

K MODELOVANIU ZLOŽITÝCH OBJEKTŮ

MILAN BURICA, Ústav filozofie a sociológie SAV, Bratislava

BURICA, M.: On Modelling of Complex Objects.
Filozofia 39, 1984, No. 5, p. 560—573.

The author analyzes models in connection with the misinterpreted theory of mesomerism and resonance which are substantially modelling those aspects of reality that have key-position in the chemical cognition of matter.

In the incorrect evaluations of both theories the structural parts of a modelled object, i.e. the creating of the real from the non-real, are construed subjectively. The author underlines that real qualities, structures, states of molecules do not come from the fictitious, non-real ones and it is, therefore, impossible to take as absolute those states of molecules which are expressed by possible limit structures. We apply limit structures (they do not correspond real states of molecules) arbitrarily as a purposeful simplification of reality which, in spite of its character, correspond individual aspects of reality and are used in scientific practice. This opinion was successively appropriated by G. D. Wheland, L. Pauling and other theoreticians.

V našej stati pod modelom chápeme sústavu komponentov, ktoré na báze analógie napodobňujú, a tým reprodukovujú podstatné charakteristiky objektu, resp. oblasti, ktoré sú predmetom vedeckého štúdia. Pod modelovaním rozumieme proces konštruovania modelov, hľadania analógických procesov v práve analyzovanej forme pohybu hmoty alebo v jednotlivých formách pohybu hmoty. Sám model a reálny objekt (oblasť), teda modelovaný originál sú vždy v určitej objektívnej relácii. Pritom izomorfné modely zodpovedajú zobrazovanému predmetu z jedného hľadiska, kým tzv. geomorfné modely z viacerých hľadísk či postojov. Pravdaže, vo vede a reálnej praxi hovoríme o modeloch vecných (materiálnych) a abstraktných (ideálnych), ktoré sa diferencujú na logické a matematické, resp. na modely, ktoré spájajú oba spomenuté momenty. Okrem toho v bádateľskej praxi klasifikujeme modely na lineárne, uzavreté a otvorené, determinované a stochastické, na modely rovnovážnych vzťahov (abstrahujú od ťažkostí dosahovania týchto stavov) a procesné modely. (Např. v sociológii sa zasa hovorí o makrosociálnych a mikrosociálnych modeloch.) Ďalej existujú funkčné modely, ktoré reprodukovujú funkčné znaky reálneho objektu či originálu. Tento druh modelov spočíva na funkčnej analógii a možno ho členiť na oblasť statických modelov (zobrazujúcich funkčné relácie originálov v jednorázovej projekcii) a oblasť dynamických modelov, ktoré zobrazujú transformácie v procese originálu a jeho funkcie. Niekedy sa zvykne hovoriť aj o modeloch vzájomných korelácií, a taktiež treba pripomenúť, že niektoré modely možno realizovať len pomocou elektronickej techniky (počítacích strojov, resp. nepretržité pôsobiacich modelujúcich zariadení — analógov).

V našej stati nebudeme analyzovať ani jeden z uvedených druhov modelov. Bližšie si však všimnime tzv. štrukturálne modely, a to v kontexte s analýzou v chemických vedách rozvinutej teórie mezomérie a teórie rezonancie, ktoré špecificky modelujú isté aspekty reality a na ktorých budeme sledovať evolúciu idey modelovania v jednej z dôležitých etáp vývoja chemických predstáv o štruktúre hmoty.

*

K dôkladnejšiemu spoznaniu povahy chemickej väzby, teda otázok teórie chemickej štruktúry prispievajú i metódy kvantovej mechaniky. A v kontexte s extrapoláciou týchto metód v chémii sa stretávame s práve jej vlastnými (špecifickými) spôsobmi modelovania zložitých chemických objektov. Tento spôsob modelovania sa rozšíril aj v teórii mezomérie (neopierajúcej sa o kvantovú mechaniku a kvantovú chémiu), aj v teórii rezonancie, v ktorých dochádza k negatívnemu hodnoteniu oboch teórií, ak sa v chémii zaužívaný spôsob modelovania chápe a interpretuje noeticky nesprávne, ale najmä ak sa neprimerane kvalifikuje — ako to v minulosti realizovali niektorí teoretici a filozofi. Preto sa v takýchto hodnoteniach možno stretnúť s tým, že v spomenutých teóriách sa (subjektívne) konštruuje štruktúrna časť modelovaného objektu, a tým i sám modelovaný objekt, čo znamená, že sa tu vytvára reálne z nereálneho. V tomto nesprávnom chápaní sa totiž poukazovalo na akési nemateriálne „vzájomné pôsobenie“ rezonujúcich krajných, medzných štruktúr — teda v skutočnosti v základnom stave molekuly ozaj neexistujúcich štruktúr, i keď na druhej strane svojou inštrumentálnou funkciou v chemickom poznávaní a modelovaní reality opodstatnených štruktúr (pretože ony odrážajú medzné elektrónové stavy v chemickej reakcii vzbudených molekúl) — z ktorého fungovania sa podľa niektorých autorov vraj napriek jeho charakteru robili závery o vlastnostiach reálnych objektov. V duchu takýchto nesprávnych predstáv sa však prehliadlo, že tu ide len o špecifickú metódu výskumu objektov, ktorá napriek svojej osobitosti skutočne prispieva k ich hlbšiemu poznaniu, pretože spomenuté vzájomné pôsobenie naozaj vôbec nemožno stotožniť s akýmsi objektívnym procesom, ktorý prebieha ohromnou rýchlosťou a ktorý sa zhoduje s tautomériou.¹

Z dejín filozofie vieme, že Leibniz v *Monadológii* považoval monády, komponenty za akési nemateriálne atómy (aktívne duchovné substancie). Preto ani netreba odhliadnuť od niektorých materialistických stránok učenia o monádach, aby sme videli, že o vzťahoch medzi takto chápanými časticami nemožno vôbec hovoriť, t. j. že medzi nimi neexistujú

¹ V prípade tautomérie ide o rovnováhu dvoch, resp. viacerých izomérov, ktorá spočíva v tom, že jednotlivé izoméry majú približne rovnaký miestny obsah energie a môžu ľahko prechádzať z jedného do druhého.

[ani] také vzťahy, ktoré by mali nemateriálnu povahu. Avšak hneď treba pripomenúť, že i keď v spomenutých chemických koncepciách sa vyjadrujú vlastnosti niektorých molekúl prostredníctvom možných krajných, medzných štruktúr, jednako leibnizovské a moderné chemické hľadisko nemožno stotožniť. Preto dôsledný vedec-materialista nemôže (extrémne) povedať — ako sa to v určitých etapách vývoja týchto [chemických] koncepcií prostredníctvom teoretikov a filozofov rozširovalo — že reálne vlastnosti štruktúry, stavy vlastne vznikajú z fiktívnych, neskutočných štruktúr, stavov molekúl. Pravdaže, tiež je nesprávne, keď sa absolutizujú stavy molekúl, ktoré sa vyjadrujú možnými medznými štruktúrami. Vidíme teda, že skúmaná otázka nie je vôbec jednoduchá. Naopak, je veľmi komplikovaná, čo zdôrazňuje aj sovietsky vedec Štoff. Musíme si totiž uvedomiť, že možné, krajné štruktúry, ktoré úplne nekorešpondujú s reálnym stavom molekuly, zavádzame a používame v chémii (oblasť poznania) ako vedomé *zjednodušenia* skutočnosti. A tak tieto modely majú predsa len vzťah ku konkrétnym stránkam objektívnej reality — práve preto ich veda využíva — aj keď tieto stránky sa nimi adekvátne neodrážajú, či v určitých medziach vedome transformujú. Dá sa teda povedať, že možné krajné štruktúry (v rámci objektívne vytýčených úloh) v oblasti modelovania rozsekávajú daný zložitý objekt na akési jeho jednotlivé stavy, z ktorých sa vychádza pri jeho celkovom opise. A pritom v oboch uvedených koncepciách — pri vytýčovaní konečného cieľa — sa odhlíada od určitých aspektov i takto transformovaného objektu, ktorého každý stav je len veľmi približným obrazom či modelom skutočnosti. Avšak z hľadiska výskumnej praxe, aj napriek tomu nemožno prisúdiť možným stavom fiktívny charakter. Veď fiktívnymi by boli len vtedy, keby boli úplne voľnými výtvormi rozumu, bez ich (instrumentálnej) funkcie v ľudskom poznaní, teda bez ich vzťahu k reálnej praxi, t. j. výtvormi, v ktorých sa nepočíta aj s ich určitými ohraňovaniami zo strany vedeckých výskumov a teórií. (1, s. 122)²

Zdá sa, že túto skutočnosť si dobre uvedomoval i jeden zo zakladateľov teórie rezonancie G. Wheland, keď napísal, že teória rezonancie sa svojím pomerne sprostredkovaným charakterom značne odlišuje od iných prírodovedných teórií. „Myšlienka rezonancie je špekulatívnejšou koncepciou ako iné fyzikálne teórie. Nevyjadruje nijakú vnútornú vlastnosť molekuly, ale je matematickou metódou vymyslenou fyzikom alebo chemikom pre vlastné pohodlie.“ (3 a 4, s. 116)³ Aj podľa L. Paulinga — ktorý najefektívnejšie kritérium nových, zložitých chemických koncepcií hľadal v ich praktickom pláne — chemik môže nadobudnúť

² „Rezonančná predstava je pre spracovanie chemických problémov taká pohodlná a užitočná, že ľubovoľná pri voľbe medzných štruktúr má malý význam.“ (2, s. 11).

³ „Ten fakt, že sa rezonancia skúma v danom systéme, vôbec nie je podmienený nejakými prírodnými zvláštnosťami systému. Jednoducho zavádza sa čisto umelé priblíženie, ktoré zvolili preto, aby opisali charakter väzby.“ (5, s. 74—75).

„správne a užitočné intuitívne pochopenie rezonančnej koncepcie štúdiom jej praktického použitia k rôznym problémom“. (6, s. 22; 7, s. 431)⁴

Je známe, že obe teórie vznikli medzi dvoma svetovými vojnami na Západe. Tento moment však neovplyvnil ich vedeckú hodnotu. Skôr v určitom štádiu ich existencie viedol k ich neprimeranej noetickej, metodologickej a filozofickej interpretácii (bola často podmienená špecifickým charakterom ich modelových postupov a ich svojráznou terminológiou). Preto početné výsledky, ktorých sa dosiahol v chémii pomocou uvedených koncepcií, ustavične dokazujú, že ich autori nevychádzali z tých stránok učení niektorých teoretických chemikov z druhej polovice minulého storočia, v ktorých sa prejavoval agnostický postoj k poznateľnosti molekúl (Ch. F. Gerhardt, H. Kolbe), i keď z istých formulácií a termínov oboch teórií laik mohol odvodiť aj túto predstavu. Skôr sa zdá, že moderní autori vychádzali z problému, na ktorý v minulosti narazil už F. A. Kekulé. Kekulé pri svojich výskumoch totiž pobil, že štruktúru benzénových molekúl je vhodné vyjadriť nie jedným chemickým vzorcom, ale tak, akoby ona oscillovala medzi dvoma rôznymi štruktúrami. Preto túto korekciu z úplne objektívnych potrieb aj uskutočnil. Z dejín chémie vieme, že táto korekcia sa ukázala už v osemdesiatych rokoch 19. stor. nepresná, no jednako sa z *praktických* dôvodov v chémii ponechala. A práve z takýchto či podobných dôvodov sa i štruktúra chemických objektov v modernej vede začala zobrazovať špecifickými modelmi, viacerými štruktúrnymi vzorcami, avšak opodstatnenými modelmi.⁵ Veď vyrastali z klasického modelovania chemických objektov. A tu sme pri koreni veci. Preto na tomto mieste musíme upozorniť, že práve spomenuté pochopenie danej otázky nevedie k deformácii našich znalostí o objektívnej realite. Eo ipso omylov sa dopúšťali niektorí teoretici až vtedy, keď prehliadli, že súčasné zobrazenie štruktúry danej molekuly viacerými štruktúrnymi vzorcami má len *pomocný* charakter a že ani jeden takýto vzorec neurčuje a uspokojivo neodráža vlastnosti molekuly, pretože jej skutočná štruktúra je niekde medzi nimi. Napr. v teórii mezomérie sa nazýva rezonančným hybridom. V tejto teórii štruktúra benzénu je daná hybridom medzi dvoma Kekulého štruktúrnymi vzorcami. (Vplyvom mezomériskeho efektu (5, s. 66), t. j. posunu elektrónových párov, nemá väzba medzi uhlíkmi v benzénovom jadre charakter jednoduchej, ani čisto dvojitej väzby.)⁶ Aj podľa teórie rezo-

⁴ „Skutočná štruktúra, ak si ju máme predstaviť, neskladá sa zo zmesi rôznych „možných“ štruktúr. Je to jediná štruktúra sama o sebe a má k oným „možným“ štruktúram len určitý vzťah; no pretože sa nedá jednoducho znázorniť na papieri, musíme o nej uvažovať v pojmoch štruktúr, ktoré sa graficky dajú vyjadriť.“ (8, s. 88)

⁵ Podľa Štoffa autori teórie rezonancie spravili chybu v tom, že zamenili alebo stotožnili proces vedomej rekonštrukcie konkrétneho v poznaní — ktoré (konkrétne) sa dosahuje pomocou rôznych kombinácií abstraktných, neúplných obrazov, modelov — s procesom fyzikálnych interakcií oia reálnych štruktúr. Pritom však kritika tejto chyby sa nevzťahuje na samu metódu rekonštrukcie konkrétneho v poznaní. (1, s. 123)

⁶ Porovnaj s analýzou problematiky (9, s. 470—471)

nancie danú molekulu, ktorú možno znázorniť niekoľkými štruktúrnymi vzorcami (pričom každý má vyjadrovať jednu z možných kombinácií rozloženia π — elektrónov medzi atómami molekuly), nemožno *správne* znázorniť jednou určitou štruktúrou, ale len vzájomnou kombináciou alebo superpozíciou štruktúr, ktoré spôsobujú zníženie energie systému, jeho stabilizáciu. Teória rezonancie využíva na znázornenie molekúl krajné štruktúry. Napr. štruktúra benzénu sa tu opisuje ako lineárna kombinácia dvoch Kekulého a troch J. Dewarových štruktúr, ktoré sa líšia rôznym usporiadaním π — elektrónového oblaku, pritom sa predpokladá, že tieto štruktúry navzájom rezonujú. A rezonanciou krajných štruktúr vysvetľuje teória rezonancie všetky vlastnosti molekuly. Krajné štruktúry znázorňujú medzné elektrónové stavy, ktoré neexistujú v základnom stave, ktoré však existujú vo vzbudených molekulách v chemickej reakcii. Superpozíciou krajných štruktúr, z ktorých každá prispieva svojou „váhou“, získava sa kvalitatívne zobrazovanie alebo opísanie rozdelenia elektrónov v reálnej molekule. Podľa teórie rezonancie molekula môže získať v okamihu reakcie a pod bezprostredným vplyvom činnidla následkom elektrónových posunov také rozloženie elektrónov, ktoré je blízke niektorej krajnej štruktúre. A táto kvalitatívna forma teórie rezonancie je totožná s teóriou mezomérie. Z teórie rezonancie vyplýva, že každá krajná štruktúra osve nezodpovedá nijakému reálnemu fyzikálnemu stavu molekúl; medzi nimi teda nemôže existovať fyzikálny jav rezonancie.⁷

Z uvedených faktov vyplýva, že tvorba spomenutých pomocných vzorcov *nie je* vo vede sterilná, i keď na druhej strane nesmie zvädzať k vzorcovému schematizmu. Treba tiež povedať, že pomocou tohto druhu modelov a znázornení, ktoré sú napr. oporou poloempirickej metódy výberu lineárnej kombinácie funkcií, sa zhotovujú i približné matematické výpočty takých vlastností skúmaných objektov, ktoré rozširujú a obohacujú naše vedomosti o skutočnej stavbe objektu.⁸ Na tomto mieste si však treba uvedomiť, že je žalostné či paradoxné, že v určitom štádiu vývoja analyzovaných (nových) chemických predstáv sa všetky tieto pozitívne, dôležité poznatky, zákazy a direktívy ignorovali, alebo sa na ne zabudlo atď., čím došlo k prekrúcaniu teórie mezomérie, F. Arndtovej teórie prechodného stavu, ktorá tiež vznikla na konci dvadsiatych rokov nášho storočia, a neskôr i teórie rezonancie.⁹ K tejto teórii treba

⁷ K fyzikálnemu chápaniu rezonancie pozri [5, s. 25-

⁸ V moderných chemických predstavách sa ukázalo, že valenčné chemické väzby v benzéne nie sú rovnocenné, čo sa prejavilo i v písaní štruktúrneho vzorca benzénu, ktorý sa obohatil. Napr. šípkami sa v súčasných vzorcoch označuje smer posunu elektrónov, znamienkami + a — zasa rozloženie kladných a záporných nábojov v určitých molekulách atď. atď.

⁹ Teória rezonancie je predovšetkým metódou opisu chemických javov. Podľa nej stavba všetkých chemických látok sa opisuje ako superpozícia štruktúrnych formúl. „Taký prístup dodal veľkú pružnosť chemickej symbolike, dovolil jej úplnejšie vyjadriť fakty o reakčnej schopnosti látok.“ [10, s. 561—562]

dodať, že je kvalitatívnou empirickou teóriou, ktorá sa v mnohom podobá teórii lokalizovaných párov. Sama metóda lokalizovaných elektrónových párov (metóda VB) je kvantovomechanická aproximačná metóda, ktorá vznikla na báze W. Heitler — F. Londonových prác, zovšeobecnených Rumerom, Slaterom a Paulingom. Metóda VB dovoľuje názorne ukázať, ako sa uskutočňuje jav „väzba“ ako kvantovomechanická interakcia, ak sa vyjdeme od izolovaných atómov a ich priblíženie vykladáme ako „zrušenie degenerovanej výmeny“. Metódu VB je možné aplikovať na zložité systémy, ktoré nemožno opísať jednou valenčnou štruktúrou. Sám Pauling dával z bežných aproximačných metód prednosť metóde VB.

Z dejín chémie vieme, že v butlerovskom smere vo vývoji chémie sa presadzovali opačné hľadiská, ako hlásali agnostickí chemici v minulom storočí a že ďalej sa tento smer vyvíjal v kontexte s modernými predstavami o elektrónovej teórii chemickej väzby, ktorá sa realizuje spojením atómov prvkov v molekule vonkajšími (valenčnými) elektrónmi a v kvantovej chémii, ktorá študuje otázky štruktúry molekúl metódami kvantovej mechaniky. Pre informácie musíme uviesť, že v týchto náukach sa pre výpočet energie vzniku molekúl (zlučovacia energia), ale aj ich ďalších charakteristík, musí riešiť kvantovomechanická rovnica pohybu častíc, ktoré vytvárajú danú molekulu. A hlavne v tomto bode narážajú chemici na mnohé ťažkosti, ktoré sa potom prejavujú i pri riešení moderných chemických otázok. Ide totiž o to, že chemickú štruktúru látok podmieňuje jednak vzájomný vplyv jadier atómov, jednak interakcia jadier a elektrónov, odpudzovanie samých elektrónov, interakcia dráhových a vlastných rotačných impulzov izolovaných elektrónov, ako aj zákonitosť, ktorú odráža Pauliho princíp.¹⁰ Práve tento komplikovaný vzájomný vplyv rôznorodých komponentov spôsobuje, že pri zložitejších celkoch (molekulách) sú vlnové rovnice v súčasnej dobe exaktne neriešiteľné. Preto v konkrétnej chemickej praxi sa uplatňujú (zavádzajú) určité zjednodušenia (približné poloempirické metódy), ktoré potom pochopiteľne umožňujú len *približné* riešenie skúmaných otázok. A práve na tento moment sa pri ich fyzikálnej a chemickej interpretácii často zabúda. Musíme totiž uviesť, že z daných hľadísk študované celky, útvary — i tie najjednoduchšie — sú zložené z troch a viacerých častíc a matematické výpočty takýchto komplikovaných objektov sú zložité a nepresné. Veľmi dôležitá je i tá okolnosť, že molekula nie je nejakou lineárnou adíciou častíc, z ktorých sa skladá. Eo ipso akýsi „celostný“ charakter chemických útvarov (molekúl) sa musí rešpektovať aj pri aproximačných kvantovomechanických výpočtoch. Veď v týchto výpočtoch ide vlastne o vystihnúť tých fyzikálnych vlastností častíc, ktoré sa prejavujú práve v interakciách komponentov chemického objektu.

¹⁰ Podľa tohto princípu v atóme nemôžu byť dva elektróny s absolútne rovnakým súborom kvantových čísel, t. j. nemôžu byť dva elektróny v rovnakom stave.

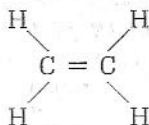
Pri kvantovomechanických výpočtoch základného stavu molekúl sa operuje vlnovou funkciou. Táto vlnová funkcia, ako vieme, zobrazuje či opisuje pohybujúce sa elektróny medzi jadrami v danej molekule [9, s. 157] a vypočíta sa zo Schrödingerovej rovnice. V metóde rezonancie sa matematický výraz vlnovej funkcie molekuly zapisuje v *zjednodušenej* forme. Model molekuly sa teda vyjadruje aproximáciou, pomocou ktorej sa opisuje *možné* usporiadanie elektrónov pre tú istú konfiguráciu jadier atómov. A *výsledná* vlnová funkcia molekuly sa vyjadří ako lineárna kombinácia vlnových funkcií *jednotlivých* možných usporiadaní. Teda $\Psi = a_1 \Psi_I + a_2 \Psi_{II} + a_3 \Psi_{III} + \dots$ kde Ψ_i sú vlnové funkcie jednotlivých štruktúr (formúl) a a_i koeficienty, ktoré vyjadrujú určité zastúpenie jednotlivých možných usporiadaní spomenutých komponentov. Pokiaľ ide o reálnu možnosť uplatnenia subjektívizmu v týchto postupoch (podmieneneho, pravda, daným vedeckým výskumom, a nie akoukoľvek imagináciou), treba povedať, že matematické vzorce jednotlivých častí vlnovej funkcie sa tvoria podľa určitých vopred dohodnutých postupov. Formálne je aj rozdelenie elektrónov v jednotlivých možných štruktúrach, schémach. Okrem toho charakterizovaný „subjektívizmus“ a istá „ľubovôľa“ sa môže uplatniť v teórii rezonancie aj pri výbere štruktúr, z ktorých sa vychádza pri výpočtoch. Pri zložitých molekulách sa totiž zväčšuje počet možných schém, no narába sa len s ich nevelkým množstvom. Avšak napriek všetkým týmto faktom (osobitnostiam niektorých metód) musíme zdôrazniť, že kvantová chémia naozaj dosiahla veľmi významné faktické úspechy pri štúdiu chemickej štruktúry molekúl, t. j. tento druh subjektívizmu a ľubovôle sa teda nezakladá na idealistickom prekrúcaní reality. Preto aj Brown hodnotí teóriu rezonancie ako nevyhnutné rozšírenie vlnovej mechaniky na problémy chémie. Podľa neho existujú aj „početné experimentálne dôkazy, ktoré jej koncepciu podporujú“. [8, s. 90]¹¹ Treba povedať, že práve s možnosťou rôzneho kombinovania medzných štruktúr sa niekedy spájala s teóriou rezonancie ľubovôľa a neprehľadnosť. Pauling však pripomínal, že rovnaká ľubovôľa sa uplatňovala aj v klasickej organickej štruktúrnej chémii, pretože v oboch prípadoch sa používajú zjednodušenia a hypotetické štruktúrne prvky. No napriek týmto zjednodušeniam a ich ľubovoľnému charakteru má podľa autora štruktúrna teória organickej chémie veľkú hodnotu. [Výraz ľubovôľa — aj v klasickej štruktúrnej teórii — v Paulingovom význame znamená to, že s každou abstrakciou nevyhnutne súvisí moment zjednodušenia. Samy znaky sú ľubovoľne voliteľné, a tak už znaková povaha vedeckého jazyka je dôležitým momentom jeho subjektivity. Preto hoci sme dali istým spojitostiam v danom znakovom systéme objektívny význam, táto ľubovôľa sa obmedzuje, no nikdy nie je celkom odstránená.] Pokiaľ ide o obmedzenie momentu ľubovôle v

¹¹ „Teória rezonancie rozširuje jazyk, ktorým chemik myslí a vyjadruje svoje myšlienky.“ [11, s. 624]

rezonančnom znázornení, dochádza tu jednak k aplikácii *všeobecných* pravidiel pre stanovenie medzných štruktúr (podľa Paulinga a Wheland), ktoré vyplývajú z chemickej skúsenosti a z kvantovej chémie, jednak k uplatneniu *individuálnej*, všeobecnými pravidlami nekodifikovateľnej chemickej skúsenosti bádateľa, ktorý tvorivo pracuje s rezonančnými vzorcami. (12, s. 133)

Teraz sa vráťme ku genéze a učeniu oboch teórií, ktoré — ako možno usúdiť už z doterajšieho textu — sú komplikované. K ich nesprávnej interpretácii, ktorá sa realizovala v istých obdobiach ich vývoja, prispel nielen nový spôsob modelovania chemických objektov, jeho kritika, ale sčasti aj s tým súvisiace isté terminologické a noetické zvláštnosti jednotlivých spomenutých teórií, ktoré sa v určitých štádiách ich vývoja javili laikovi ako nedostatky a ktoré tvorcovia analyzovaných teórií sami postupne pokusom a praxou vyvracali. Vieme, že takáto nejednoznačnosť je príznačná pre filozoficky nedostatočne školených vedcov, ale že sa zreteľne prejavuje aj v krízových a prelomových obdobiach riešenia komplikovaných vedeckých problémov a otázok spoločenskej praxe, ako sa to realizovalo aj v súvislosti s analyzovanými koncepciami.

Vznik teórie mezomérie (1926) podmienili niektoré nové predstavy, ktoré začali narúšať v chémii vžitý názor o *čistých* typoch jednoduchých dvojitych, trojitých väzieb, vytvárajúce valenčné elektróny.¹² Zistilo sa totiž, že elektróny, ktoré vytvárajú napr. dvojité väzby medzi dvoma uhlíkovými atómami v etyléne



skoro nezalietajú, čo je práve dôležité, i do oblasti susedných jednoduchých väzieb, medzi uhlík a vodík. Tieto elektróny sem nezalietajú preto, že sa nemôžu udržať. A tento fakt si musíme uvedomiť, pretože práve z neho sa vychádza pri vytváraní predstavy o „čistých“ typoch jednoduchých, dvojitych atď. väzieb. Z chémie je známe, že spomenutej (novej) „lokalizácii“ elektrónov medzi uhlíkom a vodíkom prekáža pole jednoduchých väzieb, a preto znížením odporu tohto poľa sa uľahčuje i udržanie sa preletujúcich elektrónov. No tiež je známe, že práve v týchto procesoch vzniká refaz *kvalitatívne* nových väzieb, ktoré už nie sú ani jednoduchými, ani dvojitými väzbami, ktoré sa však v prírode bežne vyskytujú. Pravda, musíme konštatovať, že tieto nové fakty v období ich vzniku niektorí teoretici v duchu starých mechanistických predstáv o elektrónoch jednak popierali, jednak redukovali na staré, i keď daným javom adekvátne klasické modely väzieb (jednoduchá, dvojité atď.) a

¹² K týmto prácam treba zahrnúť názory M. A. Il'inského (o parciálnych valenciách) a predstavy V. A. Izmailského o farebnosti organických zlúčenín (1915), ktoré prehĺbili znalosti o mezoštruktúre v organickej chémii.

molekula sa predstavovala ako akýsi „kríženec“ či „zmes“ *niekoľkých* klasických väzieb či štruktúr a začala sa modelovať pomocou niekoľkých rôznych vzorcov. V takýchto názoroch sa teda neodrazil skutočný rozmer samej reality, ale ani to, prečo sa fakticky štruktúra istých molekúl začala znázorňovať niekoľkými schémami. A tak v tejto teoretickej kríze sa začalo uvažovať, či predsa len nie je niečo pravdy na starých názoroch z obdobia vzniku predstáv o chemickej štruktúre, keď sa ešte existencia atómov všeobecne neuznávala a kedy sa istí autori nazdávali, že „chemické vzorce neznamenaajú nič viac ako púhy opis, akým spôsobom je látka schopná reagovať; že sú to akési púhe „reakčné schémy“, za ktorými sa neskrýva žiadna reálna štruktúra“. (13, s. 292—293) Tieto názory však boli nesprávne.

Vieme, že okrem teórie mezomérie aj v teórii rezonancie sa jediná skutočná štruktúra molekuly začala znázorňovať niekoľkými schémami. No aj tu to malo objektívne dôvody, hoci aj tu sprvu dochádzalo k jednostrannostiam. Všimnime si, ako sa vyvíjala táto problematika a v rámci nej i samo modelovanie.

Už skôr sme spomenuli, že práve prechod od jednotlivých atómov k viacatómovým celkom — teda k omnoho rozvetvenejšiemu vzájomnému pôsobeniu, pri ktorého štúdiu sa riešenie Schrödingerovej rovnice komplikuje natoľko, že ho súčasné matematické metódy nedokážu zvládnuť — si vynútil zavedenie iba približných poloempirických metód na riešenie chemickej štruktúry látok v týchto celkoch.¹³ Ďalej sa v záujme dosiahnutia výsledkov v danej praxi postupovalo tak, že *určitý jednoduchý vzorec* konkrétnej látky, ktorý spolu s inými jednoduchými chemickými vzorcami participoval na vystihnúť jej charakteru — podľa možnosti aplikovanej metódy — zobrazoval iba *jedno možné* usporiadanie elektrónov medzi atómami a väzbami v molekule. Preto pochopteľne sa muselo písať množstvo vzorcov, ak sa mali zobrazit všetky možné spôsoby rozmiestnenia elektrónov v danom (analyzovanom) chemickom objekte. Štôff túto skutočnosť správne spája s nemožnosťou zobrazenia kvalitatívne zložitých nemechanických javov mechanickými modelmi. (1, s. 117) Pre každý takýto vzorec sa písalo riešenie kvantovomechanickej rovnice. No konečné či skutočné štatistické rozmiestnenie elektrónov, ktoré je predsa len zložitejšie a nedá sa znázorniť jednoduchými chemickými modelmi, mohlo sa podľa takýchto postupov získať iba zlúčením či „zmiešaním“ všetkých možných (jednoduchých) riešení v takom pomere, aby vypočítaná energia či iná merateľná veličina súhlasila s nameranou¹⁴, keďže každý takýto osebe vzatý jedno-

¹³ V prvej etape vývoja kvantovej chémie zohrali významnú úlohu poloempirické výpočty a kvalitatívna analýza chemických faktov. V druhej etape sa stali možnými dostatočne prísne neempirické výpočty väčšej skupiny molekúl ako v prvej etape. Ešte pred desiatimi rokmi bola v chémii cieľom interpretácia vlnových funkcií a nie navrhovanie nových metód výpočtu. (10, s. 564)

¹⁴ Takto získané rovnice viac či menej postihujú reálne rozloženie elektrónov v molekule.

duchý model, ktorý v danej teórii v koexistencii s inými sa zúčastňuje na opise skúmaného objektu, je ozaj nedostatočný a jednostranný a len v „kombinácii“ s inými je bázou, z ktorej sa vychádza pri postihovaní typickej štruktúry danej molekuly. V tejto súvislosti treba uviesť, že tento postup v modelovaní skúmaných aspektov chemických objektov nie je ešte zavrhnuteľný, nesprávny, pretože vernejšie zobrazuje realitu ako jednotlivé jednoduché chemické vzorce.¹⁵ Preto k nesprávnej interpretácii sa začali dostávať iba tí vykladači teórie rezonancie, ktorí v danom kontexte absolutizovali matematické metódy a výsledky, ktorí nepochopili dialektiku jej možných krajných schém (štruktúr), pretože ich totálne stotožnili s reálnymi stavmi chemických objektov. V tomto duchu orientovaní autori teda vtedy nesprávne interpretovali a formulovali predstavy spojené s uvedenými postupmi, keď ich matematické výsledky sa snažili exaktne kvantifikovať a objektivizovať, hoci s týmito operáciami nemožno takto postupovať.

Pokiaľ ide o samu genézu teórie rezonancie, ktorá má význam práve pre pochopenie jej metód modelovania, môžeme spomenúť, že určité základy tejto koncepcie, v ktorej sa integruje chemické, fyzikálne a matematické myslenie, nachádzame i v G. N. Lewisovej teórii chemickej väzby, v ktorej sa absolutizoval postulát ekvivalencie.¹⁶ No L. K. Ingold upozornil, že Pauling r. 1932 analyzoval rad typických mezomérych molekúl a vysvetlil ich tvar a stabilitu kvantovomechanickou rezonanciou. (5, s. 85) Pravdaže, v samej teórii rezonancie (1932—1934) sa hovorí o krajných štruktúrach a v koncepcii mezomérie o medzných štruktúrach. Pritom aj v teórii rezonancie sa niektoré molekuly zobrazujú a modelujú pomocou viacerých východiskových štruktúr, čo pochopiteľne prispieva k ich hlbšiemu poznaniu. Preto v minulosti sa dopúšťali chýb tí kritici spomenutej koncepcie, ktorí jednotlivé možné krajné štruktúry od danej molekuly izolovali, odtrhali a prisudzovali im reálnu existenciu, hoci ich žiadnymi chemickými a fyzikálnymi prostriedkami nebolo možné pozorovať. (14, s. 212; 9, s. 189)¹⁷ Takto pochopené stavy, štruktúry teda odrážajú, znázorňujú v skutočnosti nerealizujúce sa, avšak

¹⁵ Aj podľa Laitka a Sprunga rôzne medzné štruktúry používajúce sa k opisu toho istého objektu nemajú od nich samých (t. j. medzných štruktúrach) nezávislý význam, nemožno ich pokladať za bezprostredné obrazy rozlíšených objektívne reálnych štruktúr. (12, s. 131)

¹⁶ Podľa neho jednej chemickej väzbe korešponduje pár „zospoločenšených“, spárených elektrónov. Tento názor viedol k neuznaniu kvalitatívnych zmien v povahe väzieb a ich interakcií, k chápaniu molekuly ako súhrnu izolovaných skupín väzieb.

¹⁷ „Často je ťažké pripísať molekule jedinú štruktúru typu valečnej, ktorá by uspokojivo vyjadrovala vlastnosti molekuly. Často taktiež dve alebo viaceré elektrónové štruktúry zdajú sa takmer rovnako dobre použiteľné. V tých prípadoch obyčajne má význam hovoriť, že skutočná molekula rezonuje medzi určitými štruktúrami a ukázať takú molekulu, zapisujúc v zátvorkách rôzne rezonančné štruktúry. Tie rôzne štruktúry nezodpovedajú rôznym druhom molekúl; existuje len jeden druh molekuly s elektrónovou štruktúrou, predstavujúcou hybrid z dvoch alebo viacerých štruktúr valenčnej väzby.“ (9, s. 189)

možné rozmiestnenia chemických väzieb v chemických objektoch. A v modernej chémii sa naozaj hovorí o mnohotvárnosti chemických väzieb, o tom, že väzba medzi atómami sa neobmedzuje len na jednoduché extrémne prípady, ale že kvalitatívny prechod od jednej štruktúry k druhej sa môže realizovať diferencovanou sériou drobných skokov, resp. postupných prechodov. „Ak sú k tomu podmienky, ak sú v zložitej molekule vzájomným pôsobením mnohých väzieb zmenšené odpory, ktoré sa stavajú do cesty jednotlivému uskutočneniu týchto drobných skokov, dochádza k ich realizácii a my tu potom máme veľmi pestré spektrum nových kvalít, nových foriem chemického zlučovania.“ (13, s. 296—297)

Už sme spomenuli, že vlnová funkcia molekuly sa vyjadruje lineárnou kombináciou vlnových funkcií jednotlivých možných usporiadaní určitých elementárnych častíc v molekule. Treba uviesť, že tieto izolované možné, krajné štruktúry (inak dôležité ako modely, inštrumenty v procese reprodukcie objektívnych zákonitostí) sú síce špecificky zapojené do odrazu reality skúmaných objektívnych celkov, avšak napriek tomu z hľadiska úplného opisu molekuly nadobúdajú svoj význam. A práve túto skutočnosť nedostatočne vyjadrili a ocenili kritici tejto teórie. Preto napr. Wheland neskôr napísal, že „rôznym rezonančným štruktúram nemožno pripisovať ten fyzikálny zmysel, ktoré ony nemajú“. (15, s. 49; 1, s. 121) Podobne neskôr aj Pauling (v odpovedi na kritiku) prehlásil, že krajné štruktúry síce vznikajú idealizáciou reality, nie sú však nezávislé od skutočnosti.

Jasne sa ukazuje, že obe analyzované a dočasne nesprávne interpretované teórie sú veľmi príbuzné, skoro totožné. Rozdiel medzi nimi je v tom, že predstava rezonancie — na rozdiel od koncepcie mezomérie — opiera sa o kvantovú mechaniku a kvantovú chémiu. Pritom skreslené predstavy, ktoré sa dočasne spájali s teóriou rezonancie, vôbec nevyplývajú z kvantovej mechaniky (a vedy vôbec), ba priamo odporujú jej duchu. Spájali sa len s jej nepriliehavou, prenáhlenou a z toho vyplývajúcou povrchnou interpretáciou. Pokiaľ ide o jednotlivé kvantovomechanické metódy výpočtu molekúl, treba povedať, že napriek ich značným nedostatkom, moderná kvantová chémia naozaj predstavuje jeden zo stupňov v rozvoji teórie chemickej štruktúry látok. No chemická štruktúra sa napr. i pomocou metódy lokalizovaných elektrónových párov vyjadruje (aproximatívne) vlnovou funkciou, a nie (oddelené) jej jednotlivými členmi. A podľa Volkenštejna ďalšia metóda, metóda molekulových orbitálov, i keď pri jej použití sa neberú do úvahy krajné, možné štruktúry ako pri iných metódach, tiež prináša uspokojivé výsledky pri riešení a modelovaní analyzovaných otázok. (14, s. 212)

Musíme pripomenúť, že kritici teórie mezomérie a rezonancie nazvali spôsob modelovania chemických objektov týmito teóriami, ktorý sa v nich realizuje pomocou viacerých vzorcov, vzorcovým schematizmom. Pritom pripomínali, že jeho noetické korene možno vyvodiť už z niektorých

Butlerových výrokov a predstáv, ktoré sa vzťahujú na danú tému. Hovorili totiž, že na uplatnenie a rozšírenie subjektivismu pri písaní štruktúrnych vzorcov mohol prispieť i tento autor vtedy, keď meditoval o vzťahoch medzi komponentami molekuly. Pritom sa odvolávali na Butlerov výrok, podľa ktorého „akýkoľvek spôsob písania vzorcov môže byť dobrý len vtedy, ak uspokojivo vystihuje tieto vzťahy. Dokonca je prirodzené používanie rôznych spôsobov, pričom sa dáva prednosť tomu, ktorý je pre daný prípad najvýraznejší.“ (16, s. 455)¹⁸ No treba konštatovať, že z tohto Butlerovho výroku jasne nevidíme, že by sa autor vyjadroval k tejto otázke. Skôr treba povedať, že Butlerovova chemická prax naznačuje, že s jednou molekulou sa *nespájajú* rôzne modely jej štruktúry, pretože i on sám molekulu zobrazoval jedným vzorcom. Autor teda hovoril o ľubovôli len vo výbere *znakov*, pomocou ktorých znázorňujeme existujúce stránky a procesy reálnych celkov, no ukazuje sa, že bol oproti ich vyjadrovaniu viacerými štruktúrnymi modelmi.

A tento názor podporujú aj H. Laitko a W. D. Sprung, podľa ktorých z Butlerovovej požiadavky zobraziť štruktúru zlúčeniny bezpomienene v jednom vzorci sa rozvinuli neskôr aj neadekvátne kritiky koncepcie mezomérie a rezonancie. To je už, pravda, *žasa* iná stránka problému. Autori však pripomínajú, že podľa nich nesmieme Butlerovove názory chápať tak (úzko), akoby sa ich autor domnieval, že jeden vzorec valenčnej schémy (štruktúrny vzorec) môže vyjadriť všetky podstatné znaky chemickej štruktúry danej zlúčeniny. Podľa nich termín „vzorec“ znamená u Butlerovova jednotný teoretický štruktúrny obraz ľubovoľnej abstraktnej úrovne a nie je totožný s bežným významom pojmu „chemický štruktúrny vzorec“. (12, s. 113)

Na záver treba pripomenúť, že v kvantovej chémii nášho obdobia už existujú obsiahle a zdokonalené postupy a v stati analyzovaná problematika a v rámci nej i modelovanie sa ďalej rozvíja a spresňuje (napr. pomocou metódy „atómy v molekulách“). V zásade dnes existujú, ako ukazujú viacerí autori, možnosti pre absolútne výpočty bez poloempirických pomôcok a v priebehu svojho zdokonalenia sa vzájomne zblížila metóda lokalizovaných elektrónových párov a metóda molekulových orbitálov. Vytvárajú sa predpoklady pre absolútne výpočty systémov až s niekoľkými tisícmi elektrónov pomocou počítačov. Už dnes sa splnila funkcia teórie rezonancie ako mostu k dôslednej kvantovej teórii molekúl. To všetko má dopad na nemechanický spôsob modelovania chemických objektov.

¹⁸ Avšak pre „každú látku bude v tomto zmysle možný len jeden racionálny vzorec a keď budú známe všeobecné zákony závislosti chemických vlastností látok od ich chemickej štruktúry, potom taký vzorec bude vyjadrovať všetky tieto vlastnosti“. (16, s. 78)

1. ŠTOFF, V. A.: O roli modelej v poznani. Leningrad 1963.
2. PAULING, L.: Die Natur der chemischen Bindung. Weinheim 1964.
3. WHELAND, G.: The Theory of Rezonance and its Application to organic Chemistry. New York 1947.
4. TEMNIKOVOVÁ, T. I.: Teoretické základy organickej chémie. Bratislava 1962.
5. INGOED, K.: Teoretické osnovy organičeskoj chimii. Moskva 1973. (Structure and Mechanism in Organic Chemistry).
6. POLING, L.: Suščnost chimičeskoj svjazi. Moskva 1947.
7. REUTOV, O. A.: K otázke formalismu a zjednodušování v teorii organické chemie. In: Sovětská věda — Chemie, 1951, č. 4.
8. BROWN, G.: Úvod do moderní teorie chemické vazby. Praha 1959.
9. POLING, L.: Obščaja chimija. Moskva 1964 (General Chemistry).
10. Sintez sovremennogo naučnogo znanija. Moskva 1973.
11. Kratkaja chimičeskaja enciklopedija. T4. Moskva 1965.
12. LAITKO, H. — SPRUNG, W. D.: Chemie a světový názor. Praha 1965.
13. ČELEDA, J.: Podíl chemie na vývoji světového názoru. In: Filosofie a přírodní vědy. Praha 1959.
14. VOLKENŠTEJN, M. V.: Struktura a fyzikální vlastnosti molekul. Praha 1962.
15. WHELAND, G. D.: Teorija rezonansa. Moskva 1949.
16. BUTLEROV, A. M.: Izbrannyje raboty po organičeskoj chimii. Moskva 1951.

K МОДЕЛИРОВАНИЮ СЛОЖНЫХ ОБЪЕКТОВ

Милан Бурица

В настоящей статье автор анализирует модели в связи с химически и философски неверно интерпретируемыми теориями мезомерии и резонанса, которые в химических науках довольно специфически моделируют те аспекты реальности, которые имеют ключевое значение в химическом познании материи.

В неверных оценках обеих теорий мы сталкиваемся с (субъективным) конструированием структурной части моделируемого объекта, следовательно, с созданием реального из нереального. Автор подчеркивает, что реальные свойства, структуры, состояния молекул не возникают из фиктивных, нереальных структур, состояний молекул, что нельзя, таким образом, абсолютизировать те состояния молекул, которые выражаются посредством возможных предельных структур. Ведь крайние структуры (совершенно несоответствующие реальным состояниям молекулы) мы вводим и используем в химическом познании как сознательные упрощения действительности, которые, несмотря на такой характер, имеют отношение к отдельным сторонам реальности, в силу чего наука использует их в своей практике. К такому заключению постепенно пришли Дж. Д. Уэйленд, Л. Паулинг и другие теоретики.

ZUR MODELLIERUNG KOMPLIZIERTER OBJEKTE

Milan Burica

Der Vf. analysiert Modelle im Zusammenhang mit den chemisch und philosophisch falsch interpretierten Theorien der Mesomerie und Resonanz, die in den chemischen Wissenschaften ziemlich spezifisch die Aspekte der Realität modellieren, die in der chemischen Erkenntnis der Materie eine Schlüsselbedeutung haben.

Bei den falschen Auswertungen beider Theorien stoßen wir auf eine (subjektive) Konstruierung des Strukturteils des modellierten Objekts, also auf die Konstituierung

des Realen aus dem Irrealen. Der Vf. betont, dass die realen Eigenschaften, Strukturen und Zustände von Molekülen, nicht aus fiktiven, unwirklichen Strukturen und Zuständen entstehen, dass also die Verabsolutierung der Molekülzustände, die durch mögliche Grenzstrukturen ausgedrückt werden nicht zulässig ist. Die Grenzstrukturen (gänzlich mit dem realen Zustand des Moleküls nicht korrespondierend) werden in der chemischen Erkenntnis doch als bewusste Vereinfachungen der Wirklichkeit eingeführt und verwendet, die aber trotz solchen Charakters in Beziehung zu einzelnen Seiten der Realität stehen und deswegen werden sie in der wissenschaftlichen Praxis appliziert. Zu dieser Schlussfolgerung haben sich allmählich auch G. D. Wheland, L. Pauling und andere Theoretiker durchgearbeitet.