos binarios en torno a la combinación de sus elementos; esto se refleja en el grado de cada elemento químico, donde los que se consideran los más centrales tienen mayor grado. Las sustancias centrales son fundamentales para la red porque sin ellas no se puede formar la mayor diversidad de compuestos binarios.

La centralización de grado de la red simple es 0,405, que indica que la red es descentralizada y existe un grupo de elementos químicos con los cuales se combinan la mayoría de los elementos. Los elementos más conectados de la red (centrales) con grados superiores a 80 son: Ni, Pd, Te, H, P, As, N, Pt, Se, In, S, Br, Cl, F y O. Se encontró además que los elementos menos conectados (periféricos) con grados menores a 7 son: At, Ne, He, Ra, Kr, Ar, Es, Xe, Ac y Pm.

Las altas conexiones en la red vienen dadas por todos los elementos químicos; sin embargo, cabe señalar que un pequeño grupo de elementos considerados metálicos conforma el conjunto de elementos centrales y que en su mayoría corresponden a los metales de transición; los no metales y semimetales incluyen la mayoría de sus miembros. Las conexiones más bajas las conforman los gases nobles, algunos actínidos, el Ra y el At. La electronegatividad, energía de ionización, carga nuclear efectiva e incluso el número de estados de oxidación podrían relacionarse con la cantidad de compuestos binarios diversos que un elemento forma, ya que si estas propiedades se acentúan los elementos tienden a ser más centrales o por el contrario si estas propiedades se atenúan, los elementos tienden a ubicarse en la periferia.

Si se eliminan los elementos más conectados de la red simple, se observa una desconexión relevante en la misma, como se muestra en la figura 47:

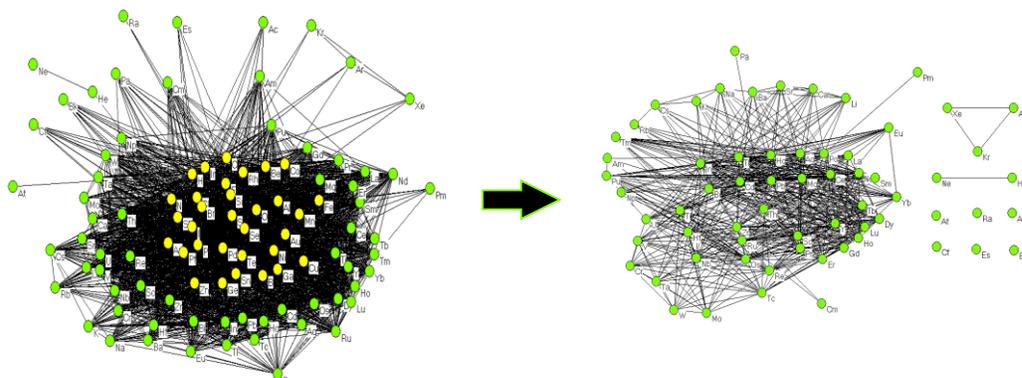


Figura 47. Desconexión de la red simple por la eliminación de los elementos centrales en amarillo

3.1.4 LA DISTRIBUCIÓN DE GRADO DE LA RED SIMPLE

La figura 48 muestra el diagrama de barras de los elementos químicos ordenados de menor a mayor a través de su grado. El valor medio de los grados en la red simple fue de 52,91 (desviación estándar=24,12). Se construyó el histograma de la figura 49 y se evaluó la forma de las distribuciones de los datos a través del cálculo de los coeficientes de curtosis y asimetría, que se muestran en la tabla 7.

Si el coeficiente de asimetría es igual a cero, la distribución de los datos es simétrica o normal; si el coeficiente es positivo, la asimetría es derecha (cola hacia la derecha) y si es negativo, la asimetría es izquierda (cola hacia la izquierda). Asimismo, el coeficiente de curtosis es igual a cero si la distribución de datos tiene comportamiento normal; este coeficiente es positivo si los datos están muy concentrados alrededor del promedio y es negativo si existe demasiada dispersión o variabilidad, lo que se muestra con una curva aplanada.

Los grados de los elementos químicos en la red simple presentan valores comprendidos entre 1 y 91, con cierta asimetría negativa (-0,668) y aplanamiento platicúrtico (curtosis=.0,262). Los estadísticos y el histograma muestran que existe una mayor tendencia de los elementos químicos a tener grados altos, es decir, a formar un alto número de compuestos binarios diversos; asimismo se observa que los elementos tienden a concentrarse poco alrededor de la media, mostrando un número similar de elementos con grados bajos, medios y altos.

La prueba de normalidad de Kolmogorov-Smirnov arrojó un p-valor = 0,179 mayor al nivel de significancia (0,05), por lo tanto se acepta la hipótesis nula que expresa que el grado de los elementos químicos en la red simple se distribuyen de manera normal. Este comportamiento es típico de una red aleatoria donde la mayoría de sus elementos presentan conexiones alrededor de la media y unos pocos se salen de este valor. De esta manera aplicando el criterio de la regla empírica 3-sigma (Stephens, L., 1998), se divide la distribución en tres grupos o intervalos, (bajo, medio y alto), el grupo de valores bajos incluye aquellos valores comprendidos entre -3σ y $-\sigma$, los valores del grupo medio van desde $-\sigma$ y σ y los valores del grupo alto están comprendidos entre σ y 3σ .

El objetivo de esta división en grupos fue caracterizar el comportamiento aleatorio de las conexiones. Se encontró que 16 elementos (16,50%), tales como los gases nobles, gran parte de los actínidos, el Pm y el Rb presentan bajas conexiones; es decir, que estos elementos se combinan muy poco con elementos diferentes; asimismo 66 elementos (68,04%) conformados por algunos metales de transición, presentan conexiones cercanas a la media, combinándose en promedio con la mitad de los elementos químicos; finalmente 15 elementos (15,46%) tales como los metales de transición Ni, Pd, Pt los semimetales Te, As, los no metales H, P, N, S, Se, Br, Cl, F, O y el metal In, presentan las conexiones más altas de la red, y por

ende, se combinan con la mayoría de los elementos químicos para generar una gran diversidad de compuestos binarios.

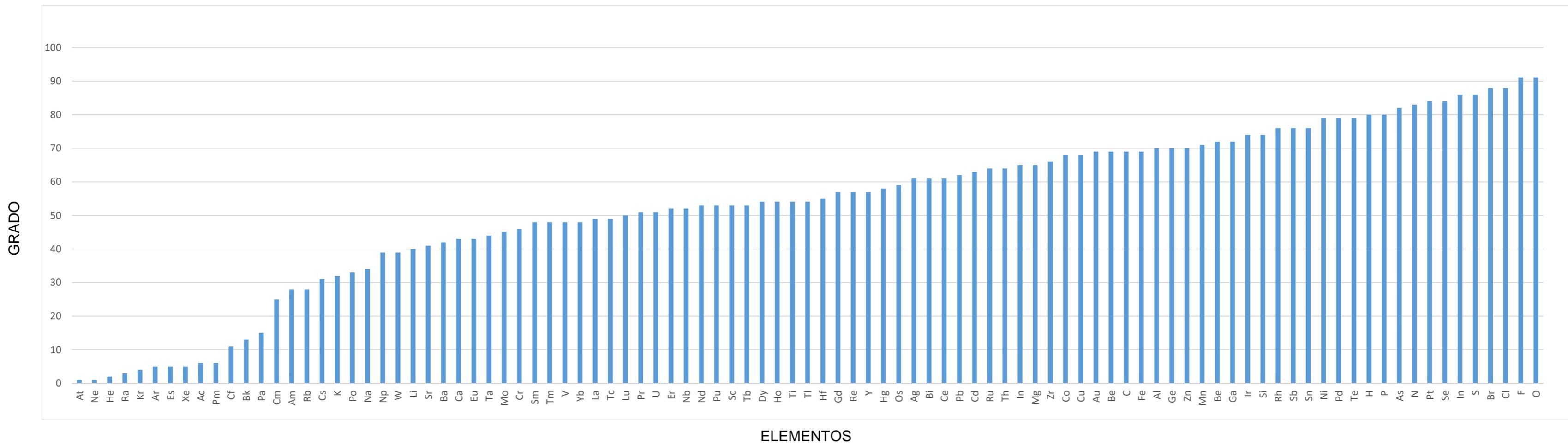


Figura 48. Distribución de grado de los elementos químicos en la red simple

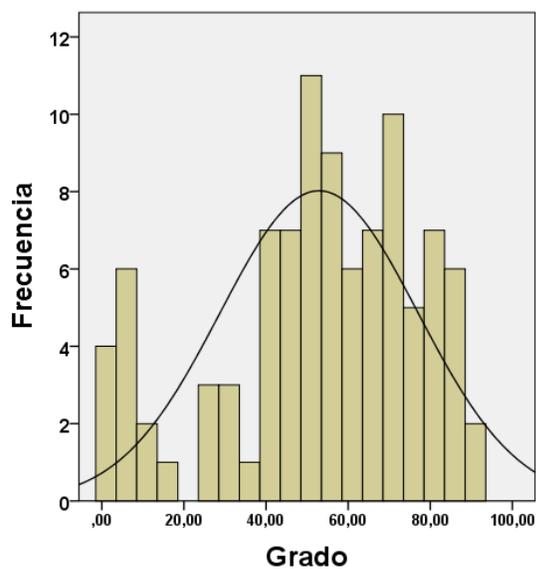


Figura 49. Histograma de la distribución de conexiones de la red simple

Tabla 7. Estadísticos de la distribución de las conexiones de los elementos químicos en la red simple

Estadístico	Valor
Número de datos	97
Mínimo valor	1
Máximo valor	91
Media	52,910
Mediana	54
Moda	48
Desviación estándar	24,120
Asimetría de pearson	0,203
Curtosis	-0,262
<i>p</i> -valor (Kolmogorov-Smirnov)	0,179

3.2 RED DE PROPORCIONES DE FORMACIÓN DE LOS COMPUESTOS BINARIOS A PARTIR DE LOS ELEMENTOS QUÍMICOS

3.2.1 CONSTRUCCIÓN Y DISTRIBUCIÓN DE GRADO DE LA RED DE PROPORCIONES

La red de proporciones (definición 7) es un refinamiento de la red simple que permite conocer la cantidad de compuestos binarios que forma un elemento y sus diferentes combinaciones estequiométricas y no estequiométricas. La figura 50 muestra el diagrama de barras de los elementos químicos ordenados según el grado, de menor a mayor. En la gráfica se observan todo tipo de conexiones que van desde

elementos como el At y Ne, que forman solo un compuesto binario, hasta elementos como el H, que forma 2130 compuestos. A partir de la información presente en el diagrama de barras se construyó el histograma de la figura 51 y se evaluó la forma de las distribuciones de los datos a través del cálculo de los coeficientes de curtosis y asimetría que se muestran en la tabla 8.

Los grados de los elementos químicos en la red de proporciones presentan valores comprendidos entre 1 y 2130, con cierta asimetría positiva (3,310) y aplanamiento leptocúrtica (coeficiente de curtosis = 15,400). El valor medio de los grados en la red de proporciones fue de 324,216 (desviación estándar=313,924). Los estadísticos y el histograma muestran que la mayoría de los elementos tienen grados concentrados alrededor de la media (324,216) y orientados hacia la izquierda del histograma, sin embargo unos pocos elementos tienen grados muy por debajo de la media y otros muy por encima de este valor, confiriéndole una cola larga a la distribución. Cabe resaltar que la media no describe correctamente todos los datos, porque aunque en promedio los elementos se conectan 340 veces, hay elementos con grados por debajo de 7 y elementos con grados por encima de 800, como lo muestra el valor de dispersión extremadamente alto de la desviación estándar (313,924).

De esta manera la prueba de normalidad de Kolmogorov-Smirnov arrojó un p-valor de (0,014) menor al nivel de significancia (0,050), por lo tanto se acepta la hipótesis alterna que expresa que el grado de los elementos químicos en la red de proporciones no sigue una distribución normal. Este comportamiento se asemeja a un modelo libre de escala, donde la mayoría de los elementos presentan grados bajos y unos pocos muestran grados muy altos, dándole una dispersión grande a la distribución que no puede ser descrita por la media. Así, se observan elementos que tienen conexiones preferenciales como el C e H (2,062% del total de los elementos) que le confieren una cola larga al histograma, ya que son los elementos que más forman compuestos binarios, seguido de otros pocos elementos como Fe, Ni, Al, O, Si, Pd, Ge, S, Ti, Co, Pt, Te, B, Sn, Cu (15,464%) que presentan entre 800 a 500 conexiones y finalmente la mayoría de los elementos químicos (82,436%) con conexiones por debajo de 500. Vale la pena resaltar que los elementos más conectados (C e H) son la base estructural de los compuestos orgánicos y que los 95 elementos restantes estructuran en su mayoría a los compuestos inorgánicos.

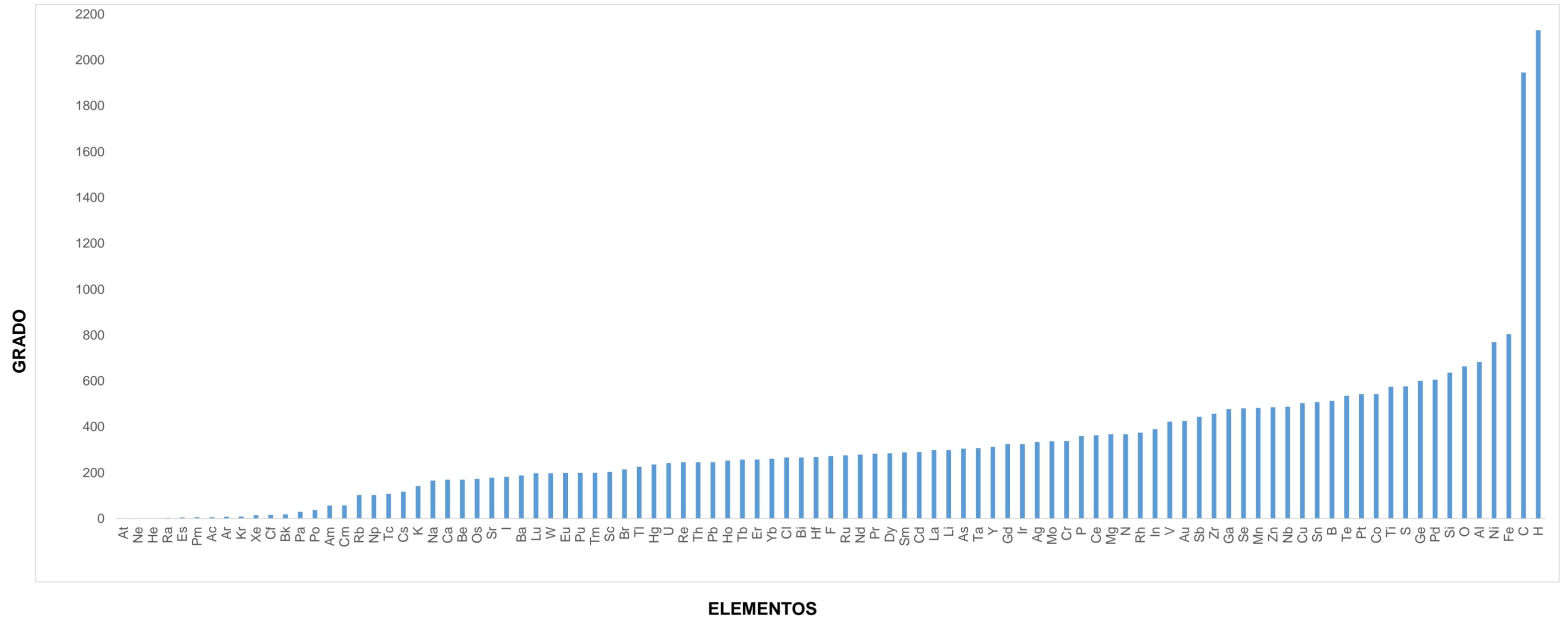


Figura 50. Distribución de grado de los elementos químicos de la red de proporciones: Grado vs. Elemento

Tabla 8. Estadísticos de la distribución de las conexiones de los elementos químicos en la red de proporciones

Estadísticos	Valores
Número de datos	97
Mínimo valor	1
Máximo valor	2130
Media	324,216
Mediana	283
Desviación estándar	313,924
Asimetría	3,310
Curtosis	15,400
p -valor	0,014

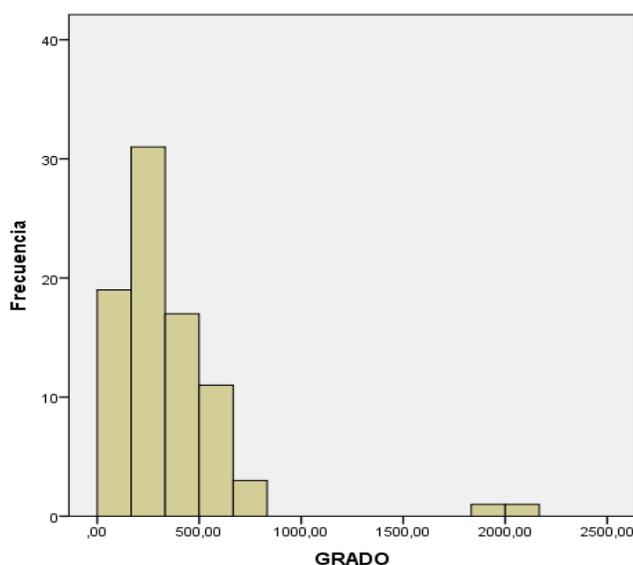


Figura 51. Histograma de la distribución de conexiones de la red de proporciones

3.2.2 PARTICIONES Y RELACIONES DENTRO DE LA RED DE PROPORCIONES

Se particionó la red de proporciones a partir de la clasificación de la tabla periódica y la clasificación resultante del HCA con el fin de analizar las relaciones clase-clase, clase-elemento y elemento-elemento.

3.2.2.1 Clasificación de la tabla periódica

La figura 51 muestra los elementos químicos ordenados ascendentemente de acuerdo a la clasificación de la tabla periódica (grupo y periodo). Los diferentes colores y los números del 1 al 21, que están por encima de las barras representan las familias de acuerdo a la tabla 5. Por ejemplo, la familia que está en amarillo y etiquetada con el número 1 al lado izquierdo de la gráfica, es la familia de los

alcalinos y abarca los elementos: Li, Na, K, Rb, Cs. En este mismo orden se encuentran las demás familias químicas.

Si concentramos la atención en cada grupo (elementos igualmente coloreados en la figura 51), se observa que cuando se va de un periodo menor a un periodo mayor, de acuerdo a la tabla periódica, se presenta una disminución en las interacciones de las familias: de los alcalinos (1), del titanio (4), del cromo (6), del hierro (8), del cobalto (9), del níquel (10), del zinc (12), de los carbonóideos (14) y de los halógenos (17). En general este comportamiento está directamente relacionado con la electronegatividad, el radio atómico y la carga nuclear efectiva, por lo tanto, cuando un elemento forma pocos compuestos binarios en una familia, existe menor electronegatividad, mayor radio atómico y por ende menor carga nuclear efectiva. Por el contrario en los gases nobles (18) el aumento del periodo favorece la formación de los compuestos binarios. A pesar de su estabilidad electrónica, esta tendencia puede ser debida a la disminución considerable de la energía de ionización que permite separar los electrones de la capa más externa de estas sustancias. Por otra parte, los lantánidos (20) presentan muchas más interacciones que los actínidos (21) aunque internamente en los grupos no se observa una única tendencia. Las familias restantes: del escandio (3), del vanadio (5), del manganeso (7), del cobre (11), de los térreos (13), de los nitrogenóideos (15), de los calcógenos (16), no muestran una tendencia en las interacciones de sus elementos.

La figura 52 muestra el promedio de las conexiones de las familias. Se observa que los gases nobles, actínidos, alcalinos, alcalinotérreos, halógenos, la familia del escandio y los lantánidos presentan las conexiones más bajas de la red, formando menos del 33,3% de los compuestos binarios, mientras que las familias del cobalto, níquel, los carbonóideos, del hierro y del hidrógeno, forman el mayor número de compuestos binarios con conexiones por encima del 66,7%.

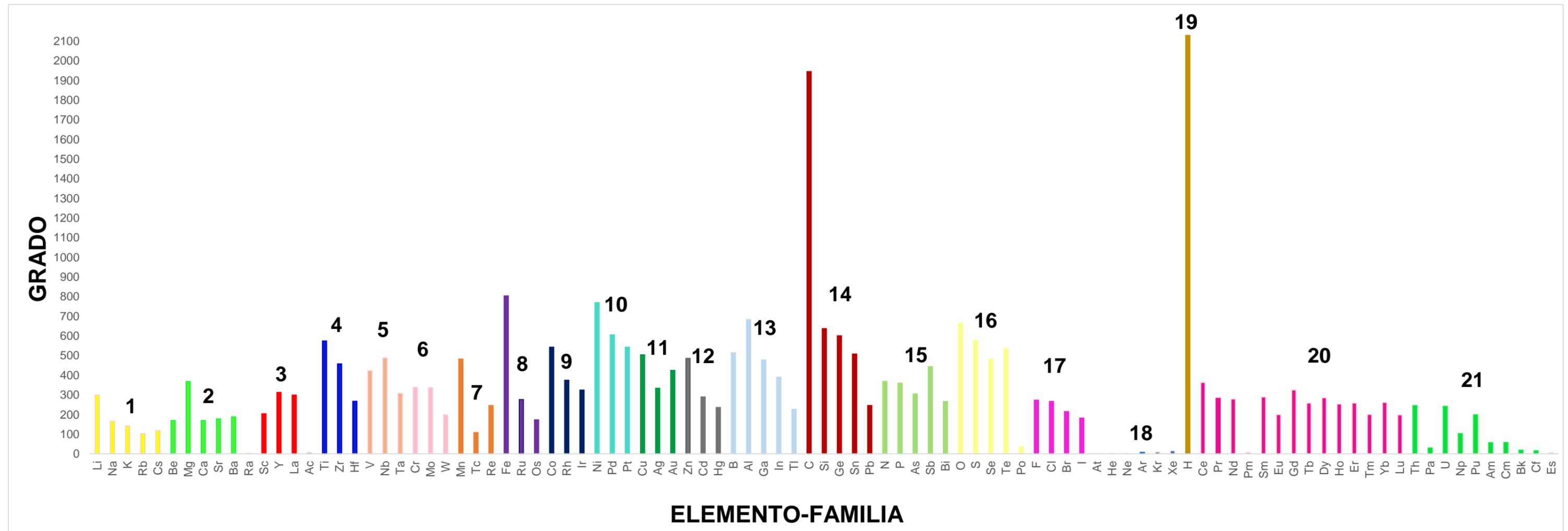


Figura 52. Distribución de grado de los elementos químicos clasificados de acuerdo a las familias químicas de la tabla periódica (IUPAC): Grado vs. Elemento-Familia

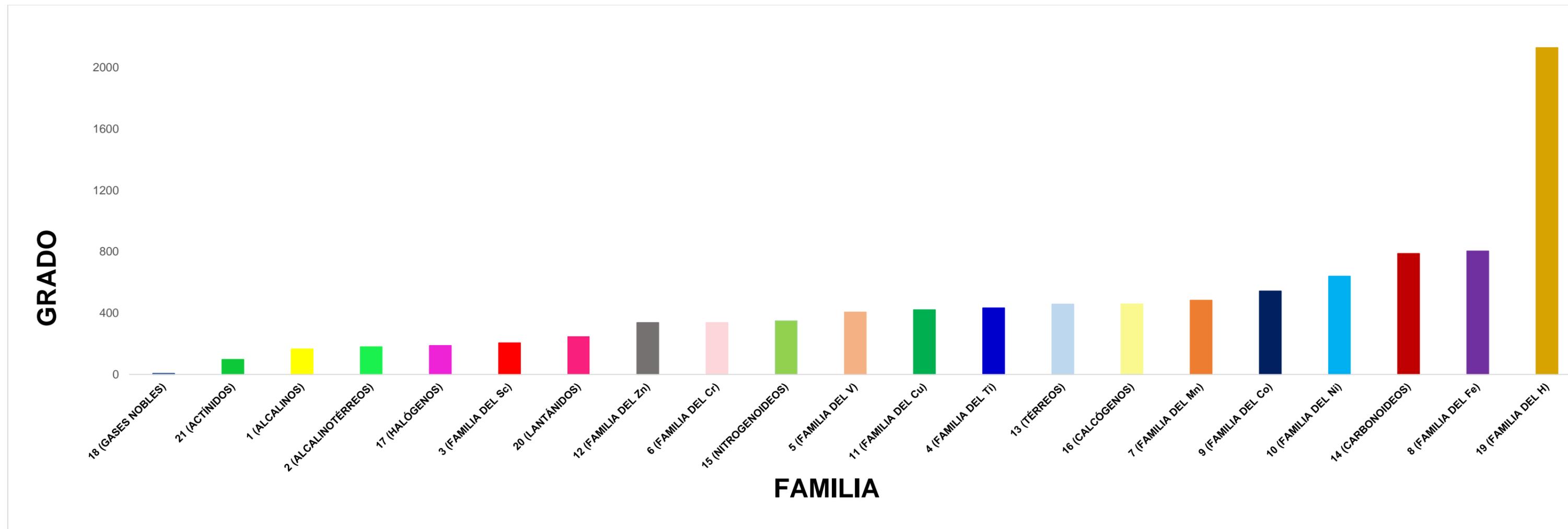


Figura 53. Distribución de grado del promedio de las familias en la red de proporciones: Grado vs. Familia

3.2.2.2 Clasificación a partir del análisis de agrupamientos jerárquico

La figura 53 muestra los elementos químicos de cada agrupamiento distinguidos por colores (tabla 6) y ordenados ascendentemente según sus pesos atómicos. En la gráfica se observa para los agrupamientos 7, 10, 26 y 35 una tendencia a aumentar las interacciones de sus elementos a medida que aumentan sus pesos atómicos; por el contrario, para los agrupamientos 17, 18, 21, 25, 32, 33 y 34, se observa disminución en las interacciones a medida que aumentan sus pesos atómicos. En general, los metales de transición no muestran una tendencia única que relacione las interacciones con el peso atómico.

La figura 54 exhibe los elementos químicos ordenados ascendentemente según sus pesos atómicos y agrupados por colores según la clasificación resultante del HCA (tabla 6). En esta gráfica se observa una tendencia de los agrupamientos: 6, 12, 16, 17, 18, 19, 26, 35 a generar estas clases por su similitud en los pesos atómicos. La mayoría de estas clasificaciones abarca las familias de los lantánidos y actínidos. La semejanza mostrada para los lantánidos se conoce como *contracción lantánida* y es debida al gran parecido de tamaño originado por el llenado de los orbitales $4f$ situados antes de los $5d$, ya que los orbitales $4f$ son poco penetrantes y, por tanto, muy poco apantallantes. Esto produce un aumento progresivo de la carga nuclear efectiva y una disminución regular y monótona del tamaño atómico de los lantánidos. Los actínidos además disminuyen considerablemente sus interacciones después del Pu debido a que tienden a trabajar con un solo estado de oxidación +2.

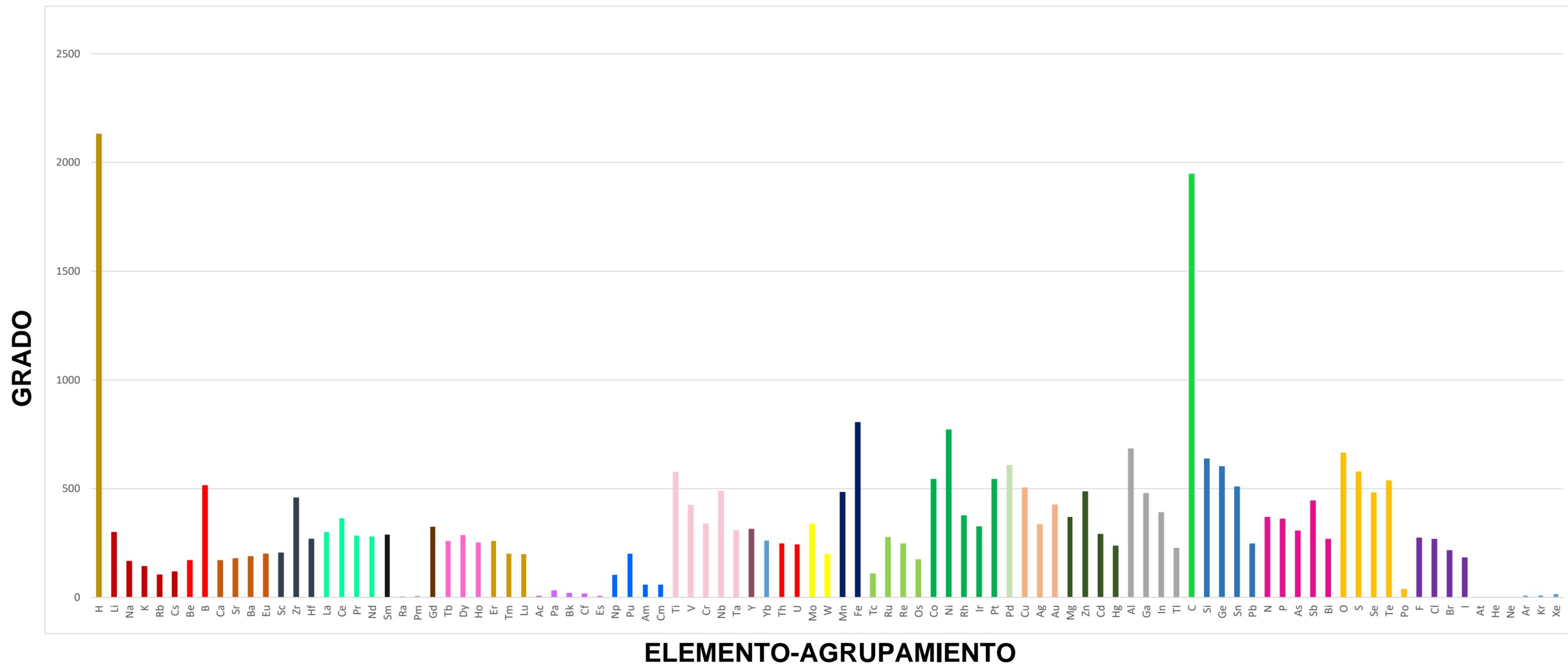


Figura 54. Grado de los elementos químicos vs. Agrupamientos: los elementos de cada agrupamiento producto del HCA son ordenados ascendentemente acorde a su peso atómico

3.2.3.2 Centralidad y centralización de grado

Los elementos más centrales de la red fueron C e H, ya que presentan conexiones que duplican y triplican al elemento más conectado (Fe) de los demás 95 elementos restantes, formando 1946 y 2130 compuestos respectivamente. De los 95 elementos (sin incluir al C y al H) se encuentra que los metales: Ti, Pd, Fe, Ni, Al, semimetales: Ge y Si, y no metales: S y O, son los elementos más conectados en la red abarcando el 70% de las conexiones. Estos elementos son considerados los más centrales, puesto que forman el mayor número de compuestos binarios. Por el contrario, los gases nobles; los actínidos: Es, Ac, Cf, Bk, Pa, Am, Cm; el lantánido Pm y los elementos: Ra, Po y At (elementos atípicos en cada una de sus familias), son considerados de la periferia por tener menos del 10% de las conexiones en la red (sin incluir al C y al H).

CONCLUSIONES

La red simple y la red de proporciones permiten caracterizar el comportamiento de los elementos químicos a través de la formación de sus compuestos binarios, estudiando las relaciones: clase-clase, clase-elemento, elemento-elemento, los conjuntos cohesivos, y la centralidad, centralización y distribución de grado.

La red simple muestra los elementos químicos con los que el elemento en estudio forma al menos un compuesto binario y la red de proporciones muestra el número de compuestos binarios que dicho elemento forma.

Las relaciones familia-familia según la clasificación de la tabla periódica, muestran para la red simple que las familias tienden a relacionarse homogéneamente entre ellas, con excepción de los gases nobles que muestran preferencia con las familias no metálicas; para la red de proporciones se muestra un comportamiento heterogéneo en sus conexiones, ya que las familias del cobalto, níquel, carbonoideos, hierro y del hidrógeno forman el mayor número de compuestos binarios en la red y por el contrario, las familias de los gases nobles, actínidos, alcalinos y alcalinotérreos están muy poco conectadas en la red.

Cuando los gases nobles se descubrieron se abrió la puerta a la pregunta sobre su reactividad, que para ese entonces era nula. Con el paso de los años, las investigaciones empezaron a mostrar que sí pueden reaccionar. Esto lleva a la pregunta de si reaccionan de manera homogénea con los elementos o si tienen alguna preferencia; al respecto puede decirse que tienen preferencia por los elementos no metálicos. Además, estas interacciones mostraron que del He hasta el Xe, el aumento del periodo favorece la formación de los compuestos binarios, una tendencia contraria a la mayoría de las familias, debido posiblemente a las diferencias notables de la energía de ionización entre estos elementos.

Las relaciones familia-elemento en la clasificación de la tabla periódica muestran para la red simple características únicas para cada familia, y para la red de proporciones, una disminución en las interacciones de la mayoría de las familias desplazándose desde un periodo menor a un periodo mayor en la tabla periódica, con excepción de los gases nobles que se comportan de manera contraria.

En la red simple se observa que desde la familia de los alcalinotérreos hasta la familia del hierro no existe relación con los alcalinos y que por el contrario, desde la familia del cobalto hasta los actínidos se presenta dicha relación. Además, se encuentra que desde la familia de los térreos hasta la familia de los halógenos, los elementos de sus primeros periodos presentan muchas más interacciones que los elementos del periodo 6, quienes disminuyen considerablemente las relaciones con los demás elementos, como es el caso del Tl, Pb, Bi, Po, At, y que estas

interacciones se hacen más pequeñas cuando hay desplazamiento de izquierda a derecha en la tabla periódica.

El presente trabajo lleva a una clasificación de los elementos más completa que cualquier otra realizada antes, ya que el dendrograma generado con la diferencia simétrica y la unión promedio, tuvo en cuenta no sólo un gran número de propiedades químicas, sino todos los dendrogramas productos de *t*ies que fueron agrupados en uno solo, a través del método de consenso.

Los agrupamientos generados productos del HCA y la metodología de Restrepo et al. (2004), reproducen la gran mayoría de las familias de la tabla periódica usando únicamente propiedades químicas. Se observa además que los elementos atípicos como el Li, C, At, H, Po, entre otros, sólo se parecen a ellos mismos. Esta clasificación da un lugar más certero a la posición controversial del H en la literatura.

Las relaciones grupo-grupo en la clasificación del HCA muestran para la red simple dos grandes grupos: los elementos centrales (altamente conectados) compuestos en su mayoría por no metales, semimetales y la mayoría de los metales de transición, y los elementos de la periferia (poco conectados), compuestos por los elementos metálicos y los gases nobles. Este último grupo depende de los elementos centrales para formar los compuestos binarios. La red de proporciones muestra dos clases de agrupamientos: los que aumentan las interacciones de acuerdo al aumento de su peso atómico y los que disminuyen sus interacciones a medida que va aumentando el peso atómico; sin embargo, los metales de transición no muestran una tendencia única que relacione las interacciones de sus agrupamientos con el peso atómico, y los lantánidos y actínidos en su mayoría se agrupan de acuerdo a su peso atómico.

El conjunto cohesivo para la red simple permite conocer los elementos químicos que más interactúan y entre ellos forman el número más diverso de compuestos binarios. Este conjunto está formado por la mayoría de los metales, los no metales (exceptuando los gases nobles), los semimetales, los lantánidos (con excepción de Pm y Eu) y algunos actínidos (Th, U, Pu). En la red de proporciones, el conjunto cohesivo permite conocer los elementos y sus vecinos (elementos con sus proporciones) comunes con quienes estos elementos forman el mayor número de compuestos binarios. Esto significa que principalmente la formación de los 18931 compuestos binarios en la red de proporciones se da como producto de las relaciones estequiométricas y se forman por las interacciones entre algunos alcalinotérreos, actínidos, no metales, lantánidos, metales de transición y semimetales.

La red simple muestra un comportamiento descentralizado, donde existe un grupo de elementos químicos con los cuales se combinan la mayoría de los elementos, llamado "los elementos centrales" y conformado por: Ni, Pd, Te, H, P, As, N, Pt, Se, In, S, Br, Cl, F y O (con grados superiores a 80).

El grado de los elementos químicos en la red simple mostró una distribución normal, típica de un modelo de red aleatoria donde la mayoría de sus elementos presentan conexiones alrededor de la media y unos pocos se salen de este valor. Por el contrario, el grado de los elementos químicos en la red de proporciones no sigue una distribución normal, asemejándose a un modelo de red libre de escala, donde la mayoría de los elementos presentan grados bajos y unos pocos muestran grados muy altos.

Al comparar el grado de la red simple y la red de proporciones se observa que los metales en su mayoría de transición: Al, Fe, Ni, Pd, Pt, Co, los semimetales: Ge, Si, Te y los no metales, se combinan con la mayoría de los elementos químicos y forman un alto número de compuestos binarios; sin embargo hay una excepción con los halógenos, que aunque son capaces de formar compuestos con la mayoría de los elementos, forman pocos compuestos binarios, debido a que usan un solo estado de oxidación. Los alcalinos, la mayoría de los alcalinotérreos, algunos lantánidos, los actínidos y los gases nobles se combinan con muy pocos elementos químicos y forman muy pocos compuestos binarios.

RECOMENDACIONES

En el presente trabajo se obtuvo un dendrograma producto del HCA, *ties in proximity* y dendrograma consenso, con un gran número de propiedades químicas que antes no se habían tenido en cuenta; este hecho generó clasificaciones muy estables, analizadas a partir de las interacciones de la red química. Sería interesante realizar un estudio usando el método quimiopológico planteado por Restrepo, G. et al., 2004, con el fin de calcular las propiedades topológicas como adherencia, interior, exterior, frontera y conjunto derivado.

Además se propone extrapolar la metodología desarrollada con la teoría de redes a otros conjuntos de interés químico, como el estudio de los procesos metabólicos en el campo de la bioquímica o el estudio de los grupos funcionales en la química orgánica, entre otros, con el fin de entender las relaciones entre las sustancias de estudio.

Se sugiere también complementar el estudio de la red de proporciones a través de otras propiedades diferentes a la cohesión y centralidad de grado, con el fin de extraer información que pueda enriquecer los aportes aquí mencionados.

Finalmente se propone realizar un estudio estadístico más profundo de la distribución de grado de la red simple y la red de proporciones con el fin de extraer mayor información de esta propiedad de los elementos químicos.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AGUIRRE, Julio. Introducción al análisis de redes sociales. En: Documentos de Trabajo CIEPP. Documentos de trabajo, 82. Centro Interdisciplinario para el Estudio de Políticas Públicas, Argentina 2011, 1-59 p.

BARABASI, Albert y BONABEAU, Eric. Scale-free networks. En: Scientific American. No. 288 (2003), p. 50-59.

BERNAL, Andrés y Daza, Edgar. Metabolic Networks: Beyond the Graph. En: Current computer-aided drug design. No. 7 (2011), p. 122-132.

BISHOP, Kyle et al. The core and most useful molecules in organic. En: Organic chemistry. No. 45 (2006), p. 5348-5354.

CHÁVEZ, Edith y LÓPEZ, Naky. Caracterización de los municipios de la provincia de Lima usando los indicadores de gestión municipal mediante análisis factorial y análisis cluster. Lima, 2005. Trabajo de grado (Licenciado en estadística). Universidad Nacional Mayor de San Marcos. Facultad de ciencias matemáticas. E.A.P. de estadística.

CHEN, David. A new method for studying the periodic system based on a kohonen neural network. Journal of chemical education. No. 87 (2010), p. 433-434.

CI (Chemistry International) [online]. Los Ángeles (California): Universidad de California, mayo de 2004-[citado 23 de julio, 2016]. Habilitado desde internet: http://www.iupac.org/publications/ci/2004/2603/ud2_scerri.html

CRONYN, Marshall. The proper place for hydrogen in the periodic table. En: Journal of chemical education. No. 8 (2003), p. 947.

FIALKOWSKI, Marcin et al. Architecture and evolution of organic chemistry. En: Computational Chemistry. No.44 (2005), p. 7263-7269.

GOLDSMITH, Robert. Metalloids. En: Journal of chemical education. No.6 (1982), p. 526-527.

GOTHARD, Chris et al. Rewiring chemistry: algorithmic discovery and experimental validation of one-pot reactions in the network of organic chemistry En: Angewandte Chemie. No. 51 (2012), p. 7922-7927.

GRZYBOWSKI, Bartosz et al. The 'wired' universe of organic chemistry. En: nature chemistry. No.1 (2009), p. 31-36.

HAN, Jing-Dong et al. Evidence for dynamically organized modularity in the yeast protein–protein interaction network. En: Nature. No. 430 (2004), p. 88-93.

HOPKINS, Andrew. Network pharmacology: the next paradigm in drug discovery. En: Nature chemical biology. No. 4 (2008), p. 682-690.

INTERNATIONAL UNION OF PURE AND APPLIED CHEMISTRY. Periodic table of elements [en línea]. <<http://iupac.org/what-we-do/periodic-table-of-elements/>> [citado en 15 de mayo de 2016].

INTERNATIONAL UNION OF PURE AND APPLIED CHEMISTRY. Periodic table of elements [en línea].<<http://www.degruyter.com/viewimg/j/ci.2016.38.issue-2/ci-2016-0213/ci-2016-0213.xml?img=graphic/ci.2016.38.2.23.1.jpg> > [citado en 06 de julio de 2016].

KAESZ, Herb y ATKINS, Peter. A Central Position for Hydrogen in the Periodic Table. En: Chemistry international. No. 6 (2003), p. 21.

KOWALIK, Mikotaj, et al. Parallel optimization of synthetic pathways within the network of organic chemistry. En: Angewandte Chemie. No. 51 (2012), p. 7928-7932.

LEAL, Wilmer et al. How frequently do clusters occur in hierarchical clustering analysis? A graph theoretical approach to studying ties in proximity. En: Journal of cheminformatics. No. 8 (2016), p. 1-16.

LEAL, Wilmer et al. A network study of chemical elements: from binary compounds to chemical trends. En: Communications in Mathematical and in Computer Chemistry. No.68 (2012), p. 417-422.

LÓPEZ, Eliana y OSPINA, Jenny. El concepto de valencia: un abordaje histórico y la importancia de la inclusión histórica en la escuela secundaria. En: memorias de la maestría en docencia de la química. No. 1 (2010), p. 180-17.

NEIRA, Clara. Topología general. Bogotá: Departamento de matemáticas, Universidad nacional de Colombia. p. 55,64 y 67-72.

NEWMAN, Mark. The structure and function of complex networks. En: Society for Industrial and Applied Mathematics. No. 2 (2003), p. 167-256.

NOOY, Wouter et al. Exploratory social network analysis with pajek. 1. ed. Estados Unidos: Cambridge University Press, 2006, 6-7p.

OSORIO, Ruben y ALZATE, Mara. Química. 1. ed. Colombia: 2010 2-17 y 28-31p.

QUINTERO, Nancy. Búsqueda de nuevos radioisótopos con decaimiento por emisión de positrones β^+ para diagnóstico por imágenes: parámetros físicos y nucleares, comportamiento químico y aspectos dosimétricos. Pamplona, 2012. Trabajo de grado (magister en química). Universidad de Pamplona. Facultad de ciencias básicas.

RESTREPO, Guillermo. Mathematical chemistry, a new discipline. En: Essays in the philosophy of chemistry. 1 ed. Oxford University Press, 2016. Chapter 15, p. 332-351.

RESTREPO, Guillermo y VILLAVECES, José Luis. Mathematical Thinking in Chemistry. En: International Journal for Philosophy of Chemistry. No. 1 (2012), p. 3-22.

RESTREPO, Guillermo et al. Topological study of the periodic system. En: The mathematics of the periodic table; King, B.; Rouvray, D., 1 ed. New York: Nova, 2006. Chapter 5, p. 75-100.

RESTREPO, Guillermo. Química matemática y la universidad de pamplona. En: Bistua. No. 1 (2005), p. 61-76.

RESTREPO, Guillermo et al. Topological Study of the Periodic System. Journal of Chemical Information and Computer Sciences. (2004), 44, 68–75.

RODRÍGUEZ, Antonio et al. Introducción al análisis de redes. En: El profesional de la información. No.17 (2008), p. 664-669.

SCHUMMER, Joachim. The chemical core of chemistry I: a conceptual approach. En: An International Journal for the Philosophy of Chemistry.No.1 (1998), p.129-162.

STEPHENS, Larry J. Theory and problems of beginning statistics. New York:McGraw-Hill, 1998. 380 p. (Schaum's outline series). ISBN 0.07-061259-5.

SUÁREZ, Tatiana. Estudio matemático del entorno químico de los puentes de disulfuro presentes en las serinoproteasas del sistema de coagulación humano. Pamplona, 2010. Trabajo de grado (Químico). Universidad de Pamplona. Facultad de ciencias básicas. Programa de química y biología.

VILLARS, Pierre y CENZUAL, Karin, Pearson's Crystal Data: Crystal Structure Database for Inorganic Compounds (on DVD), Release 2015/16, ASM Inter.