
TEORIJE IN MODELI NARAVE V KEMIJI

M i h a L u k š i č

*Kemiki so čudna sorta smrtnikov, ki jih žene skoraj nora sila,
da iščejo radosti med dimom in parami, med sajami in plameni,
med strupi in bedo ... In vendar sem med vsemi temi zlimi duhovi
živel tako sladko, da raje umrem, kot da bi zamenjal mesto s perzijskim kraljem.*¹

Leto, v katerem izide pričujoči prispevek za zbornik *Modeli sveta*, sta mednarodna sekcija za čisto in uporabno kemijo (IUPAC) ter UNESCO razglasila za mednarodno leto kemije ter zanj izbrala slogan: *Kemija – naše življenje, naša prihodnost*. Ozrimo se okoli sebe: mar ni večina stvari, ki jih vidimo, na ta ali oni način povezana s kemijo? Kemija ima opravka z našimi oblačili, stavbami, avtomobili, cestami, poljedelstvom, živinorejo, barvami, papirjem, usnjem, fotografijami, umetnimi masami, steklom, mikročipi, mobiteli ... Molekularne transformacije so poglobitvega pomena v proizvodnji hranilnih snovi, zdravil, goriv, materialov, skratka skoraj vseh proizvedenih in pridobljenih produktov. Nenazadnje: (bio)kemični procesi omogočajo naša življenja ter življenja živali in rastlin. Si lahko torej zamislimo bivanje na zemlji brez kemije? Richard Powers zapiše:

Življenje brez kemije? Ne, nič ni narobe s to sliko. Tudi z vašo revijo in tiskalniki je vse v redu. Mislili smo zgolj, da bi vas utegnilo zanimati, kako bi izgledalo življenje brez vseh teh življenjsko nevarnih kemičnih procesov, o katerih lahko danes tako veliko berete [...] Življenje brez kemije bi izgledalo precej podobno ne-življenju [*would look a lot like no life at all*]. Manj znanja ni odgovor. Odgovor je boljše znanje. Kemični procesi niso težava – so pravila igre. Preprosto: vaše življenje je kemija [*It's elementary: your life is chemistry*].²

¹ J. J. Becher, *Physica Subterranea* (1667), navedeno po: P. Strathern, *Mendelejev's Dream: The Quest for the Elements*, St. Martins Press, New York 2001, str. 204.

² R. Powers, *Gain*, Vintage, London 2001, str. 153. – Kornberg pa na nekem drugem mestu precej vzneseno zapiše še: »Življenje, navsezadnje, je le kemija, pravzaprav majcen primer kemije na enem planetu [...] Globoko sem prepričan, da bomo življenje, vključno s človekovo zavestjo in vedenjem, v končni fazi lahko izrazili z jezikom kemije [...] Kemijski jezik je jezik neizmerne

In vendar: kaj sploh *je* kemija? Kaj se skriva za dimom in parami, za sajami in plameni, za to romantično srednjeveško podobo kemijske kuhinje? Avtorji deklaracije mednarodnega leta kemije zapišejo, da je »kemija [...] tako globoko filozofsko poizvedovanje kot uporabno znanstveno raziskovanje. Kemijska znanost je osnova za človekovo razumevanje sveta in veselja«. ³ Če naj trditev drži, potem je kemik oboje: obrtnik in filozof. ⁴ Ko kemik zapusti laboratorij, ko se z rezultati eksperimenta usede za mizo, da bi o njih razmislil, vstopi v simbolni svet modelov in teorij, postane 'filozof'. Filozof v smislu, da skuša najti razlago svojih izsledkov, da jih prevede v jezik kemije, da jih umesti v predpostavljene modelni sistem. Kemik (z redkimi izjemami) torej ni filozof v pravem pomenu besede, tudi v pomenu filozofije znanosti ne. Običajno ne analizira metod kemijskega raziskovanja, ne preizprašuje podmen, ki jih ima za gotove. Misli znanstveno, v jeziku svoje vede, v jezikih sorodnih ved (fizike, matematike, biologije). Svoj znanstveni svet lovi v to jezikovno mrežo na različne načine; lahko je konvencionalist, lahko induktivist, lahko deduktivist ... V kemiji, rečeno z Aristotelovimi besedami, sočasno eksistirata tako *epistémē* kot *phronesis*, ⁵ pri čemer je treba priznati, da je kemija vendarle pretežno eksperimentalna znanost. ⁶ Ker eksperiment v kemiji ne igra zgolj sekundarne vloge, tj., ni zgolj pomagalo pri oblikovanju in preizkušanju teorij, temveč velikokrat ravno obratno, so se o avtonomnosti kemije kot znanstvene discipline oblikovali marsikateri dvomi. Kemija se je, za razliko od fizike, kot znanost uveljavila razmeroma pozno. Zrasla je na temelju izkušenj o kemijskih lastnostih snovi, ki jih je prigarala alkimija, katere glavna točka zanimanja je bil eksperiment, saj ji je šlo le za posnemanje naravnih procesov v laboratoriju.

estetske lepote in povezuje fizikalne znanosti z biološkimi. Je mednarodni jezik, jezik za vse čase, jezik brez dialektov. Je jezik, ki nam govori, od kod smo prišli, kje smo in kam nam bo fizikalni svet v prihodnje dovolil iti.« (A. Kornberg, »Understanding Life as Chemistry«, *International Journal of Quantum Chemistry*, 53, 1995, str. 125–130.)

³ International Year of Chemistry – 2011 (*Chemistry – our life, our future*), URL: <http://www.chemistry2011.org>.

⁴ D. Knight, *Ideas in Chemistry: A History of the Science*, Rutgers University Press, New Brunswick 1992, str. 13.

⁵ J. Kovac, »Theoretical and Practical Reasoning in Chemistry«, *Foundations in Chemistry*, 4, 2002, str. 163–171.

⁶ *Phronesis* predstavlja npr. jedro sintezne kemije.

Alkimijo sta spodbujali medicina in metalurgija; prva z iskanjem 'kamna modrosti',⁷ druga s pretvorbo neplemenitih kovin v zlato. Z današnjega vidika je bila alkimija za kemijo uporabna zgolj toliko, da se je nekaj naučila od alkimističnih mojstrov, ki so bili izkušeni v obrteh, povezanih s keramiko, steklom, metalurgijo, barvami, tkaninami ... Medicina in farmacija (iatrokemija) sta v toku časa pripomogli k 'preobrazbi'⁸ alkimije v kemijo. Čeprav sodobna kemija zanika objektivno vrednost alkimističnega izkustva, pa prezre subjektivno, psihološko kohezijo alkimistične kulture. Neuspehe svojih poskusov si je alkimist razlagal tako objektivno kot subjektivno. Propad poskusa je pripisal uporabi napačnih snovi oziroma nepravemu času izvajanja poskusa, hkrati pa je ob neuspehu začel dvomiti v svojo moralno čistost, ga razumel kot moralni spodrseljaj, posledico ne dovolj goreče meditacije oziroma molitve. Gaston Bachelard je opozoril na ta subjektivni vidik alkimije, ki se je v sodobni naravoslovni znanosti izgubil.

Nikdar niso bile kvalitete odrekovanja, poštenosti, potrpljenja, premišljene metode, goreče delavnosti tako intimno zlepljene s poklicem kot v alkimističnem času. Zdi se, da se lahko danes laboratorijski človek dosti lažje loči od svoje funkcije. Svojega čustvenega življenja nič več ne meša z znanstvenim življenjem. Njegov laboratorij ni več v njegovi hiši, na njegovem podstrešju, v njegovi kleti. Zvečer ga zapusti, kakor zapustimo urad, in se vrne k družinski mizi, kjer ga čakajo druge skrbi, druge radosti. [...]

Presenetljivo je, da je mogoče vse alkimistične eksperimente razlagati na dva načina, kemijsko in moralno. Ob tem pa se pojavi vprašanje: kje je zlato? V materiji ali v srcu? Kako da lahko tudi dvomimo o prevladujoči vrednosti alkimistične kulture? Interpretacija pisateljev, ki slikajo alkimistovo iskanje bogastva, je psihološki nesmisel. Alkimija je intimna kultura. [...]

Alkimija vlada v času, ko človek bolj ljubi naravo, kot jo izkorišča. Ta beseda, ljubezen, povleče vse za sabo. Je beseda, ki povezuje delo in delavca. Brez nežnosti in ljubezni ni mogoče proučevati otroške psihologije. Prav tako ni

⁷ »Ko gre za ugotavljanje, kateri je najboljši letni čas za 'alkimistično svatbo', se omahuje med pomladjo in jesenjo, med kaljo in plodom. Najraje bi [alkimisti] združili oba letna časa, v istem eleksirju ponudili pomlad in jesen, mladost in zrelost! Natanko to udejanja *kamna modrosti*.« (G. Bachelard, *Oblikovanje znanstvenega duha*, Studia Humanitatis, Ljubljana 1998, str. 202.)

⁸ Poudariti moramo, da se kemija ni *razvila* neposredno iz alkimije, saj ni šlo za razvoj enotne znanosti o snoveh. Alkimija namreč ni bila znanost in preskok v načinu dojemljanja pojmov v alkimiji in kemiji zato ni mogel biti zvezen. (Glej npr. D. W. Theobald, »Some Considerations on the Philosophy of Chemistry«, *Chemical Society Reviews*, 5, 1976, str. 203–213.)

mogoče brez nežnosti in brez ljubezni proučevati porajanja in obnašanja kemijskih substanc. [...]

Alkimistična miselnost je v neposredni zvezi s sanjarjenjem in sanjami: objektivne podobe meša s subjektivnimi željami. [...]

Alkimist brez prestanka ponavlja: moje zlato je več kot zlato, moj merkur je več kot živo srebro, moj kamen je več kot kamen, ravno tako kot zaljubljenec, ki meni, da je njegova ljubezen največja, kar jih je kdaj prebivalo v človeškem srcu.⁹

Alkimija je bila umetnost preobrazbe, spremembe, transformacije manj vrednega v vrednejše; sprememba snovnega ali duhovnega, saj takrat ločnica med obema ni bila tako ostra, kot je v današnji eksaktni znanosti. Četudi obstaja med alkimističnim in kemijskim načinom razmišljanja precejšen prelom, ostaja zanimanje za spremembe v samem jedru sodobne kemije. Kemija je znanost, ki jo poleg sestave, zgradbe in lastnosti substanc zanimajo predvsem *spremembe* substanc, do katerih pride med kemijskimi reakcijami.¹⁰ Povedano z besedami Engelsove dialektike narave je kemija »znanost kvalitativnih spremembah teles, izvirajočih iz spremenjene kvantitativne sestave«.¹¹ Čeprav definicija prihaja 'od zunaj', in čeprav ne vključuje izomernih transformacij, ostaja ena boljših.¹² Prav zanimanje za spremembe tudi razlikuje kemijo od

⁹ G. Bachelard, *Oblikovanje znanstvenega duha*, Studia Humanitatis, Ljubljana 1998, str. 51, 53, 192, 199, 201–202.

¹⁰ »Rien ne se perd, rien ne se crée, tout se transforme« je bila Lavoisierova maksima. Nekatera področja fizikalne kemije (površinska in koloidna kemija, elektrokemija, kemijska termodinamika, statistična termodinamika, kvantna kemija itn.) štejemo h kemiji, čeprav jedro njihove tematike običajno niso kemijske reakcije. Sodobnejša, bolj pragmatična definicija kemije bi bila zato sledeča: kemija je znanost o spremembah substanc, ki vključuje tudi spremembe substanc, ki niso posledica kemijskih reakcij. (O pomenu relacij v kemiji glej: A. Bernal in E. E. Daza, »On the Epistemological and Ontological Status of Chemical Relations«, *HYLE – International Journal for Philosophy of Chemistry*, 16, 2010, str. 80–103.)

¹¹ F. Engels, *Dialektika prirode*, Cankarjeva založba, Ljubljana 1953, str. 70.

¹² Mimogrede: kitajska beseda za kemijo, 化学, dobesedno zadene bistvo: 化 [huà] pomeni spremeniti, transformirati, 学 [xué] pa znanje, vedo. – Etimološki izvor korena *kem-* ni povsem jasen. Večinoma se ga pripisuje besedi *alkimija*, ki je bila prevzeta iz srednjeveške latinščine, leta pa iz arabščine oziroma grščine (cf. npr. Slovenski etimološki slovar). Zanimivo alternativno razlago ponujata J. Needham ter S. Mahdihassan, ki trdita, da beseda kemija izvira iz Kitajske: kitajska beseda za zlato, 金 [jīn], se v stari kitajščini izgovori *kiem*, v kantonščini *kem*, v hakkaščini pa *kim*, iz česar naj bi se nato razvili arabski in grški besedi. Zamisel je sprejemljiva, saj je kitajsko zlatotvorstvo vplivalo na učenjake Srednjega in Bližnjega vzhoda. Pisnih dokazov žal ni, kar nam preprečuje določiti pravi izvor besede kemija. (J. Needham, *Science and Civilization*

fizike.¹³ Razlike med tradicijama, ki ju gojita fizika in kemija, je moč zaznati že v srednjeveški filozofiji, kjer so prevladovala tendence platonizma in hermetizma.¹⁴ Če v platonizmu posameznik ne more vplivati na svet, pa hermetizem predpostavlja njegovo neprestano spreminjanje. Posameznik zato ni zgolj opazovalec, temveč ima vpliv na globalne dogodke.¹⁵ Ideja o spreminjanju sveta je ostala lastna kemiji. Kemija ima opravka z resničnim svetom in nanj tudi deluje; sinteza je ime za tvorbo novih in spreminjanje obstoječih substanc. Zanima jo snov, kakršna je, pa tudi njena preteklost in prihodnost. Če fiziko bolj zanimajo objekti (velikost, oblika), zanimajo kemijo substance ter lastnosti, po katerih se le-te razlikujejo. »Poglavitno je, da ima fizika, kadar proučuje substance, vedno opravka s študijem objektov, ki so zgrajeni iz dane substance, medtem ko kemija študira substance, iz katerih je nek objekt zgrajen.«¹⁶

Glede na prevladujoč eksperimentalni značaj kemije pa je napak sklepati, da je kemija znanost, ki jo teorija nič ne briga.¹⁷ Teoretična (in računalniška) kemija ima pomembno vlogo ne le pri raziskavah temeljnih kemijskih vprašanj, temveč tudi pri praktičnih vidikih, s katerimi se srečuje kemijsko inženirstvo, organska kemija in biokemija, kemija okolja, atmosferska kemija, farmacevtska kemija ... Kemika ne zanima le, kaj se dogaja v naravi, temveč skuša svoja opazovanja tudi razložiti.¹⁸ Pri praktičnem delu si kemik želi o nekem fenomenu postaviti določen kavzalni koncept, ki bo razložil ta fenomen. Običajno imamo pri takšnem začetnem abduktivnem sklepanju opravka z eksistenčno ab-

in China, Vol. 5 (*Chemistry and Chemical Technology*), Cambridge University Press, Cambridge 1980, str. 324; S. Mahdihassan, »The Chinese Origins of the Word Chemistry«, *Current Sciences*, 15, 1946, str. 136.)

¹³ P. H. Plesch, »On the Distinctness of Chemistry«, *Foundations of Chemistry*, 1, 1999, str. 7–16.

¹⁴ Hermes Trismegist kot začetnik hermetizma je med dele modrosti univerzuma poleg astrologije in teurgije štel tudi alkimijo, pri čemer je spremembo svinca v zlato razumel kot poskus človeka, da se spremeni iz osnovnega človeka (svinec) v mojstra (zlato).

¹⁵ H. Vančik, »Opus Magnum: An Outline for the Philosophy of Chemistry«, *Foundations of Chemistry*, 1, 1999, str. 241–256.

¹⁶ N. Psarros, »The Lame and the Blind, or How Much Physics does Chemistry Need«, *Foundations of Chemistry*, 3, 2001, str. 241–249.

¹⁷ *Theoria sine praxis sicut rota sine axis, praxis sine theoria sicut caecus sine via.* [Teorija brez prakse je kot kolo brez akse, praksa brez teorije pa kot slepec, ki po cesti se vije.]

¹⁸ Glej npr.: P. Alexander, »Theory-Construction and Theory-Testing«, *The British Journal for the Philosophy of Science*, 9, 1958, str. 29–38.

dukcijo (postuliramo obstoj objektov, ki so bili prej neznani) oziroma z analogno abdukcijo (uporabimo primere formiranja obstoječih hipotez za izgradnjo hipotez, ki so podobne obstoječim).¹⁹ Vloga eksperimenta in teorije v kemiji ni klasična popperjanska,²⁰ pri kateri opazujemo z namenom testiranja hipotez in teorijo testiramo tako, da jo apliciramo na tiste posebne (kritične) primere, za katere daje drugačne rezultate od preostalih teorij oziroma tistega, kar bi pričakovali brez teorije. Za razliko od kozmologije ali fizike, kjer obstajajo izdelane teorije, ki čakajo na svojo eksperimentalno potrditev ali ovržbo,²¹ je v kemiji situacija prej takšna, da imamo na razpolago celo goro eksperimentalno opaženih fenomenov, ki še čakajo na svojo teoretično obravnavo. Kemija pozna množico empiričnih zakonov, ki medsebojno korelirajo dva ali več opaženih faktorjev.²² Empirični kemijski zakoni se nanašajo na substance:²³ eni zakoni trdijo, da obstajajo različni materiali, ki jim pravimo 'čiste substance' (npr. kisik, srebrov jodid, holesterol itd.), drugi podajajo funkcijske zveze, ki predstavljajo lastnosti teh substanc (npr. Boylov zakon za pline, Kolrauschov zakon za prevodnost močnih elektrolitov, Arrheniusov zakon za temperaturno odvisnost hitrosti kemijske reakcije itd.). Pregled teorij v kemiji nam ponudi obilico primerov, ko teorija napove le, katere količine bodo medsebojno povezane, njihovo funkcijsko odvisnost pa je treba nato eksperimentalno poiskati. Eksperiment torej v takšnem primeru ni v službi testiranja teoretičnega zakona; prinaša nove informacije, ne da bi čakal na teorijo. Pri testiranju modela se kemik običajno opira na določen preliminarni model, ki ga želi v skladu z eksperimentom izboljšati; ne starta v prvi vrsti s konstrukcijo teoretično bolj dodelanega modela in nato testira njegove napovedi (skladnost z

¹⁹ R. J. Good, »Why are Chemists 'Turned Off' by the Philosophy of Science?«, *Foundations of Chemistry*, 1, 1999, str. 65–95.

²⁰ K. R. Popper, *Logika znanstvenega odkritja*, Studia Humanitatis, Ljubljana 1998.

²¹ Denimo iskanje Higgsovega bozona, ki ga napoveduje standardni model fizike delcev, in ki je nemara tudi najbolj medijsko odmeven primer, kjer teorija čaka na sodbo eksperimenta. (Za razliko od fizike (projekt v Cernu), astrologije (Hubblova postaja), biologije (projekt človeškega genoma), geologije (projekt Mohole) kemija nima 'velikega' projekta, in je zato manj na očeh medijev, politikov in širše javnosti ... To je vsa zgodba.)

²² Npr. Zajčevo pravilo, Markovnikovo pravilo, Brechtovo pravilo, Konovalovo pravilo ... so vse primeri empiričnih zakonov v kemiji.

²³ E. F. Caldin, »Theories and the Development of Chemistry«, *The British Journal for the Philosophy of Science*, 10, 1959, str. 209–222.

eksperimentom). Eksperimentalni naporji so pogostokrat opravljeni prej z namenom izboljšave obstoječega modela kot z namenom njegovega testiranja. Če model ni ustrezen za opis fenomena v vseh primerih, ga običajno ne zavržemo kot povsem neustreznega, temveč ga omejimo na določeno območje veljave (Kolrauscheva zveza velja denimo le za razredčene raztopine močnih elektrolitov itn.). Teza, da teorije testiramo z namenom njihove ovržbe, v kemiji ni podprta. Namesto testiranja je bolje govoriti o evalvaciji teorije.

V kemiji mnoge teoretične hipoteze ne zajamejo celotnega področja, vsebujejo nedoločene parametre, potrebujejo pri aplikaciji dodatne hipoteze in ne dajejo numerično eksaktnih rešitev. Posledično sta eksperiment in teorija povezana na bolj kompleksen način. Fizikalnokemijske meritve niso namenjene zgolj testiranju hipotez; dajejo nam kvalitativne podatke o molekularnih modelih, ki jih zato izpopolni bolj trud eksperimentalca kot teoretika.²⁴

Popperjeva shema lahko torej velja za teoretika, ki postavlja nove teoretične koncepte, jih testira in preoblikuje (npr. fizikalni kemik, ki se ukvarja prvenstveno s teoretičnimi koncepti), ne pa za eksperimentalca, ki si želi interpretacije svojih opazovanj in ga izsledki svojih raziskav peljejo k bolj dodelanim modelom fenomenov, ki jih opazuje. Če se strinjamo s hipotetično deduktivno metodo v naravoslovni znanosti, jo je treba v primeru kemije razumeti v nekoliko manj strogi obliki: testiranje hipotez ni nujno osrednja aktivnost kemije.

Od temeljnih področij kemijske dejavnosti²⁵ je s teorijo še najbolj povezana fizikalna kemija, katere začetki segajo v pozno devetnajsto stoletje.²⁶ Fizikalna kemija raziskuje kemijske pojave pretežno s teorijami in eksperimentalnimi propomočki fizike; pojasnjuje zvezo med kemijskimi lastnostmi atomov in molekul ter njihovo zgradbo in kemijskimi vezmi med njimi, strukturo kristalov, vedenje tekočin in raztopin ipd. Vendar

²⁴ Prav tam.

²⁵ Anorganska, organska, fizikalna, analizna in biokemija. Razdelitev je precej groba, a finejša shema (npr. kvantna kemija, jedrska kemija, kemija polimerov, biofizikalna in bioanorganska kemija, kemija okolja, atmosferska kemija, klinična kemija, forenzična kemija itd.) za nadaljevanje tega prispevka ni bistvena.

²⁶ Začetke fizikalne kemije se povezuje z imeni: Wilhelm Ostwald, Svante August Arrhenius ter Jacobus Henricus van't Hoff ter z razvojem kemijskih področij, kot so: kemijska termodinamika, statistična mehanika, elektrokemija, spektroskopija, fotokemija, kemijska kinetika ...

fizikalna kemija ni zgolj podaljšek fizike; je neko posebno polje, ki ni ne fizika ne kemija v strogem pomenu obeh besed, brez ene ali druge pa na njem tudi ne bi nič vzknilo. Fizika in kemija materijo raziskujeta vsaka na sebi lasten način – termodinamika, statistična fizika, kvantna mehanika ... so dosežki fizike, ki so svoje mesto v kemiji našli prav zaradi fizikalne kemije. Fizik ne nosi kemijskih očal, si ne postavlja kemijskih vprašanj (morda nanje le odgovarja). Ko pravimo kemijska vprašanja, s tem mislimo npr.: kakšni so pogoji obstoja snovi v danem stanju; zakaj je neka snov takšna, kakršna je; kakšni so načini in vzroki za spremembe. Odgovor nanje: eksperiment in teorija sta tista, ki sta sorodna načinu odgovarjanja fizike. Fizikalna kemija v kemijo vnaša dosežke fizike, ki so pomembni za razumevanje in razlago kemijskih pojavov. Fizikalna kemija predstavlja način poenotenja obeh znanosti brez potrebe po reduktivni shemi: »Poleg redukcije (ali supervenience ali eliminitivizma) obstaja mnogo drugih poti k poenotenju. Fizikalna kemija (termodinamika, koloidna kemija, površinska kemija, kvantna kemija), na primer, združuje [*unifies*] do določene mere fiziko in kemijo.«²⁷ Fizikalna kemija se ukvarja s specifičnimi fizikalnimi lastnostmi substanc. Pri tem ne gre le za empirične raziskave njihovih lastnosti, temveč tudi za njihovo teoretično razlago, pri čemer teoretični pristop fizikalnega kemika ni niti dogmatičen niti univerzalen, ampak pogosto osnovan na pragmatični množici modelov, ki zadevajo določeno substanco, kontekst, problem. Pristop je pogosto semiempiričen, kar pomeni, da parametri, ki jih model vsebuje, potrebujejo eksperiment za njihovo določitev.²⁸

Matematika je v kemijo stopila z resnejšim obrazom prav skozi vrata fizikalne kemije. Njena vloga ni omejena zgolj na računsko uporabo, ampak prispeva k razvoju novih kemijskih teorij. Po drugi strani spodbuja kemija razvoj novih matematičnih pristopov, ki nudijo vpogled v kemijske probleme oziroma jih poskušajo razrešiti.²⁹ Matematizem postaja formativen in ne več samo deskriptiven; kemija se ne zadovolji več

²⁷ J. van Brakel, »Chemistry as the Science of the Transformation of Substances«, *Synthese*, 11, 1997, str. 253–282.

²⁸ J. Schummer, »Physical Chemistry: Neither Fish nor Fowl«, v: *The Autonomy of Chemistry*, Janich, P., in Psarros, N. (ur.), Königshausen & Neumann, Würzburg 1998, str. 135–148.

²⁹ A. T. Balaban, »Reflections about Mathematical Chemistry«, *Foundations of Chemistry*, 7, 2005, str. 289–306.

	termodinamika	statistična mehanika	kvantna mehanika
postulati	o temperaturi, toploti, delu, energiji, reverzibilnosti: vse le za <i>makroskopske</i> sisteme	o povprečjih in verjetnostih v fizikalnih sistemih	o reprezentaciji fizikalnih sistemov s pomočjo valovnih funkcij in operatorjev
objekti obravnave	makroskopska telesa realnih sistemov v ravnotežju	realni ali modelni skupki delcev, ki so lahko tudi kompleksni	skupki elektronov in jeder ali drugih elementarnih delcev
rezultati	zveze med merljivimi makroskopskimi ravnotežnimi lastnostmi	makroskopske lastnosti realnih ali modelnih sistemov; termodinamski, transportni ali relaksacijski koeficienti	energijski nivoji stacionarnih stanj ali verjetnosti za prehode med stanji

Slika 1: Najpogostejše konceptualno fizikalne teorije v kemiji: temeljni aksiomi, objekti obravnave ter rezultati. (Povzeto po H. L. Friedman, *A Course in Statistical Mechanics*, Prentice-Hall, Englewood Clifs 1985, str. 2.)

s fenomenološkim *kako*, išče tudi matematični *zakaj*, če malce parafraziramo Bachelardove besede.³⁰ V kemiji poleg analize in algebre srečamo matematične teorije, kot so topologija, teorija grafov, teorija grup, teorija kompleksnosti ter kaosa³¹ ... Zgodovinsko gledano pa je uporaba konceptov fizikalnih teorij (termodinamika, statistična fizika, relativnostna teorija, kvantna mehanika) bolj pogosta v aparatu teoretične kemije kot uporaba matematičnih teorij. Tri glavna področja fizikalne kemije so ravno kemijska termodinamika, statistična mehanika/termodinamika ter kvantna kemija (glej sliko 1).

Besedo termodinamika je leta 1849 prvi uporabil William Thomson (lord Kelvin) in izhaja iz grških besed *θερμη* (toplota) in *δυναμις* (sprememba/dinamika). Kemijska termodinamika raziskuje zveze med delom in toploto, ki ju sistem prejme ali odda zaradi kemijske reakcije ali fizikalne spremembe stanja.³² Je teorija, ki se ukvarja z *makroskopskimi*

³⁰ G. Bachelard, *Oblikovanje znanstvenega duha*, Studia Humanitatis, Ljubljana 1998, str. 5.

³¹ Če bi danes lahko Immanuel Kant prelistal katerega od učbenikov, ki se ukvarjajo s teoretično kemijo, bi moral svoje stališče glede kemije kot znanosti gotovo spremeniti ...

³² Sistem je v termodinamiki tisti del prostora (vesolja), ki si ga izberemo pri svojem proučevanju, preostalemu delu, ki ni predmet našega proučevanja, pa pravimo okolica. Sistem je lahko ograjen s fizičnimi ali z namišljenimi mejami. V kemiji najpogosteje študiramo sisteme, ki vsebujejo snov, lahko pa obravnavamo tudi sisteme, ki vsebujejo zgolj energijo (npr. elektromagnetno polje). Snovni sistemi so lahko zaprti (izmenjava snovi z okolico ni mogoča) ali odprti (snov se lahko izmenjuje z okolico). Če je sistem izoliran, potem ni med njim in njegovo okolico nobe-

sistemi, sistemi, ki vsebujejo ogromno število entitet (reda velikosti Avogadrovega števila). Njen fenomenološki pojmovni aparat se ne sprašuje po mehanizmu pojavov, niti po zgradbi same snovi, pač pa se ukvarja z lastnostmi opazovanega sistema, kot so npr. tlak, temperatura, masa, energija itn., in iz nekaj predpostavk (zakoni termodinamike) zgradi množico koristnih zvez med njimi.³³ Čeprav termodinamika ne more ponuditi molekularne razlage sveta, to ne pomeni, da je teorija slaba. Kemijski sistemi so običajno izredno kompleksni in nimamo še teorij, s katerimi bi jih znali zadovoljivo opisati na molekularnem nivoju. V teh primerih lahko termodinamiko uporabimo nič manj zanesljivo in eksaktno kot v primeru enostavnejših sistemih.

Glavni cilj statistične mehanike je omogočiti molekularno teorijo oziroma interpretacijo zlasti ravnotežnih lastnosti makroskopskih sistemov. Osnovana je na aksiomih statistične fizike. Njen cilj je, da iz splošnih zakonov za gibanje delcev izpelje zakone termodinamike, za kemijo bolj poglobljeno pa, da iz lastnosti delcev (oziroma domnev o njihovih lastnostih) ter sil, ki delujejo med njimi, izpelje makroskopske lastnosti snovi.³⁴ Sisteme je možno obravnavati v okviru aksiomatičnega pojmovanja verjetnosti, a se navadno še vedno srečujemo s pojmom *ansambla*. Ansambel predstavlja namišljeno zbirko izredno velikega števila sistemov, od katerih je vsak termodinamska (makroskopska) replika (kopija) dejanskega (realnega) termodinamskega sistema, ki ga proučujemo. Res je, da so vsi sistemi v ansamblu identični s termodinamskega vidika, se pa razlikujejo na molekularnem nivoju.

ne interakcije. Razlikujemo še homogene ter heterogene sisteme. Vsak sistem ima niz lastnosti, ki jih lahko opazujemo, izmerimo. Takšnim lastnostim pravimo fizikalne lastnosti (funkcije) sistema. Stanje sistema je določeno z njegovimi lastnostmi. Funkcije, ki so pogojene izključno s stanjem sistema in ne z načinom, kako smo to stanje dosegli, imenujemo funkcije stanja (npr. temperatura, tlak, notranja energija, entalpija, entropija itn.). – Zamjatin v romanu *Mi* zapiše: »Lej: dve sili delujeta v svetu – entropija in energija. Ena – za blažen mir, za srečno ravnovesje, druga – za porušenje ravnotežja, za trpeče neskončno gibanje.« (J. Zamjatin, *Mi*, Cankarjeva založba, Ljubljana 1988, str. 154.)

³³ Glej npr. učbenik: I. M. Klotz in R. M. Rosenberg, *Chemical Thermodynamics: Basic Concepts and Methods*, John Wiley & Sons, Hoboken 2008.

³⁴ Glej npr. učbenika: T. L. Hill, *An Introduction to Statistical Thermodynamics*, Dover Publications, New York 1986; *Statistical Mechanics: Principles and Selected Applications*, Dover Publications, New York 1987.

Če statistična mehanika potrebuje podatke o lastnostih posameznih gradnikov sistema (navadno so to molekule) in o naravi interakcij med njimi, jih sama statistična teorija ne more priskrbeti. Ta informacija mora priti od drugje. Pogostokrat si pomagamo z eksperimentom (npr. spektroskopske metode), če pa jo hočemo pridobiti teoretično, vodi principiелna pot h kvantni teoriji. V duhu Ockhamove britve³⁵ predstavlja teoretična pot s svojo skromnostjo v ekonomiji parametrov najboljše izbiro. »Epitom pristopa *ab initio* je nekaj podobnega kot evklidska geometrija, kjer začnemo z nekaj aksiomi, nato pa vse izpeljemo od začetka brez vsakršne reference na eksperimentalne podatke.«³⁶ Težava pristopa *ab initio* v kemiji nastopi z dejstvom, da za sistem več kot dveh delcev (vsi kemijski elementi razen vodika so sestavljeni iz več kot dveh atomskih delcev; protonov, nevtronov, elektronov) Schrödingerjeve enačbe brez aproksimacij ni moč rešiti.³⁷ Najpogostejši pristop k računanju večielektronske valovne funkcije je oprt na nerelativistični Schrödingerjevi enačbi ter na t. i. Born-Oppenheimerjevemu približku (jedra atomov so mirujoča, gibljejo se samo elektroni v povprečnem polju, ki ga ustvarjajo jedra in ostali elektroni sistema). Nadalje Hartree-Fockova metoda npr. opiše valovno funkcijo kot antisimetrični produkt enoelektronskih funkcij ... Kvantna kemija je skratka osnovana na vrsti principov (npr. variacijski, Ehrenfestov teorem, Hellman-Feynmanov teorem itd.), ki imajo tako hevristično kot interpretativno vlogo.³⁸ Kvantne kemije ne gre kar enačiti s kvantno teorijo (kvantna mehanika), saj se ti dve med seboj razlikujeta v vrsti aspektov.³⁹ Problemi, kako združiti klasične in kvantne spremenljivke v kemiji, vsekakor niso trivialni.⁴⁰ Omenjeni

³⁵ R. Hoffmann, V. I. Minkin in B. K. Carpenter, »Ockham's Razor in Chemistry«, *HYLE – International Journal for Philosophy of Chemistry*, 3, 1997, 3–28.

³⁶ E. R. Scerri, »Just how Ab Initio is Ab Initio Quantum Chemistry«, *Foundations of Chemistry*, 6, 2004, 93–116.

³⁷ Glej npr: F. Schwabl, *Quantum Mechanics*, Springer, Berlin [idr.], 2007; E. R. Scerri, »The Electronic Configuration Model, Quantum Mechanics and Reduction«, *The British Journal for the Philosophy of Science*, 42, 1991, str. 309–325.

³⁸ H. Hettema, »Explanation and Theory Formation in Quantum Chemistry«, *Foundations in Chemistry*, 11, 2009, str. 145–174.

³⁹ Prav tam.

⁴⁰ Primas je podal nekaj zgovornih argumentov, kako redefinirati kemijsko teorijo, da bi vključevala klasične in neklasične koncepte (H. Primas, *Chemistry, Quantum Mechanics and Reductionism*, Springer, Berlin 1983).

principi omogočajo, da lahko rezultate kvantnokemijskih računov interpretiramo v luči semiklasičnih konceptov, ki se tičejo molekul.

Kvantna kemija še ni ponudila popolne mehanistične razlage kemijskih lastnosti (kaj šele izpeljave kemijskih zakonov). Prispevki kvantne kemije h kemiji so bili raje drugačne narave. Kvantna kemija je v nekaterih primerih prinesla razlago kemijskih zakonov nekoliko prepozno, a je jeziku kemije dodala tudi številne nove koncepte, kot npr. 'orbitalé', 'aromatičnost' ...⁴¹

J. B. Weenix je okoli leta 1647 naslikal portret Renéja Descartesa, ki v rokah drži knjigo, na kateri piše »*mundus est fabula*«, »svet je zgodba«. ⁴² Descartes je s spraševanjem o tem, kaj lahko vemo in kako lahko vemo, da je resnica enaka za vsak intelekt, spoznal, da fizik (enako danes lahko rečemo za kemika) »nima neposrednega opravka z dejanskostjo samo, ampak z 'ustvarjenimi' simboli zanjo, in da ima ta simbolični svet neko lastno hipotetično resnico v sebi, ki jo mora znanstvenik odkrivati, ne da bi mogel spet znanstveno ugotoviti, ali ji v zunanjem svetu kaj odgovarja, oziroma v kaki meri ji kaj odgovarja.«⁴³ Večina teorij, ki opisujejo kemijske fenomene, vsebuje *kemijske konstrukte*;⁴⁴ 'molekula' je zagotovo eden izmed najbolj razširjenih.

Zamisel, da so molekule mikroskopski, stvarni objekti z bolj ali manj definirano obliko, je bila ključna za razvoj našega razumevanja fizikalnokemijskih lastnosti snovi in je sedaj tako lastna našemu razmišljanju in vanj tako globoko vtisnjena, da jo običajno smatramo za gotovo – ta ideja predstavlja osrednjo dogmo kemije.⁴⁵

Modeli, ki jih v kemiji uporabljamo za konceptualizacijo sveta, predstavljajo metafore, ki nam služijo za povezovanje domene kemijskih

⁴¹ H. Hettema, »Explanation and Theory Formation in Quantum Chemistry«, *Foundations in Chemistry*, 11, 2009, str. 145–174.

⁴² J.-L. Nancy, »Mundus est fabula«, *MLN*, 93, 1978, str. 635–653.

⁴³ M. Hribar, »Uvod«, v: R. Descartes, *Meditacije*, Slovenska matica, Ljubljana 1988, str. 14.

⁴⁴ N. Psarros, »What has Philosophy to Offer to Chemistry«, *Foundations of Science*, 1, 1998, str. 183–202.

⁴⁵ R. G. Woolley, »Quantum Mechanical Aspects of the Molecular Structure Hypothesis«, *Israel Journal of Chemistry*, 19, 1980, str. 30–46. (Naj poudarimo, da v fenomenološkem aparatu kemijske termodinamike ni molekul. Teorija je makroskopska in se izogne razlagi na mikroskopskem nivoju, tj. atomskim in molekulskim detajlom.)

fenomenov s tem, kar poznamo iz vsakodnevnega življenja.⁴⁶ Uporaba metaforičnih modelov je verjetno posledica dejstva, da nimamo ustreznega znanja in tehnik, s katerimi bi lahko neposredno opisovali objekte in procese na molekularnem nivoju. Model molekule, ki je sestavljena iz togih kroglic in palčk, ki te kroglice povezujejo (model 'ball-and-stick'), je primer metaforičnega modela, ki si sposoja makroskopske objekte za opis mikroskopske strukture.⁴⁷ Večinoma se takšen model molekule izkaže za zelo koristnega (npr. pri stereokemičnih vprašanjih). A ko se z nivoja atomov, ki so v molekuli povezani s kemijskimi vezmi, spustimo na kvantni nivo (torej na nivo jeder in elektronov), se pomen strukture izgubi. Klasičnega koncepta molekulske strukture ne moremo izpeljati *ab initio* iz kvantnomehanskih računov.⁴⁸ To dejstvo ne postavi kvantne mehanike pod vprašaj, niti ne zmanjša uporabne vrednosti makroskopske slike o molekulah, pač pa nam da misliti, da je napak razumeti strukturo molekule kot njeno intrinzično lastnost. Kvantna kemija si zato koncept molekulske strukture sposodi iz klasične kemije.

* * *

*Tao rodil je Enoje,
Enoje rodilo je Dvoje,
Dvoje rodilo je Troje,
iz Trojega vse so stvari.*⁴⁹

Revolucija v kemijskem načinu mišljenja se je zgodila v drugi polovici osemnajstega stoletja, ko je Antoine-Laurent de Lavoisier odkril zakon o ohranitvi mase in dokončno opravil z zmotno flogistonsko teorijo.⁵⁰

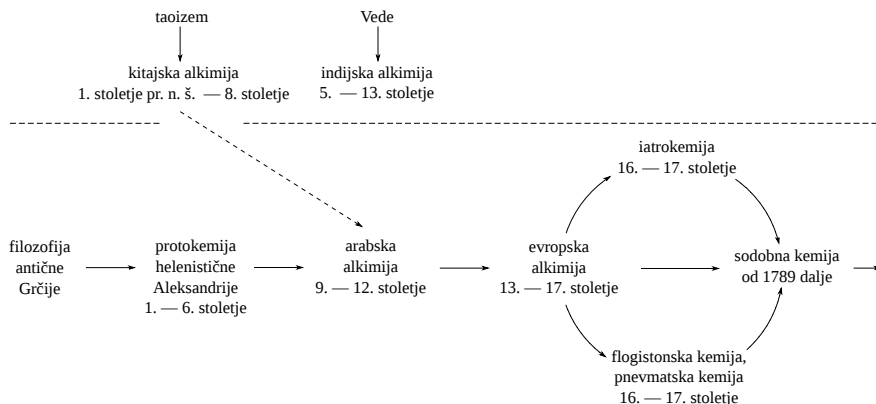
⁴⁶ N. Sukumar, »The Chemist's Concept of Molecular Structure«, *Foundations of Chemistry*, 11, 2009, str. 7–20.

⁴⁷ N. Bhushan in S. Rosenfeld, »Metaphorical Models in Chemistry«, *Journal of Chemical Education*, 72, 1995, str. 578–582.

⁴⁸ R. G. Woolley, »Must a Molecule Have a Shape?«, *Journal of the American Chemical Society*, 100, 1978, str. 1073–1079.

⁴⁹ Lao Ce, *Tao Te King*, 42. izrek, v: *Iz stare kitajske filozofije*, Slovenska matica, Ljubljana 1988, str. 212. (O vzporednicah med vzhodnjaško filozofijo ter kemijo glej npr.: E. R. Scerri, »The Tao of Chemistry«, *Journal of Chemical Education*, 63, 1986, str. 107–106.)

⁵⁰ Za diskusijo kemijske revolucije v luči Kuhnove teorije znanstvenih revolucij glej npr.: P. Hoyningen-Huene, »Thomas Kuhn and the Chemical Revolution«, *Foundations of Chemistry*,



Slika 2: Zgodovinski razvoj 'kemije'. Vodoravnica ločuje kitajsko in indijsko alkimijo od razvojne poti, ki vodi do sodobne kemije. Domnevna, a nepotrjena povezava med kitajsko in arabsko alkimijo je nakazana s prekinjeno puščico.

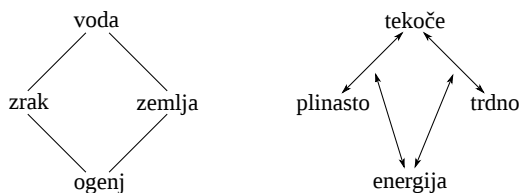
A začetki kemije niso v letu 1789, temveč segajo daleč nazaj v čase pred našim štetjem. Človek je v teku stoletij poskušal zgraditi znanje o sebi in svoji okolici; gradil je na osnovi izkušenj ter na osnovi lastnega duha (sprva s pomočjo mitov in magije). Shematski pregled zgodovinskega razvoja, ki je pripeljal do sodobne kemije, je podan na sliki 2.⁵¹

Napak bi bilo sklepati, da so imeli stari Grki le filozofski odnos do sveta. Iskali so tako kozmološke razlage kot tudi razlage 'kemijskega' obnašanja snovi na Zemlji ter možnosti njihove uporabe. To so počeli tudi kitajski modreci, ki so svoje ugotovitve o vesolju in materialnem svetu zbrali v knjigi o spremembah, 易经 [yì jīng]. Osnovna ideja obeh pristopov je bila, da mora redukcionistični pristop temeljiti na holističnem sistemu, povezanem z idejo o cikličnih spremembah.⁵² Mar ni to sorodno današnjemu iskanju teorij(e) velikega poenotenja, navkljub očitni ločitvi teorije od vsakodnevnega izkustva?

10, 2008, str. 101–115. Glej tudi: J. G. McEvoy, »In Search of the Chemical Revolution: Interpretative Strategies in the History of Chemistry«, *Foundations of Chemistry*, 2, 2000, str. 47–73.

⁵¹ Bralcu, ki ga zanima zgodovina kemije in razvoj kemijskih idej, priporočamo knjigo: D. Grdenić, *Zgodovina kemije*, In obs medicus, Ptujška Gora 2007.

⁵² R. J. P. Williams in J. J. R. Fraústo de Silva, *The Natural Selection of the Chemical Elements: The Environment and Life's Chemistry*, Clarendon Press, Oxford 1996, str. 6.



Slika 3: Levo: štiri klasični 'elementi', kot jih poznamo iz grške filozofije. Desno: 'prevod' leve sheme v moderni jezik.

Že zelo zgodaj v zgodovini mišljenja se je pojavil koncept, model, da je vse, kar zaznamo, moč razstaviti na osnovne primarne komponente. Ideja o končnem številu nedeljivih entitet (elementov), iz katerih lahko s kombiniranjem pripravimo ničkoliko objektov, se je ohranila do danes. Današnje atomske teorije, ki obravnavajo spremembe v elektronski konfiguraciji atomov, ko se le-ti združijo v molekulo, so le bolj sofisticirani načini izražanja starejših idej. »Le v zahtevi, da lahko elemente pripravimo, in ne, kot to pogosto slišimo, v zamisli, da moramo elemente smatrati za nerazgradljive substance, leži napredek Junga, Boyla ter Lavoisiera nad stališči, ki jih je zagovarjal Aristotel.«⁵³

Primerjajmo Aristotelovo shemo štirih prvin s shemo, s katero lahko danes ponazorimo različna agregatna stanja (faze) dane kemijske substance. Prvine zrak, voda, zemlja in ogenj (leva stran slike 3), od katerih se vsaka odlikuje z eno lastnostjo, je Aristotel povzel od starejših mislecev. Kot je učil Empedokles, prvine (počela, elementi) niso stalne, temveč se lahko pretvarjajo druga v drugo preko medija lastnosti. Mar ne obstaja tesna podobnost med shemo faznih sprememb neke substance (prehod iz trdnega v tekoče in nato v plinasto, npr. ledu v vodo in vode v paro) in shemo štirih elementov? Plinasto fazo lahko povežemo z zrakom, tekočo z vodo in trdno z zemljo. Energijo, ki se pri faznih prehodih sprošča oziroma porablja, lahko v antični shemi nadomesti ogenj (desna stran slike 3).⁵⁴

⁵³ F. A. Paneth, »The Epistemological Status of the Chemical Concept of Element«, *Foundations of Chemistry*, 5, 2003, str. 113–145.

⁵⁴ Shemi s slike 3 sta priročni tudi pri obravnavi problema organizacije v kemiji, tj. prehoda iz nereda v red. Plinasta faza predstavlja nered (gibanje), tekoča faza organizacijo in trdna faza red (strukturo), pri čemer je 'tok' energije tisti, ki narekuje 'ravnotežje' red ↔ nered.

Koncept kemijskega elementa predstavlja v kemiji enega temeljnih konceptov. Štiri prvine, omenjene zgoraj, so v času alkimije zamenjali trije elementi (principi): sol, žveplo in živo srebro. Ko se je kemija otresla alkimije, se je vrnila k Aristotelu, a kmalu podvomila v njegov nauk ter ga zavrgla, saj ni podpiral korpuskolarne zgradbe snovi. Razmahnila se je atomika, katere osnova je bila prav tako grška. Z delom Roberta Boyla so bili postavljeni prvi temelji modernejšje kemije. Boyle je sklepal, da štirje grški ter trije alkimistični 'elementi' niso dovolj, saj se snovi ne razstavljajo nanje; definira element, ne pa počel, ki bi ustrezala njegovi definiciji. Lavoisier o elementih ne govori več kot o skrajnih delih delitve (to je pravzaprav filozofski koncept), ampak o skrajnih sestavinah, do katerih nas pripelje rezultat kemijske analize (kemijski koncept).⁵⁵

Dimitrij Ivanovič Mendeljejev je v želji po vzpostavitvi klasifikacijskega sistema kemijskih elementov na osnovi njihovih lastnosti odkril zanimive ponavljajoče (periodične) vzorce (zlasti v atomskih masah elementov), kar ga je leta 1869 pripeljalo do zakona o periodičnosti kemijskih lastnosti ter do konstrukcije periodnega sistema kemijskih elementov,⁵⁶ ki ne predstavlja zgolj razpredelnice elementov, ampak bazen enormnega števila podatkov in znanja.⁵⁷ Veličina Mendeljejevega dela ni prvenstveno v klasifikacijski shemi do tedaj znanih elementov (to so poskušali tudi drugi), temveč v tem, da je ustvaril idealizirane objekte kot model realnega sistema. Koncept kemijskega elementa je formuliral kot teoretični koncept. Ustvaril je namreč idealiziran sistem idealiziranih elementov. Kemijske elemente je konstruiral na osnovi zakona o periodičnosti kemijskih lastnosti; mesto, ki pripada elementu v periodnem sistemu, ga definira kot idealizirani objekt. »Takšen idealizirani objekt ne smemo razumeti v smislu spekulativnega mentalnega objekta; to je objekt, analogen rezultatu umskega nadaljevanja realnega eksperimenta, saj obstajajo izredno natančna pravila, kako pridemo do takšnega objek-

⁵⁵ Kemija danes definira kemijski element kot čisto kemijsko substanco, zgrajeno iz atomov z enakim številom protonov v svojih jedrih.

⁵⁶ N. M. Brooks, »Developing the Periodic Law: Mendeleev's Work During 1869–1871«, *Foundations of Chemistry*, 4, 2002, str. 127–147.

⁵⁷ E. R. Scerri, *The Periodic Table: Its Story and Significance*, Oxford University Press, New York 2006.

ta in pravila za vrnitev nazaj k realnemu objektu.«⁵⁸ Mendeljejev je s teoretičnega vidika napravil izreden preskok: iz množice lastnosti, ki jih imajo kemijski elementi, je znal poiskati tiste, ki bi lahko tvorile bazo klasifikacijskega sistema in nato z njihovo pomočjo zgradil teoretično reprezentacijo lastnosti teh elementov. Prav abstrahiranje manjšega niza lastnosti iz domala nepregledne množice fizikalno-kemijskih lastnosti, ki pripadajo realnim objektom, predstavlja enega izmed poglavitnih vidikov teoretičnega mišljenja. Mendeljejev je na osnovi svoje sheme uspel napovedati tudi obstoj in lastnosti (atomska masa, gostota, vrelišče itd.) do tedaj še neodkritih elementov. Ko so odkrili galij, skandij ter germani, so se njihove dejanske lastnosti odlično ujemale s teoretično napovedanimi.⁵⁹ Vsaka dobra teorija (ali model) ima napovedovalno zmožnost.

Periodni sistem kemijskih elementov predstavlja svojevrstno osnovo za razlago sveta okoli nas.⁶⁰ »Malokrat izpostavljeni atribut periodnega sistema je ta, da zadeva holistični in vsevključujoči aspekt kemije, saj zajema vse elemente ter poleg tega osvetljuje plast za plastjo povezave med elementi.«⁶¹ Pomen kemije med naravoslovnimi znanostmi je videti v tem, da priskrbi povezave med materialnim svetom okoli nas (živo in neživo naravo) in lastnostmi elementov periodnega sistema. Način, kako se kemijski elementi medsebojno povezujejo v kompleksnejše entitete (molekule) ter kako se te entitete nato prilagajajo in razvijajo na molekularnem nivoju, predstavlja neke vrste naravno selekcijo.⁶²

⁵⁸ R. Vihalemm, »Are Laws of Nature and Scientific Theories Peculiar in Chemistry? Scrutinizing Mendeleev's Discovery«, *Foundations of Chemistry*, 5, 2003, str. 7–22.

⁵⁹ E. R. Scerri, »Predictions and the Periodic Table«, *Studies in History and Philosophy of Science*, 32, 2001, str. 407–452.

⁶⁰ Po standardnem kozmološkem modelu sestavlja naše vesolje le štiri odstotke barionske in običajne snovi, zgrajene iz elementov periodnega sistema. Ti 4 % so (zaenkrat) predmet kemije ... Glej npr.: A. Gomboc, »Iz česa je vesolje?«, *Proteus*, 74, 2011, str. 55–62. (Bralcu, ki ga zanima vesolje, priporočamo tudi ogled dokumentarne serije »Wonders of the Solar System« (BBC/ Science Channel, 2010).)

⁶¹ E. Scerri, »Explaining the Periodic Table, and the Role of Chemical Triads«, *Foundations of Chemistry*, 2010, 12, str. 69–83.

⁶² Govorimo lahko o kemijskem darvinizmu. To je še zlasti očitno v supramolekularnih sistemih, kjer imamo opravka z reorganizacijo, dekonstrukcijo ter rekonstrukcijo molekularnih komponent, ki v toku prilagoditvene ('evolucijske') dinamične poti pripeljejo do 'najboljše' samoorganizirajoče se strukture.

Znanje, ki ga producira kemija, in zakoni, s katerimi razlaga svet, običajno ne razlagajo sveta v smislu temeljnih zakonov fizike. Poskusi, da bi izpeljali zakon o periodičnih lastnostih kemijskih elementov s pomočjo kvantne mehanike, do sedaj še niso rodili plodnih sadov, niti niso bili uspešni matematični pristopi, osnovani na teorijah grup, podobnosti itn. Reduktivni pristopi, ki želijo pokazati, da lahko kemijske koncepte (npr. koncept kemijske vezi, aromatičnosti, molekulske strukture, kiralnosti itd.) izpeljemo iz osnovnejših zakonov fizike (npr. kvantne mehanike oziroma kvantne elektrodinamike), so precej neprepričljivi.⁶³ Ti koncepti imajo pomen le na kemijskem nivoju. Če epistemološka redukcija ni uspešna (tj. vseh kemijskih konceptov in zakonov ne moremo izpeljati iz zakonov fizike), pa vseeno ostaja vprašanje ontološkega statusa kemije. Ali lahko neki dogodek opišemo tako s kemijskega kot s fizikalnega vidika, ne da bi pri tem morali dati enemu izmed njih večjo ontološko veljavo, postulirati obstoj ene same 'pravilne' ontologije?⁶⁴

Z internalistične perspektive [...] ne obstaja način za opis stvari kot 'dejanjsko so' [*as they really are*]: do realnosti vedno dostopamo le s pomočjo naših konceptualnih shem; noumenalna ontologija ne obstaja. Če se odpovemo pogledu s pozicije Boga [*God's point view*], potem ne obstaja privilegirana perspektiva in vsi opisi imajo enako stopnjo objektivnosti. Zato ne moremo spre-

⁶³ J. van Brakel, »Chemistry and Physics: No Need for Metaphysical Glue«, *Foundation of Chemistry*, 12, 2010, str. 123–136. – Nobelovec Jean-Marie Lehn je malce provokativno pripomnil, da je fizika do kemije to, kar so zakoni akustike do Beethovnovih kvartetov (s pripisom: »En toute amitié (respectueuse)!«) (J.-M. Lehn, »Vers la matière complexe: Chimie? Chimie!«, *Reflects de la Physique*, 23, 2011, str. 2–3.)

⁶⁴ Z ontološkega vidika bo redukcija makroskopskega sistema z besednjakom njegovih mikroskopskih konstituant uspešna, če nam uspe sistem razstaviti na krajevno-časovne komponente in če bomo uspeli najti kavzalno odvisnost makroskopskih lastnosti od mikroskopskih lastnosti. Definicija makroskopskih konceptov z besediščem mikroskopskih konceptov ter semantična odvisnost izpeljave zakonov, ki opisujejo vedenje makroskopskih zakonov, od zakonov, ki vladajo mikro svetu, pa je stvar epistemološke redukcije. (G. K. Vemulapalli in H. Byerly, »Remnants of Reduction«, *Foundations of Chemistry*, 1, 1999, str. 17–41.) – Richard Bader (oče teorije 'atomov v molekulah' (*quantum theory of atoms in molecules*, QTAIM); glej npr. R. F. W. Bader, *Atoms in Molecules: A Quantum Theory*, Clarendon Press, Oxford 1994) vztraja v prepričanju, da je kemijske koncepte elektronegativnosti, resonance, nevznih in steričnih interakcij itd. ter koncepte, izražene v teorijah valenčne vezi in teorijah molekularskih orbital, moč 'izpeljati' iz QTAIM, s čemer je redukcija kemije na fiziko dokazana (R. F. W. Bader, »Definition of Molecular Structure: By Choice or by Appeal to Observation«, *Journal of Physical Chemistry A*, 2010, 114, str. 7431–7444; »On the Non-Existence of Parallel Universes in Chemistry«, *Foundations of Chemistry*, 2011, 13, str. 11–37). Po mojem prepričanju zadeva ni tako preprosta ...

jeti, da t. i. fundamentalne teorije opisujejo realnost takšno, kot je v sebi [*as it is in itself*] – tj. noumenalne realnosti –, saj so tudi te teorije konceptualne sheme, preko katerih vznikajo relativne ontologije. [...] S filozofskega stališča živimo v raznoliki [*diversified*] pojavni [*fenomenal*] realnosti, organizirani na več ontoloških ravneh, od katerih je vsaka ontološko in, posledično, netrivialno povezana [*interconnected*] z ostalimi ravnimi. [...] Emergentne lastnosti niso zgolj konstrukti, reduktibilni na eno samo ontologijo. Ta nereduktibilni pogled plastovite [*stratified*] realnosti predstavlja filozofsko ogrodje, ki nam omogoča braniti ontološko avtonomijo kemijskega sveta.⁶⁵

Če se vrnemo k Mendeljevemu periodnemu sistemu: ali ni v njem skrit osnovni vzorec emergence, ki omogoča kemijsko razumevanje?⁶⁶ »Če z emergenco razumemo manifestacijo katerekoli lastnosti v celoti, ki nima kvalitativnega analoga v svojih delih, potem molekule predstavljajo primer emergence.«⁶⁷ V lastnostih kisika (O₂) in ozona (O₃) obstaja velika kvalitativna razlika, čeprav se molekuli razlikujeta le za en sam atom kisika ...⁶⁸

Kemija je umetnost substanc. Klasični časi kemije so imeli opravka predvsem s sintezo novih spojin oziroma s transformacijo obstoječih ter z njihovo karakterizacijo; sinteza molekul se ukvarja z vprašanji, kako s pomočjo tvorbe (zlasti) kovalentnih vezi iz manjših gradnikov pripraviti kompleksnejše substance. A nekatere molekule (ali njihovi deli) pod določenimi pogoji spontano tvorijo agregate, ki kažejo veliko mero urejenosti.⁶⁹ S primerno manipulacijo interakcij, ki vežejo gradnike tovrstnih skupkov, lahko celo shranjujemo informacijo na molekularni ravni, s čimer supramolekularna kemija postaja kemija molekularnih

⁶⁵ O. Lombardi in M. Labarca, »The Ontological Autonomy of the Chemical World«, *Foundations of Chemistry*, 7, 2005, str. 125–148.

⁶⁶ J. F. Salmon, »Emergence in Evolution«, *Foundations of Chemistry*, 11, 2009, str. 21–32. Avtor trdi, da periodni sistem elementov izpolnjuje štiri pogoje znanstvenega ogrodja emergence: ontološki monizem, pojav novih kavzalnih vplivov, navzdolnje [*downward*] vzročnosti ter nepredvidljivosti [*unpredictability*], na katero naletimo na novih ravneh eksistence.

⁶⁷ G. K. Vermalupali, »Property Reduction in Chemistry: Some Lessons«, *Annals of the New York Academy of Sciences*, 988, 2003, str. 90–98.

⁶⁸ O vprašanjih emergence in kemijske supervenience glej npr.: P. L. Luisi, »Emergence in Chemistry: Chemistry as the Embodiment of Emergence«, *Foundations of Chemistry*, 4, 2002, str. 183–200; M. Newman, »Chemical Supervenience«, *Foundations of Chemistry*, 10, 2008, str. 49–62.

⁶⁹ J.-M. Lehn, *Supramolecular Chemistry: Concepts and Perspectives*, VCH, New York 1995.

informacij.⁷⁰ Samoorganizacija molekul v kompleksnejše entitete predstavlja predpogoj za razvoj življenja, poleg tega pa so takšni agregati tudi tehnološko zanimivi (fotonika, elektronika, prenos energije, zdravilnih učinkovin, genov ...).⁷¹ »Končni cilj [supramolekularne kemije] je v samoorganizaciji združiti oblikovanje [*design*] in izbor [*selection*], z namenom doseči samooblikovanje [*self-design*], kjer bo s funkcijo narekovan izbor med primernimi dinamičnimi vrstami generiral optimalno organizirano in funkcionalno entiteto.«⁷² Kemija stoji danes pred nalogo odgovoriti na ontogenetsko vprašanje, tj., kako je v času razvoja vesolja snov postala kompleksna (kar je privedlo do evolucije biološkega sveta), ter na epigenetsko vprašanje, tj., kakšne nove in višje oblike kompleksnosti snovi se lahko še razvijejo.⁷³ Razlika med posameznimi kemijskimi entitetami, ontološkimi enotami, je v njihovi kompleksnosti (raven atomov, raven molekul, biološka raven ...).⁷⁴ Hrvoj Vančik⁷⁵ razlikuje strukturno kompleksnost (sistemi, ki ohranjajo energijo [*conservative systems*] in so v termodinamičnem ravnotežju; atomi, molekule, supramolekularni agregati ...) ter dinamično kompleksnost, ki vključuje sisteme, ki izgubljajo energijo [*dissipative systems*] in za katere je značilno, da niso v termodinamičnem ravnotežju (npr. oscilirajoče reakcije, biološke celice). Interakcije, ki delujejo med entitetami na posamezni ravni kom-

⁷⁰ Načrtujemo lahko samoorganizirajoče sisteme, ki so neke vrste molekulski računalniki, roboti: cf. M. Canrad, »Emergent Computation Through Self-Assembly«, *Nanobiology*, 2, 1993, str. 5–30; P. W. K. Rothmund, »Using Lateral Capillary Forces to Compute by Self-Assembly«, *Proceedings of the National Academy of Sciences, U.S.A.*, 2000, 97, str. 984–989; Y. Benenson et al., »Programmable and Autonomous Computing Machine Made of Biomolecules«, *Nature*, 414, 2001, str. 430–434; H. Wei et al., »Sambot: A Self-Assembly Modular Robot System«, *IEEE/ASME Transactions on Mechatronics*, 16, 2011, str. 745–757.

⁷¹ G. M. Whitesides in M. Boncheva, »Beyond Molecules: Self-Assembly of Mesoscopic and Macroscopic Components«, *Proceedings of the National Academy of Sciences, U.S.A.*, 99, 2002, str. 4769–4774.

⁷² J.-M. Lehn, »Toward Complex Matter: Supramolecular Chemistry and Self-Organisation«, *Proceedings of the National Academy of Sciences, U.S.A.*, 99, 2002, str. 4763–4769.

⁷³ Prav tam. (Glej tudi druge prispevke te tematske številke PNAS, vol. 99, no. 8 (2002).)

⁷⁴ Giuseppe Del Re govori o ravneh kompleksnosti [*level of complexity*] kemijskih entitet. Posamezna raven kompleksnosti predstavlja niz entitet, ki so zgrajene iz entitet nižjih ravni kompleksnosti, npr. atomi so iz subatomarnih delcev, molekule iz atomov, supramolekularni agregati iz molekul itd. (G. Del Re, »Ontological Status of Molecular Structure«, *HYLE – International Journal for Philosophy of Chemistry*, 4, 1998, str. 81–103.)

⁷⁵ H. Vančik, »Philosophy of Chemistry and Limits of Complexity«, *Foundations of Chemistry*, 5, 2003, str. 237–237.

pleksnosti, pojemajo z naraščajočo ravnjo (kovalentne, ionske itd. vezi v molekulah so močnejše od vodikovih vezi, van der Waalsovih, Coulombskih, hidrofobnih itd. interakcij, ki povezujejo molekule v kompleksnejših entitetah). Na osnovi teh 'pojemajočih' interakcij [*diminishing interactions*] Vančik uvede zgornjo limito strukturne kompleksnosti, kar pomeni, da strukturna kompleksnost ne more naraščati *ad infinitum*. Po drugi strani pa dopušča (vsaj načeloma), da dinamična kompleksnost lahko raste preko vseh mej, saj lahko sistem vedno nadgradimo tako, da vanj integriramo dodatni podsistem. »Ljudje kot opazovalci celotnega vesolja se pojavijo v tistem delu, ki je blizu limiti strukturne kompleksnosti. Tu lahko vesolje smatramo kot 'uroboros', samoorganiziran in z vsemi možnimi ravnemi kompleksnosti. Zgodovinski koncept, ki predstavlja ozadje tradicionalne kozmologije, postane le poseben primer.«⁷⁶ In vendar: so naši možgani res limita, ki jo kompleksnost lahko doseže?

Pri vsem tem pa se postavlja še eno nerešeno vprašanje: zakaj so entitete, ki tvorijo kompleksnejše agregate, ravno takšne, da omogočajo tvorbo entitet na višjih ravneh? Zakaj je narava konstituant (struktura itd.) ravno takšna, da omogoča med konstituantami ravno takšne interakcije, ki vodijo do stabilnih kompleksnejših struktur? Dodajmo v epruveto sestavne dele virusa, premešajmo in dobili bomo virus; to je enako nepredstavljivo kot zamisliti si, da se bo iz gradbenega materiala, vrženega v zrak, sestavila katedrala. Ampak kako je prišlo do oblikovanja molekul, ki tvorijo virus? Vprašanje ima nekaj sorodnosti s kozmološkim vprašanjem dobre naravnosti osnovnih fizikalnih konstant.⁷⁷ Morda predstavlja pot k rešitvi te uganke tudi kemijska teorija z ustreznimi modeli, ki pa verjetno ne smejo graditi od spodaj navzgor, temveč zaobjeti koncept nižje ravni z višje perspektive ...⁷⁸

⁷⁶ Prav tam. (Citirana misel je hibrid antropičnega načela ter predpostavke o limiti strukturne kompleksnosti.)

⁷⁷ Pomislek o zgoraj postavljenem vprašanju dolgujem M. Uršiču. Bralcu toplo priporočamo, da seže po knjigi: M. Uršič, *Daljna bližina neba: človek in kozmos*, Cankarjeva založba, Ljubljana 2010. Ob prebiranju o kozmoloških vprašanjih, bomo uzrli veliko konceptov, ki smo se jih v tem prispevku zgolj bežno dotaknili (redukcionizem, holizem, emergenca, supervenienca, vloga teorije, modela, eksperimenta ...).

⁷⁸ Za opis samoorganizacije virusov obstaja več modelov različnih kompleksnosti, ki pa skušajo pojav samoorganizacije razložiti na osnovi lastnosti entitet nižje ravni kompleksnosti in torej ne morejo odgovoriti na zastavljeno vprašanje (cf. npr. M. F. Hagan in D. Chandler, »Dynamic

Teoretično zanimiv in do danes še ne povsem razrešen problem⁷⁹ 'organizacije' je tudi t. i. problem zvijanja proteinov [*protein folding*]. Subtilne interakcije med posameznimi aminokislinami, ki sestavljajo protein, ter molekulami topila vodijo do tridimenzionalne strukture proteina, ki je biološko aktivna. Poglavitno vprašanje je, kateri so mehanizmi, ki vodijo do native oblike ter kako lahko na osnovi poznavanja aminokislinskega zaporedja napovemo pravilno 3D-strukturo. Denimo, da je protein sestavljen iz stotih aminokislin, potem se lahko 'zviije' na 3²⁰⁰ različnih načinov, od katerih je navadno le ena oblika biološko aktivna. Očitno je, da mehanizem zvijanja ne poteka naključno, saj četudi bi lahko vsake kvadrilijon sekunde (10^{-15} s) protein zavzel drugo konformacijo, bi za dosego prave konformacije potreboval približno 10^{80} sekund, kar pa je za okoli šestdeset velikostnih razredov več od starosti vesolja. Eksperimentalni podatki kažejo, da se proteini zviijejo v časovnem obdobju, ki v najslabšem primeru ne presega nekaj sekund. V grobem obstajata za modeliranje zvijanja dva pristopa: t. i. *ab initio* model na osnovi dobro definiranih sil med posameznimi deli proteina določi nativno strukturo tako, da poišče tisto konformacijo, ki ima najnižjo energijo. Po drugi strani se homologni modeli lotijo problema tako, da proučevani protein primerjajo z že znanimi strukturami proteinov s podobnim aminokislinskim zaporedjem. Z naraščajočo zmogljivostjo računalnikov postajajo *ab initio* modeli učinkovitejši, čeprav še ne prekašajo homolognih.

Pathways for Viral Capsid Assembly», *Biophysical Journal*, 91, 2006, str. 42–54). – Zanimivi so tudi rezultati raziskav, ki jih vodi dr. S. Glotzer. Njena skupina je simulirala vedenje sistemov raznoraznih geometrijskih teles, med katerimi (z izjemo togega odboja; tj. nepenetrabilnosti teles) ni bilo nobenih interakcij. Velika večina od skupno 146 geometrijskih teles je v določenem območju zasedenosti prostora tvorila samoorganizirajoče strukture! (Delo še ni objavljeno in je bilo predstavljeno na *8th Liquid Matter Conference*, Sept. 6–10, 2011 (Dunaj).)

⁷⁹ R. F. Service, »Problem Solved (sort of)«, *Science*, 321, 2008, str. 784–786.

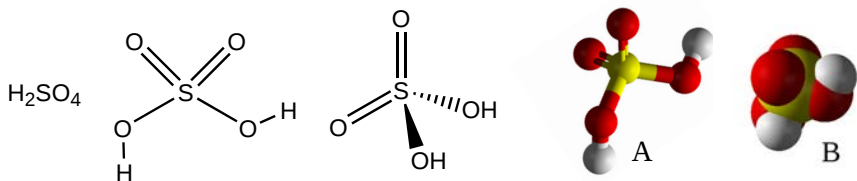
* * *

*Narava v ljubosumju svojem
 lepote skriva nam neznane,
 ne bomo jih dosegli s strojem,
 dokler razum jih ne ugame.⁸⁰*

Vsak, ki se je v šoli kdaj srečal s kemijo, se spomni kemijskih formul, jezika kemije (glej sliko 4).⁸¹ Ljudje so kemijskim substancam sprva podelili imena; danes za tovrstna poimenovanja uporabljamo izraz 'trivialno ime'. Pri tvorbi imen so se v alkimističnih časih opirali zlasti na lastnosti substanc in na njihov videz. Berzeliusu je leta 1814 prvemu uspelo uvesti v poimenovanje sistematiko, ki se je opirala na rezultate kvantitativne analize ter na Lavoisierovo definicijo pojma element. Danes je sprejeta sistematična nomenklatura poimenovanja kemijskih substanc, ki jo od leta 1921 uvaja IUPAC in katere glavni namen je poimenovati substanco na osnovi sistematične razčlenbe glede na njene sestavne dele (fragmente). Imena po IUPAC so nedvoumna, a trivialnih imen niso povsem izpodrinila iz uporabe, saj so običajno precej nerodna in dolga. Ob koncu 18. stoletja se je za opis kemijskih substanc začel uporabljati kompaktnejši zapis, sestavljen iz črkovnih oznak za elemente (t. i. formula, ki predstavlja lingvistični simbol substance). Liebigov predlog iz leta 1834 se upošteva še danes: empirična formula spojine je zbir črkovnih simbolov elementov, ki spojino sestavljajo, pri čemer stehiometrijske faktorje pišemo podpisane k simbolu elementa (npr. H_2SO_4 , kar pome-

⁸⁰ Vladimir Solov'ev, »Ирподо с крпачомы своеті« (1872), prevod naveden po: F. Križanič, *Nihalo, prostor in delci*, Slovenska matica, Ljubljana 1982, str. 16.

⁸¹ *Ko čas odšteva mi še zadnja leta / in pišem test o smislu svojih dni, / izpolnim s križcem okence poeta / in s križci okenca še več stvari. / A spet in spet zaskoči me vprašanje, / ki pamet z nelagodjem mi vznemiri: / zakaj so v šoli vsilili mi v znanje / kup formul à la ha-dva-es-o-štiri? [...]* Bil je nek fant, ki se je z znanjem mučil / še pri kemiji mu je dobro šlo. / A plavati se nikdar ni naučil / in grob njegov postal je H_2O . / Prav vse na urniku za pet je znal, / vse formule in jezik marsikteri, / a plavanje bi mu prišlo bolj prav / kot H_2O in H_2SO_4 . [...] *Da v nič ne šla bi piflanja nekdanja, / zavržana v sulfate in sulfide, / sem se domislil starega spoznanja, / da vsaka stvar čez sedem let prav pride. / Tako vse svoje znanje iz kemije / – naj mi profesor v raju ne zameri – / sem zbral v te verze šolske poezije / z naslovom čudnim H_2SO_4 .* (J. Menart, » H_2SO_4 «, v: *Spomin*, Mladinska knjiga, Ljubljana 2005, str. 32–34.)



Slika 4: Žveplova (VI) kislina. Empirična in strukturni formulii (levo) ter tridimenzionalni modelni reprezentaciji (desno), t. i. 'ball-and-stick' (A) ter 'space-filling' (B) molekulski grafiki.

ni, da je molekula sestavljena iz dveh atomov vodika, enega atoma žvepla ter štirih atomov kisika).⁸²

V drugi polovici devetnajstega stoletja se je razvila strukturna teorija,⁸³ ki tudi danes predstavlja eno glavnih konceptualnih shem kemije. Teorija ne omogoča le vpogleda v fino strukturo molekul, temveč je v oporo tudi pri tehnoloških izzivih, pri katerih imamo opravka z manipulacijo molekul. Skupaj s sistematično klasifikacijo substanc na osnovi njihovih lastnosti ter z razvojem eksperimentalnih tehnik, ki omogočajo strukturne raziskave, je teorija pripeljala do uvedbe strukturnih diagramov, formul, dvodimenzionalnih reprezentacij molekul (slika 4, levo). Takšno grafično reprezentacijo kemijske strukture lahko smatramo za univerzalni jezik kemije.⁸⁴ Strukturne formule in tridimenzionalne predstavitev molekul (slika 4) služijo kot pomagala pri dojemanju strukture molekul v terminih makroskopskega opisa sveta; na 2D-strukturi predstavlja črka atom določenega elementa, črtica, ki povezuje dva elementa, pa predstavlja kemijsko vez (vezne elektrone). V 3D-representaciji je atom elementa npr. kroglica, vez pa palčka ali vzmet

⁸² Za zanimivo diskusijo glede imena in empirične formule, kjer na primeru stavka »voda je H₂O« avtor pokaže, da 'je' ne moremo jemati v smislu identitete, glej: J. Simonian, »The Paradoxes of Chemical Classification: Why 'Water is H₂O' is Not an Identity Statement«, *Foundations of Chemistry*, 7, 2005, str. 49–56.

⁸³ Glej npr. A. J. Rocke, »The Theory of Chemical Structure and its Applications«, v: *The Modern Physical and Mathematical Sciences*, M. J. Nye (ur.), Cambridge University Press, Cambridge 2002, str. 255–271.

⁸⁴ O načinu sporočanja in sporazumevanja živih organizmov s pomočjo 'govorice' molekul glej: M. Tišler, *Jezik molekul. Kemično sporočanje in sporazumevanje*, Slovenska akademija znanosti in umetnosti, Ljubljana 2008.

med dvema kroglicama (t. i. 'ball-and-stick' oziroma 'ball-and-spring' model). Strukturni diagrami so zato *modeli* realnih molekul;⁸⁵ hipoteza o molekulski strukturi pravi, da je molekula zbir atomov, ki eksistirajo v molekuli kot samostojne entitete trirazsežnega realnega prostora in ki so med seboj povezani s kemijskimi vezmi. Kot smo že omenili, te hipoteze ni moč izpeljati iz zakonov kvantne mehanike; na kvantnem nivoju klasična (makroskopska) slika strukture namreč izginje. Zgovorno pa je dejstvo, da so eksperimentalni rezultati v skladu s strukturno hipotezo ter z zgoraj opisanim 3D-modelom strukture. Ne glede na dejstvo, ali je tisto, kar vemo o molekulah vsaj deloma del tega, kar molekula v resnici je, bo naše znanje vedno vključevalo reprezentacijo, ki jo je ustvaril naš duh.⁸⁶ Strukturne formule niso zgolj slikovne reprezentacije molekul, ampak veliko več: substanco umeščajo v širšo mrežo kemijskih relacij z ostalimi substancami. Omogočajo nam misliti reakcijske mehanizme, torej načine, kako sintetizirati substanco iz drugih substanc, ter načine, po katerih lahko dana substanca reagira z ostalimi.⁸⁷ Joachim Schummer zato pravi, da je »znakovni jezik kemije pravzaprav ena izmed najzmogljivejših napovedovalnih teorij v znanosti nasploh.«⁸⁸ Znak, ki ga simbolizira strukturna formula, je seveda treba interpretirati v okviru določene teorije, če želimo iz njega izluščiti hoteno informacijo, sicer je formula zgolj piktografska slika.

Znanstvena veljava strukturnih formul ni le v tem, da združuje dana empirična dejstva, temveč da privleče na plano nova. Omogoča nam razmišljati o problemih soodvisnosti, povezav ter formacij reda, ki predhodijo neposredne-

⁸⁵ Prva številka šestega letnika revije *HYLE – International Journal for Philosophy of Chemistry* (2000) je v celoti posvečena modelom molekul. (Modelom v kemiji sta posvečeni še drugi številki letnika 5 (1999) in 6 (2000).)

⁸⁶ Zanimivo razpravo o pogledu, ki nam ga ponuja kvantna mehanika o fizikalni resničnosti, najdeš v knjigi *Paradigms Lost: Tackling the Unanswered Mysteries of Modern Science* (J. L. Casti, 1989). Sedmo poglavje z naslovom »Kako resničen je 'resnični svet'?« je prevedeno v *Razpol*, 8, 1994, str. 119–198. Glej tudi: P. Mulder, »Are Orbitals Observable?«, *HYLE – International Journal for Philosophy of Chemistry*, 17, 2011, str. 24–35.

⁸⁷ Podobnost naših predstav o interakcijah med molekulami in načinom interakcij med ljudmi je nobelovca Roalda Hoffmanna pesniško navdahnila. Eno svojih pesmi zaključuje z verzom: »Men (and women) are not / as different from molecules / as they think.« (R. Hoffmann, »Men and Molecules«, *Synthesis*, 7, 1984, str. 43.)

⁸⁸ J. Schummer, »The Chemical Core of Chemistry I: A Conceptual Approach«, *HYLE – International Journal for Philosophy of Chemistry*, 4, 1998, str. 129–162.

mu opazovanju. S tem postane eden izmed najbolj fascinantnih načinov tega, kar je Leibniz imenoval 'logika iznajdbe', *logica inventiones*.⁸⁹

Ker molekul ne moremo neposredno opazovati,⁹⁰ je njihova konceptualizacija teoretične narave. Osnovana je na izbiri in definiciji parametrov, ki jo določajo.⁹¹ Struktura, ki jo določa model, je po drugi strani odvisna od eksperimenta, zato je pri testiranju teoretičnega modela zanesljivost eksperimentalnih metod ključnega pomena.

Če strukturne formule določenih kemijskih substanc pogledamo na enak način, kot to počnemo z objekti našega makroskopskega sveta (jih torej iztrgamo iz kemijskega koncepta), kmalu pridemo do tehnomorfne reprezentacije molekul, ki svoj navdih črpa v mehaničnih in elektronskih napravah. Strukturna formula v tem primeru ne predstavlja več kemijskega modela, temveč model stroja molekularnih dimenzij.⁹²

Z vstopom kvantne in statistične mehanike skozi vrata fizikalne kemije se je v kemiji začela doba molekulskega modeliranja, ki vključuje številne teoretične metode in računske tehnike, ki posnemajo (modelirajo) vedenje molekul.⁹³ Pristop je redukcionističen, saj je osnovan na kvantnomehanskih zakonih oziroma na fizikalnih zakonih gibanja in interakcij med delci sistema. Z razvojem vse zmogljivejših računalnikov postajajo te metode uporabne tudi za opis bolj in bolj kompleksnih sistemov (npr. proteinov). V kvantni kemiji se v glavnem uporabljata dva pristopa: 'ab initio' pristop je primeren za manjše sisteme (npr. dvoatomne molekule), saj skušamo Schrödingerjevo enačbo rešiti karseda natančno (obravnavamo vse elektrone kemijskega sistema) brez uporabe eksperimentalnih podatkov (razen osnovnih fizikalnih konstant). Metoda zahteva izračun ogromnega števila zapletenih večdimenzionalnih

⁸⁹ Prav tam. (Avtor citira: E. Cassier, *Phylosophie der symbolischen Formen*, 1956.)

⁹⁰ Molekula je manjša od valovne dolžine vidne svetlobe, zato je ne moremo videti s pomočjo povečave. Slika, ki jo npr. dobimo s tunelskim mikroskopom, je zato ponovno le teoretični konstrukt. Dojemanje strukture molekule kot njeno intrinzično lastnost, kot smo že omenili, se v sodobni teoretični kemiji postavlja pod vprašaj ...

⁹¹ P. Zeidler, »The Epistemological Status of Theoretical Models of Molecular Structure«, *HYLE – International Journal for Philosophy of Chemistry*, 6, 2000, str. 17–34.

⁹² V. Balzani, A. Credi in M. Venturi, *Molecular Devices and Machines: Concepts and Perspectives for the Nanoworld*, Wiley-VCH, Weinheim 2008.

⁹³ Glej npr. A. R. Leach, *Molecular Modelling: Principles and Applications*, Prentice Hall, Harlow 2001.

integralov in je zato izredno časovno potratna. Pogosto se poslužujemo poenostavitve, ki skrajšajo čas računanja. *Ab initio* računi nam služijo zlasti za preverjanje fizikalnega ozadja. Po drugi strani za večje molekule uporabljamo semiempirične izračune. Eksaktno reševanje valovne enačbe ni več mogoče (obravnavamo le valenčne elektrone) in pri računih si pomagamo z eksperimentalnimi podatki (npr. elektronske afinitete, ionizacijski potenciali) ter s številnimi poenostavitvami (v Hamiltonovi funkciji, v izračunu določenih molekulskih integralov, v valovni funkciji). Rezultati računov so odvisni od izbire parametrov, zato jih običajno vrednotimo primerjalno (primerjamo izračune za vrsto kemijsko podobnih molekul). Semiempirični računi nam služijo zlasti za ugotavljanje elektronske strukture molekul ter pri interpretaciji določenih spektrov. Za biološke molekule, ki so sestavljene iz velikega števila atomov (več sto), je uporaba kvantnokemijskih računov omejena ter osredotočena zlasti na računanje odvisnosti parametrov, ki opisujejo deskriptorje aktivnosti molekule, od konformacije molekule oziroma od njene elektronske strukture.

Pomembni tehniki za simulacijo molekul sta molekulska dinamika ter Monte Carlo; prva je deterministična, druga pa probabilistična.⁹⁴ Obe tehniki lahko slonita na klasični fiziki, lahko pa sta sklopljeni s kvantno teorijo. Molekulska mehanika je računalniška metoda, ki simulira gibanje atomov v molekuli oziroma gibanje posameznih atomov ali molekul v trdnem, tekočem ali plinastem agregatnem stanju. Osnovana je na drugem Newtonovem zakonu gibanja. Za izračun časovnega poteka gibanja simuliranega objekta (objektov) – določitev trajektorije gibanja – moramo poznati sile in hitrosti, saj rešujemo niz diferencialnih enačb drugega reda. Sile, ki delujejo na posamezni atom, navadno izračunamo s pomočjo poprej izbranega polja sil.⁹⁵ Rezultat molekul-

⁹⁴ Glej npr. D. Frenkel in B. Smit, *Understanding Molecular Simulation: from Algorithms to Applications*, Academic Press, San Diego [idr.] 2002.

⁹⁵ V molekulski dinamiki razumemo polje sil običajno kot skupek funkcij ter parametrov, ki jih uporabljamo pri računanju interakcij in ki definirajo, za koliko se lahko spremenijo dolžine vezi oziroma vezni (valenčni in dihedralni) koti molekule v primerjavi z njeno ravnotežno konformacijo. Polje sil običajno vsebuje veliko število empiričnih parametrov ter harmonski približek. Lahko vključuje člene, ki opisujejo interakcije med neveznimi atomi, elektrostatske interakcije, vodikovo vez ter druge strukturne efekte ... Rezultat simulacije je kritično odvisen od polja sil!

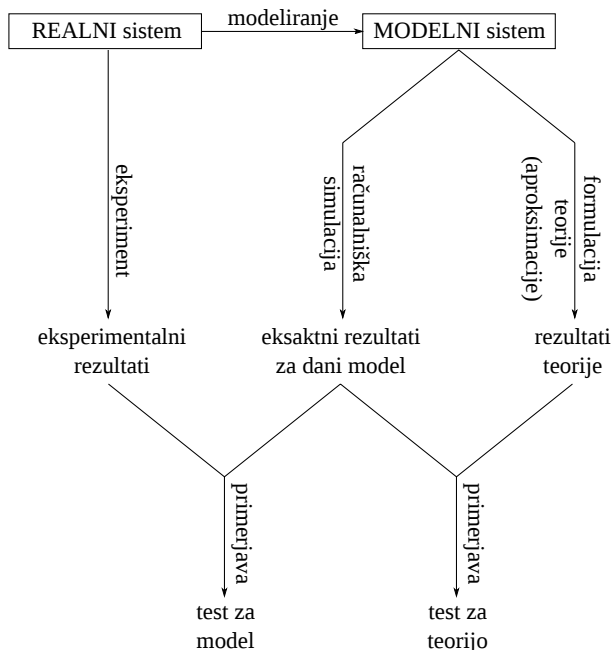
ske dinamike so strukturne, termodinamične in transportne lastnosti sistema. Metoda Monte Carlo je stohastična računalniška simulacijska metoda. Sestoji iz naključnega vzorčenja konformacijskega/konfiguracijskega prostora (npr. molekule). Na osnovi določenih pravil verjetnosti se odločimo, ali bomo energijsko stanje nove konformacije/konfiguracije sprejeli ali ne. Rezultat simulacije Monte Carlo so strukturne in termodinamične lastnosti sistema. Ker čas v simulaciji ne nastopa, transportnih lastnosti ne moremo simulirati.

Računalniki služijo kot orodje za računanje težkih in obsežnih matematičnih operacij pa tudi za grafično predstavitev dobljenih rezultatov (področje t. i. molekulske grafike).⁹⁶ Računalniška kemija je namreč disciplina, ki uporablja matematično-fizikalne metode za izračun lastnosti molekul ali za simulacijo obnašanja molekul. Vključuje npr. načrtovanje sinteze, iskanje po podatkovnih zbirkah, uporabo in izgradnjo kombinatornih knjižnic, molekulsko modeliranje ...⁹⁷ Klasična dihotomija (eksperiment–teorija) je zrasla v trihotomijo (eksperiment–teorija–računalniški eksperiment). V splošnem trojček počne sledeče: z eksperimentom empirično študiramo kemijske substance (npr. analiza, sinteza, fizikalno-kemijske lastnosti). Računalniški eksperiment nam omogoča računanje lastnosti substanc (npr. spektri, strukturne in fizikalno-kemijske lastnosti, kemijska reaktivnost). Teorija igra vlogo interpretacije rezultatov eksperimenta (realnega in računalniškega).⁹⁸ Da bi eksperimentalno opazene lastnosti realnih sistemov lahko razumeli ter jih znali tudi napovedati, stremimo k teoretičnim, modelnim opisom. K dobrim teoretičnim opisom nas pogosto silijo tudi časovne in ekonomske zahteve, saj je račun običajno hitrejši in cenejši od eksperimenta. V procesu modeliranja ustvarimo modelni sistem, ki odgovarja realnemu sistemu. S pomočjo računalniške simulacije (npr. dinamike molekul ali simula-

⁹⁶ Molekulska grafika [*molecular graphics*] vsekakor odpira estetska vprašanja, ki pa se jim na tem mestu ne utegnemo posvetiti. Dve številki revije *HYLE – International Journal for Philosophy of Chemistry* (let. 9, 2003) sta v celoti posvečeni estetiki in vizualizaciji v kemiji.

⁹⁷ Računalniška kemija je izredno uporabna tudi v farmaciji (računalniško osnovano načrtovanje zdravilnih učinkovin, konformacijska in klasterska analiza, doking, kemometrija itd.), saj pomaga pri snovanju učinkovitejših eksperimentov ter njihovi validaciji ter pri procesu iskanja potencialnih zdravilnih učinkovin.

⁹⁸ Glej tudi: R. B. King, »The Role of Mathematics in the Experimental/Teoretical/Computational Trichotomy of Chemistry«, *Foundations of Chemistry*, 2, 2000, str. 221–236.



Slika 5: Relacije med eksperimentom, računalniško simulacijo ter teorijo. (Prirejeno po: M. P. Allen in D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*, Clarendon Press, Oxford 1989, str. 5.)

cije Monte Carlo) dobimo v okviru predpostavljenega modela za količino, ki jo študiramo, eksakten rezultat. Le malo primerov ponuja tudi eksaktno teoretično rešitev, zato so pri razvoju teorije vedno potrebne določene poenostavitve, aproksimacije, predpostavke. Eksakten rezultat računalniške simulacije nam služi kot test za ustreznost teoretičnih aproksimacij in nas vodi k boljšim teoretičnim rešitvam. Primerjava rezultatov simulacije in teorije predstavlja torej test za teorijo. Če je ujemanje rezultatov slabo, moramo popraviti teorijo. A vloga računalniške simulacije je dvojna: poleg validacije teorije nam primerjava rezultatov realnega in računalniškega eksperimenta omogoča ovrednotiti modelni sistem. Če se rezultati računalniške simulacije razlikujejo od eksperimentalnih, nam to sugerira neustreznost modela za opis proučevane lastnosti sistema (glej sliko 5). Ujemanja rezultatov eksperimenta in računa pa ne smemo razumeti zgolj v kvantitativnem smislu, temveč se pogosto za-

dovoljimo z modelom, katerega napovedi se vsaj kvalitativno ujemajo z eksperimentom, tj. model daje pravilne trende v fizikalno-kemijskih lastnostih sistema. Pogosto lahko z uvedbo dodatnih ali spreminjanjem obstoječih parametrov model izboljšamo do te mere, da daje kvantitativno ujemanje z eksperimentom.

Modeli torej ležijo na meji med našimi predstavami o svetu ter objekti naših empiričnih raziskav. So (mentalni) konstrukti, ustvarjeni z namenom pojasniti določen pojav, fenomen.⁹⁹ V kemiji z modeli pojasnujemo kemijske pojave, hkrati pa nam služijo kot orodja za napoved obnašanja kemijskih sistemov pod določenimi pogoji, podanimi s stanjem okolice. Izgradnja modelov (modeliranje) ima osrednjo vlogo pri razvoju znanstvenega spoznanja, pri čemer lahko modele, ki so produkt tovrstne aktivnosti, razumemo kot vezne člene med teorijo in izkustvenim svetom (slika 5). Modeliranje je običajno kompleksen proces in mnogokrat tudi ciklični; začnemo z določenimi preliminarnimi interpretacijami karakteristik objekta, ki ga proučujemo, kar nam omogoča, da s tem sam objekt bolje definiramo. Iterativni cikel je namenjen temu, da s sosledjem aproksimacij nazadnje pridemo do modela, ki zadovoljivo opiše/pojasni proučevani pojav (objekt). S procesom redukcije informacij, ki so nam na voljo o objektu, dobimo nazadnje model, ki temelji zgolj na manjšem številu za objekt karakterističnih aspektov. Modeliranje ni stvar učbenikov: »Ko v znanstvenih tekstih iščemo navodila, ki bi nam povedala, kako graditi modele, ugotovimo, da je ponudba skopa. Izkaže se, da za modeliranje ni splošnih napotkov. Nekateri bodo trdili, da je to zato, ker modeliranje ni proceduralno, ker se ga moramo učiti, ne pa poučevati [*has to be learned not taught*].«¹⁰⁰

Modeliranje [...] je posredno teoretično raziskovanje fenomenov realnega sveta s pomočjo modelov. Poteka v treh fazah. V prvi fazi teoretik zgradi model. V drugi fazi ga analizira, izboljšuje in dodatno artikulira njegove lastnosti

⁹⁹ »Model je nekaj, kar občudujemo oziroma posnemamo, vzorec [*pattern*], tipičen primer [*a case in point*], matrica [*type*], prototip, primerek [*specimen*], maketa [*mock-up*], matematični opis – skoraj vse od gole blondinke do kvadratne enačbe – in ima lahko s tistim, kar posnema, skoraj kakršnokoli simbolno zvezo.« (N. Goodman, *Languages of Art. An Approach to a Theory of Symbols*, Hackett Publishing, Indianapolis 1976, str. 171.)

¹⁰⁰ M. Morrison in M. S. Morgan, *Models and Mediating Instruments*, Cambridge University Press, Cambridge 1999, str. 12.

in dinamiko. Nazadnje, v tretji fazi, določi zvezo med modelom in svetom, če je takšna določitev ustrezna. Če je model dovolj podoben svetu, potem je, posredno, analiza modela hkrati tudi analiza lastnosti fenomenov realnega sveta. Modeliranje tako vključuje reprezentacijo in analizo fenomenov realnega sveta s pomočjo modelov.¹⁰¹

Pri modeliranju se moramo najprej odločiti, kateri realni fenomen bomo z modelom proučevali, nato pa, kako bomo izbrani fenomen modelno opisali. Določiti moramo tudi kriterije, s katerimi bomo napovedi modela vrednotili. Eden težjih aspektov modeliranja pa je prav gotovo določiti kriterije, ki nam bodo povedali, ali je naš model adekvaten za opis realnih fenomenov, tj., ali struktura modela ustreza kavzalni strukturi realnih fenomenov.¹⁰² Relacija model–realni svet ni ena sama niti ni avtomatična.¹⁰³

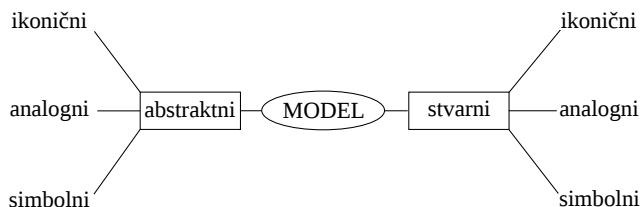
Modele v kemiji lahko klasificiramo na *stvarne* in na *abstraktne*, le-te pa dalje na *ikonične*, *analogne* in *simbolne* (glej sliko 6).¹⁰⁴ Lesene kroglice, povezane z lesenimi palčkami, ki odgovarjajo razporeditvi atomov in vezi v molekuli (t. i. 'ball-and-stick' model) je stvarni (materialni) model molekule, Z-matrika, ki podaja opis atomov v molekuli s pomočjo njihovih internih koordinat, pa je abstraktni model molekule. Za opis istega realnega fenomena (npr. vezavo encima na substrat) lahko včasih uporabimo tako stvarni kot abstraktni model. Leta 1894 je Emil Fisher predlagal komplementarnost geometrijskih oblik encima in substrata, kar poznamo danes pod imenom model 'ključ-ključavnica' (*Schlüssel-*

¹⁰¹ M. Weisberg, »Who is a Modeler?«, *The British Journal for the Philosophy of Science*, 58, 2007, str. 207–233.

¹⁰² Prav tam.

¹⁰³ Voda in vodne raztopine igrajo v (bio)kemičnih sistemih izredno pomembno vlogo. Ne glede na to, da je voda sestavljena zgolj iz treh atomov, ostaja modeliranje sistemov, ki jo vključujejo, trd teoretični oreh. Obstajajo modeli, ki vodo obravnavajo kot eno- ali dvodimanzionalno entiteto ter realistični tridimenzionalni molekularni modeli. 1D- in 2D-modela se vsekakor zdita nerealistična za opis realne vode. Če želimo z njima izračunati termodinamične količine in jih primerjati z eksperimentalnimi rezultati, sta 1D in 2D-modela dejansko neuporabna. Če pa je naš cilj razumeti izjemne lastnosti, ki jih ima voda, na molekularnem nivoju, pa sta takšna modela izredno koristna. (A. Ben-Naim, *Molecular Theory of Water and Aqueous Solutions*, World Scientific, New Jersey [idr.] 2009.)

¹⁰⁴ Za obširnejšo analizo glej: J. Tomasi, »Models and Modelling in Theoretical Chemistry«, *Journal of Molecular Structure (Theochem)*, 179, 1988, str. 273–292; »Towards 'chemical congruence' of the Models in Theoretical Chemistry«, *HYLE – International Journal for Philosophy of Chemistry*, 5, 1999, str. 79–115.

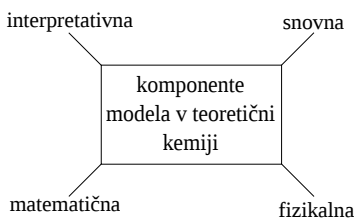


Slika 6: Tipologija modelov.

-*Schloss-Model*). Model je abstrakten, če pa za encim in substrat uporabimo model 'ball-and-stick', pa gre za stvarni model. Abstraktni modeli v teoretični (računalniški) kemiji prevladujejo, saj gre večinoma za matematiziran opis fenomenov.

Klasifikacija ikonični/analogni/simbolni se nanaša na mero fizične in funkcijske podobnosti modela s tistim, kar reprezentira (referentom). *Ikonični* model je fizično podoben referentu, obstaja podobnost v formi, medtem ko ni nujno, da tudi funkcionira tako kot referent. Model ključ-ključavnica, realiziran s pomočjo reprezentacije molekul s kroglicami in palčkami, je ikonični stvarni model, če pa ga narišemo na papir ali na zaslon računalnika, pa predstavlja ikonični abstraktni model. Za *analogni* model je značilno, da po svoji formi ni nujno, da ustreza referentu, temveč da funkcionira podobno kot referent. Mnogi modeli, ki jih uporabljamo v kvantni kemiji (npr. togi rotator, harmonski oscilator), so abstraktni analogni modeli. Model molekule, ki sestoji iz kroglic, povezanih z vzmetmi, predstavlja stvarni analogni model za opis molekulskih vibracij, medtem ko je model, ki ga za isti namen uporabljamo npr. v simulacijah dinamike molekul, abstraktni analogni model. *Simbolni* model temelji zgolj na podobnosti v funkcioniranju. Večina simbolnih modelov je matematičnih (kvantna kemija, statistična mehanika, termodinamika), a matematizacija ni pogoj.¹⁰⁵ Niz sklopljenih električnih oscilatorjev predstavlja npr. stvarni simbolni model za opis molekulskih vibracij, medtem ko niz sklopljenih diferencialnih enačb za opis tega fenomena označimo kot abstraktni simbolni model. Računal-

¹⁰⁵ Če Mendeljejev periodni sistem lahko smatramo za model, potem gre za nematematični abstraktni simbolni model. V isto kategorijo lahko uvrstimo tudi model molekule iz druge polovice devetnajstega stoletja.



Slika 7: Osnovne komponente modelov, ki se uporabljajo v teoretični kemiji.

niška grafika danes omogoča, da lahko veliko modelov, ki so klasificirani kot analogni oziroma simbolni, prevedemo v ikonične (npr. predstavitev elektronske gostote, ki smo jo dobili iz molekulske valovne funkcije (abstraktni simbolni model), na ekranu računalnika kot 'ball-and-stick' molekula (abstraktni ikonični model)).

Večina modelov v teoretični kemiji ima dve nalogi: omogočiti izračun določenih fizikalno-kemijskih lastnosti snovnega sistema ter omogočiti interpretacijo fizikalno-kemijskih fenomenov. Z znanstvenega in filozofskega vidika je interpretativni potencial modela pomembnejši. Dobri modeli in teorije ne smejo igrati zgolj instrumentalne vloge. Modele v teoretični kemiji lahko razdelimo na štiri komponente (slika 7): snovna komponenta predstavlja materialni del tistega, kar opisuje model, fizikalna komponenta vključuje fizikalne interakcije, s katerimi opisujemo fenomen, matematična pa vključuje vse vidike modela, ki se nanašajo na opis fizikalnih interakcij v snovni komponenti modela. Interpretativna komponenta modela nato združi vse vidike raziskave, ki so potrebni za interpretacijo aplikacije matematične komponente na snovno, glede na določila fizikalne komponente modela.

Obseg prispevka nam ne dopušča, da bi se spuščali v podrobno opisovanje modelov in teorij, ki se uporabljajo v kemiji. Področje je ogromno: od opisovanja narave snovi, kemijskih vezi, kemijskih ravnotežij, kemijske kinetike, do elektrokemije in ... Pripomnimo le, da vsak teoretični pristop nujno pomeni izgradnjo modelnega sveta, ki ga lahko razdelimo na sistem in na njegovo okolico. Natančna definicija, kaj pripada

sistemu in kaj okolici, je nujna za učinkovito teorijo/model, saj je stanje sistema običajno pogojeno s stanjem okolice ...¹⁰⁶ Naloga filozofije je, da ovrednoti teorije in modele (tako zavržene kot obstoječe),¹⁰⁷ naloga kemije pa, da izboljša obstoječe ter priskrbi nove. »Ljudje so dognali že marsikaj, še veliko več pa bo šele treba dognati. In tako bodo prihodnji rodovi spet imeli polne roke dela.«¹⁰⁸ In četudi bo nekoč velika teorija poenotenja res ugledala luč sveta, se zdi, da kemija ne bo ostala praznih rok ...

*Oor universe is like an e'e
Turned in, man's benmaist hert to see,
And swamped in subjectivity.
But whether it can use its sicht
To bring what lies withoot to licht
To answer's still ayont my micht.*¹⁰⁹

¹⁰⁶ Za vprašanja kemijskih konceptov v luči sistemske teorije glej: M. Reiher, »A Systems Theory for Chemistry«, *Foundations of Chemistry*, 5, 2003, str. 23–41; »The Systems-Theoretical View of Chemical Concepts«, prav tam, str. 147–163.

¹⁰⁷ Filozofijo je kemija začela zanimati razmeroma pozno, kar se pozna v številu razprav v primerjavi z razpravami, povezanimi s fizikalnimi ali biološkimi koncepti. Filozofija kemije se razcveti z letom 1994, ko je v Londonu organizirana prva konferenca na to temo. Leta 1995 začne izhajati revija *HYLE – International Journal for Philosophy of Chemistry*, leta 1999 pa še revija *Foundations of Chemistry*. (Glej npr. J. van Brakel, »On the Neglect of the Philosophy of Chemistry«, *Foundations of Chemistry*, 1, 1999, str. 111–174; E. R. Scerri, »Philosophy of Chemistry—A New International Field?«, *Journal of Chemical Education*, 77, 2000, str. 522–525; J. Schummer, »The Philosophy of Chemistry«, *Endeavour*, 27, 2003, str. 37–41; K. Gavroglu, »Philosophical Issues in the History of Chemistry«, *Synthese*, 111, 1997, str. 283–304.) – Pri nas sta se kemija in filozofija šele začeli srečevati.

¹⁰⁸ B. Brecht, *Galileo Galilei*, v: *Šest iger*, Mladinska knjiga, Ljubljana 1993, str. 185.

¹⁰⁹ Hugh MacDiarmid, »The Great Wheel«, v: *Selected Poetry*, Riach, A., in Grieve, M. (ur.), New Directions Books, New York 1993, str. 109. – Približno bi lahko prevedli tako: *Naše je vesolje kot oko, / globini bistva posvečeno, / v subjektivnosti ujeta. / A če vid je dan, / da odkril bi svet onstran – / premajhen sem, povedati ne znam.*