

MASARYKOVA UNIVERZITA

EXCERPTA

Z TEORETICKÉ CHEMIE

MILAN KRATOCHVÍL

Brno 2012

© 2012 Milan Kratochvíl

ISBN 978-80-210-6067-8

DOI: 10.5817/CZ.MUNI.M210-6067-2012

Vědomí, že mnoho užitečných informací najdeme na internetu, vede ke změnám v procesu našeho zapamatování. Spoléháme na to, že za nás potřebné informace shromáždili spolehliví experti na určité věci. Paměť internetu nám umožňuje pamatovat si méně věcí, které jinak musíme nosit v hlavě, protože nám pomáhají orientovat se v problémech naší činnosti. Všechno má samozřejmě druhou stránku a na tuto druhou stránku našeho pohodlí upozorňují psychologové: pokud jsou si lidé jisti, že potřebná informace je na internetu, snižuje se jejich schopnost si tuto informaci zapamatovat. Mají pro to i termín transaktivní paměť (Wegner). Je založena na našem vědomí, že existují externí zdroje úschovny u jiných lidí. Dlouhodobé soubory systémů, které závisí ve svých operacích na sobě navzájem, se doplňují jako paměťové buňky. Informace, o kterých člověk ví, že jsou na síti, si nezapisuje do paměti nijak pečlivě, zato si je ukládá do tzv. externí paměti (ta mu napovídá, kde má příslušnou informaci hledat). Ostatně to věděl profesor F. Herčík dávno před érou počítačů, když mladému biologovi radil Nemusíme si všechno pamatovat, ale musíme si pamatovat, kde to najdeme.

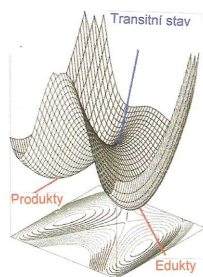
Osobní vyznání.

Za svůj dlouhý život s chemií jsem si od počátečního angažmá v biochemii, pak v organické syntéze, teoretické organické chemii, počítačovém plánování syntéz a matematické chemii uvědomil, že, jak jsem šel životem, v pozadí všech mých tápání v nesporně zajímavých oblastech chemie byla teoretická chemie. A tak se pro mne stala posledním sledovaným oborem, škoda, že tak pozdě. Nebo to tak mělo být...

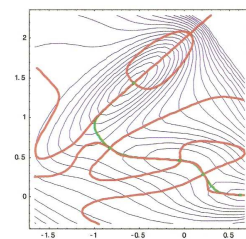
Teoretická chemie je podnětný stále se rozvíjející obor chemie – a se širokým záběrem: vychází z chemie, ale rozkročila se do dalších sfér a je jakousi spojnicí mezi chemií, fyzikou, chemií materiálů, chemickou biologií, biochemií, molekulární biologií a medicínou s jejími metabolickými procesy, interakcemi léků s buňkami, spirálou života. Aplikuje matematické a výpočetní techniky k řešení zásadních problémů zmíněných systémů. Směřuje také „na druhou stranu“ k astrochemii, astrofyzice, do Vesmíru.

Když se vypočítávají oblasti zájmu teoretické chemie, zpravidla se uvádí, že teoretická chemie studuje strukturní a dynamické vlastnosti molekul a molekulárních materiálů využitím prostředků kvantové chemie, rovnovážné a nerovnovážné statistické mechaniky a dynamiky. Výpočty molekulárních orbitalů anorganických a organických molekul, tuhých systémů a povrchů nám přibližují hluboké existující vazby mezi anorganickou a organickou chemií a fyzikou tuhé fáze. Statistická mechanika studuje přechody fází, kritické jevy a styčné plochy mezi chemií a fyzikou tuhé fáze. Jde o porézní materiály, mikroemulze, roztoky polymerů. Sledování toků energie ve vibračně excitovaných molekulách přispívá k mikroskopickému pochopení chemické reaktivity. A nezapomeneme zmínit přínos teoretické chemie pro predikce struktur a dynamiky biomolekul, k rozvíjení tradičních modelů chemické kinetiky a predikce chemické reaktivity metodami *ab initio*. To samozřejmě nevyčerpává všechny možnosti uplatnění teoretické chemie; z doslova tisíců stran časopiseckých sdělení, mnohastránkových separátů, monografií a učebních textů jsem se pokusil vydat výtahy informací z oblastí, které (domnívám se) nejsou natolik známé, aby nestály za příspěví k jejich širší prezentaci. Které mám na mysli, najdete v obsahu v závěru sdělení.

Ke skladbě textu pak ještě jedno vysvětlení: Protože nejde o slovník, ani o kompaktní četbu, jsou zajímavé poznatky vsazovány do mechanismu jejich rozvíjení: skrytou osnovu textu představuje metodologie chemie, postupující od jednoduchých a známých vstupů do problému k navazování dalších informací a ty jsou opět uváděny opakovaně ve stále hlubších obrazech a z nich plynoucích souvislostech. Nevyhýbal jsem se nápovědím – pokud potenciálního čtenáře zaujmou, dnes už si bez obtíží sám najde o nich širší informace.



Jedna ze zásadních otázek současné chemie je soustředěna na porozumění mikroskopickému dění – elementárním krokům a dynamice chemických změn. Prvním napovězením byla Arrheniova rovnice vystihující souvislost mezi reakční rychlostí a teplotou; Arrhenius v ní vycházel z představy aktivovaného komplexu. (Nobelovu cenu obdržel roku 1903.) Teorie aktivovaného komplexu vyslovená Eyringem a Polanyiem ve 30. letech minulého století předpokládá, že přechodovým stavem prochází systém extrémně rychle na časové stupnici molekulárních pohybů. Bylo třeba divů lidského důmyslu a rozvoje experimentálních nástrojů k experimentálnímu postižení rychlé reakční dynamiky, k níž přispěl relaxační postup (Eigen), a záblesková fotolýza. (Nobelova cena byla udělena pro Norrishe a Portera v roce 1968) spolu s experimenty s molekulárním paprskem (Hirschbach, Lee, Polanyi dostali Nobelovu cenu v roce 1986). Vyvinutí laserů s dobou pulzu v rozsahu femtosekund ($1 \text{ fs} = 10^{-15} \text{ s}$) umožňuje přímé sledování přechodového stavu reakcí (Zewail získal Nobelovu cenu v roce 1999).



O ČEM MŮŽETE ČÍST

Obsahem těchto excerpt jsou aktuální výňatky a výpisky z odborného tisku, které mají sloužit jako podklady pro další odbornou činnost čtenáře a které jsou současně vsazené do metodologického scénáře formou pokynů pro vědeckého pracovníka:

Rozprava o metodě

1. Prvním úkolem je vymezení objektu zájmu
2. Určení osobitých vlastností objektu zájmu
3. Posuzování sloučeniny jako jednoty vnitřních protikladů
4. Posouzení sloučeniny (eduktu) jako součásti většího celku, kterým je reakční soustava
5. Jako jednota protikladných stránek s návazným vzájemným vývojem protikladů v nový systém se analyzuje reakční soustava jako celek
6. Určení způsobů rozvíjení protikladů v reakční soustavě jako celku
7. Snaha o odraz chemické reakce v její úplnosti se naplňuje v posloupných krocích
8. Sledování míry změn, ke kterým dochází v průběhu chemické reakce u jednotlivých parametrů
9. Prohlubování poznatků podstatných pro stále preciznější analýzu průběhu chemických reakcí
10. V analýze se dospívá v dalších krocích k prohlubování našeho poznání podstaty chemických reakcí
11. V systémovém myšlení jako postupu řešení problému jsou vytvářeny modely, které navozují obraz a obsahují přílehlavý popis a zcelování jednotlivých prvků řešeného systému
12. Vědní obor je relativně souvislý systém poznatků, které mají povahu informací v kybernetickém smyslu slova a současně je vědní obor i soustavou metod a obecných návodů, jak k těmto poznatkům dospět, jak je rozvíjet a jak jich využívat v praxi
13. Odraz jevů a dějů v našem vědomí je proces, který se uskutečňuje v různých stádiích a odehrává se na různých úrovních poznání
14. Komplexní systémy obsahují znaky holismu, ovšem ty vyjdou najevo jen když uvažujeme struktury a interakce jednotlivých složek těchto systémů