

Rozprava o metodě

Methodos znamená v doslovném překladu „cesta k něčemu“. Vědeckou metodou se rozumí pracovní postupy, které umožňují systematické získávání nových znalostí. Jsou založené na 1. vyhmátnutí námětu a jasné formulaci problému, 2. na shromažďování informací a údajů pozorováním a pokusem, 3. na vyslovování hypotéz logickou argumentací, 4. na prověření správnosti a dosahu formulovaných hypotéz a 5. na konfrontacích hypotéz se stávajícími teoriemi, případně na vyslovení oprav v uplatněných teoriích nebo na nápovědi nové teorie.



Název tohoto úvodu jakoby byl odezvou Descartovy teorie poznání a jím v 17. století, století racionalismu, rozpracované metody vědeckého zkoumání. Descartes vybudoval své učení o metodě vyložené v *Rozpravě o metodě* a v *Pravidlech pro řízení rozumu*, a svou metodu shrnul do čtyř základních pravidel. *První pravidlo*: Považovat za pravdivé pouze to, co zřetelně poznávám já jako takový, to znamená pečlivě se vyhýbat ukvapenosti a předsudku a usuzovat pouze o tom, co se jeví mému rozumu tak jasně a zřetelně, že to v žádném případě ve mně nevzbuzuje pochybnosti. *Druhé pravidlo*: Rozdělit každou nesnáz, kterou zkoumám, na tolik částí, kolik je možné a kolik je zapotřebí, aby tak bylo možno problém co nejlépe vyřešit. *Třetí pravidlo*: Myslet po pořádku, začít od věcí, které jsou nejjednodušší a nejsnáze poznatelné, a poněnáhu stoupat jako po stupních až k poznání nejsložitějšího... *Čtvrté pravidlo*: Sestavovat všude natolik úplné soupisy a takové obecné přehledy, abychom si byli jisti, že jsme na nic nezapomněli.

Můžeme společně sledovat proces myšlenkového zmapování charakteristické struktury chemie v návaznosti na její metodologii. **Metodologie**, obecná i speciální, je naukou o metodách vědeckého zkoumání, o zdůvodňování vědeckých poznatků a o budování vědeckých soustav. K předpokladům, na kterých stojí metodologie, patří vybudování vyjadřovací soustavy (sémiotiky), určení významu a obsahu výrazů a pojmů (chemické sémantiky) a stanovení postupů – myšlenkových operací a algoritmů usměrňujících správné usuzování a korektní vyvozování závěrů. Metodologie chemie zahrnuje systém základních poznatků, principů, procedur a praktických aplikací využitelných ve vědeckém postupu, který umožňuje získávání znalostí potřebných k tvořivému zodpovídání otázek, které plynou z poznávání přírody, funkcí živých organismů a techniky v chemickém prostoru.

Metodologické problémy se nedají řešit bez **logiky** a, jak jistě očekáváte, je tato závislost oboustranná. Takže naplnění snah o řešení některých metodologických problémů matematiky vedlo ke vzniku matematické logiky; nauka o definicích je považována za součást logiky, ale neobejde se bez metodologických hledisek; a podobné je to i s teorií budování vědeckých systémů. Návod, který logika dává metodologii věd, můžeme shrnout do rady Předem vyjasnit terminologii, odstranit jazykovou nejednotnost a nejasnosti, vymezit oblast zkoumání a teprve pak přistoupit k vlastnímu rozboru problému.

Jistěže existují manuály napovídající uživateli postupy myšlenkového rozboru, dovedené často až do formy algoritmů, expertních systémů, blokových schémat a svodných grafů. Něco jako gramatika chemie. Ale opět – máte představu, jak ošidné, omezené a rigidní může být každé stereotypní vodítko, kterým bychom se měli řídit v myšlenkovém rozboru každého chemického problému. Takový univerzální klíč není. Posuneme-li však rovinu myšlenkového rozboru do úrovně obecných zkušeností poznání a lidské praxe, na

úroveň **logické struktury chemie**, můžeme formulovat určité opěrné body racionálního postupu řešení problémů soudobé chemie. Ty mohou být použitelné v rozboru každého chemického problému.

Pokusím se zformulovat tyto body jako úkoly a adresné pokyny k postupu řešení úkolů. Heslovitá forma má usnadnit čtenáři orientaci, protože se zdá být dobrou radou vracet se k nim v rozpačitých situacích. Jejich pořadí a obsahy nejsou v žádném případě neměnné, i ony musejí odrážet specifickou konkrétních situací a úkolů.

K řešení chemických problémů přistupujeme kombinováním dvou metod zkoumání, srovnání a abstrakce. Nejprve se různé prvky systému vzájemně porovnávají a určují se vztahy mezi nimi. Pak se odkryté vztahy zkoumají samostatně. Posléze přijdou na řadu jednotlivé složky těchto vztahů, to znamená přeměny vzájemně spjaté se vztahy. Jak konkrétně, zapíšeme tímto algoritmem:

1. Prvním úkolem je vymezení objektu zájmu

- 1.1 Určit studovaný objekt (chemickou sloučeninu, reakční soustavu atp.) „sám o sobě“. Tímto vymezením objektu se určí jeho totožnost, jeho podobnost s ostatními podobnými systémy a rozdílnost od ostatních objektů v daném systému
- 1.2 Zkoumání se skládá jako posloupnost aktů analýzy a syntézy

2. Určení osobitých vlastností konkrétní sloučeniny.

- 2.1 Vyhledat základní obecné údaje o charakteristikách vazeb, o vazbách v posuzované molekule, o její vytipované substruktuře, potenciálním reakčním centru a konkrétní posuzované molekule jako celku
- 2.2 Srovnat využitelné informace s údaji o ostatních sloučeninách dané třídy, reakční série, podobných substruktur a analogických reakčních center
- 2.3 Vztít v úvahu hybridní stavy atomů charakteristických reakčních center ve sledované molekule
- 2.4 Pro charakterizaci molekuly její elektronovou hustotou využít modelu valenčních stavů atomů

3. Posuzování sloučeniny jako jednoty vnitřních protikladů.

- 3.1 V prvním posouzení shromáždit informace o kvantově chemických parametrech daného systému, zejména o energiích hraničních orbitalů, Fukuiho funkcích tvrdosti/měkkosti a dalších parametrech získatelných metodou DFT (elektronovém chemickém potenciálu, nábojích na atomech, ionizačních potenciálech, elektronových afinitách ad.)
- 3.2 Využitím parametrů z 2. bodu (dipólových momentů, elektronegativit) a hodnot σ -konstant z LFER ocenit polaritu vazeb k ohodnocení elektronových efektů v molekule: Jsou prvními informátory při kvalitativním posouzení vyhledání potenciálních reakčních center
- 3.3 Chemická sloučenina jako jednotka stálosti a proměnnosti má v sobě imprimované i vlastní možné budoucí změny
- 3.4 Pozornost soustředit na změny elektronových konfigurací atomů a využít k tomu modelu konverzí valenčních stavů atomů a atomových dvojic = reakčních center
- 3.5 Z tabelovaných nebo vypočtených hodnot termochemických veličin vyhledat hodnoty parametrů posuzovaných substrátů jako složek eduktů pro predikci uskutečnitelnosti supponované reakce

4. Posuzované sloučenině přisoudit úlohu složky reakčních soustav

- 4.1 Komplexní systém je složen z velkého množství vzájemně zpětnovazebně interagujících částí a není snadné popsat chování systému jako celku
- 4.2 Neztrácet z paměti, že všechny dnes už bohaté poznatky a údaje získané experimenty a výpočty, je třeba posuzovat jako části chemického prostoru, v dílčích okruzích jako součásti korespondentního systému
- 4.3 Informační funkce teorie spočívá v poskytování nového typu informace, a získání informace na základě teorie vede k odstranění neurčitostí na získání uspořádanosti našeho vědění
- 4.4 Vnitřní zdroje a impulzy vývoje v reakčních soustavách je třeba specifikovat a analyzovat
- 4.5 Vyhledat a zhodnotit zjistitelný souhrn nejrůznějších vztahů dané sloučeniny-substrátu k potenciálním reagentům v obecné podobě a návazně v konkrétních souvislostech
- 4.6 Indikuje se povaha možných interakcí reakčních center substrátu s reagenty z hlediska změn jejich hybridního stavu a povahy těchto elementárních kroků
- 4.7 Hledají se vztahy konkrétních reagentů k daným konkrétním reakčním centrům a jejich ohodnocení s využitím indexů reaktivity donorů a akceptorů
- 4.8 K reprezentaci elektronové struktury molekulárních systémů, jejich vlastností a reakcí slouží další „nechemické“ vyjadřování soustavy

5. Jako jednota protikladných stránek s návazným vzájemným vývojem protikladů v nový systém se analyzuje reakční soustava jako celek

- 5.1 Posuzuje se povaha a výsledek interakcí hraničních orbitalů eduktů (substrátu + reagentu) a možnost řízení děje nábojem nebo hraničními orbitaly na jednotlivých reakčních centrech strategického atomového vektoru
- 5.2 Směrování teorií k odpovědi na otázku proč probíhají chemické reakce
- 5.3 Další informace o podstatě chemických reakcí je třeba hledat v odpovědích na otázku jak probíhají
- 5.4 Reakční systém je ovlivňován vnějšími faktory, které vstupují do základního děje zásahy do rovnováhy nebo reakčních rychlostí
- 5.5 V této fázi rozhodování je vhodné uplatnit dostupné údaje o solvatačních schopnostech jednotlivých složek reakční soustavy a posoudit účinnost použitelných rozpouštědel

6. Určení způsobů rozvíjení protikladů v reakční soustavě jako celku

- 6.1 Pro řešení komplexního mechanismu je základním předpokladem kinetický rozbor. Správně zhodnocený reakční mechanismus musí být slučitelný s reakční kinetikou do všech důsledků
- 6.2 Soustředit předpoklady pro studium chemických reakcí v poloze jejich vztahů mezi kinetickou bariérou procesu a její termodynamickou hnací silou
- 6.3 Kvalitativní i kvantitativní stránky reakčního mechanismu vystihuje energetický diagram a reakční koordináta: k řešení dospět experimentem a metodami výpočetní chemie
- 6.4 Schemata reakčního mechanismu je možno modelovat konstrukcí grafů reakčních mechanismů

7. Snaha o odraz chemické reakce v její úplnosti se naplňuje v postupných krocích

- 7.1 Vymezení podstatných vlastností, stránek a vztahů je obecně založeno na rozkladu, analýze. Je nezbytné provádět na různých stupních sjednocování, syntézu pro kontrolu, jestli nebylo něco opomenuto nebo chybně interpretováno
- 7.2 Věda dospívá k nacházení vytyčeného cíle po různých cestách různými metodami. Proces myšlenkového zmapování metod řešení chemické reaktivity kulminuje v určitých etapách do paradigmatu, kondenzujícího předchozí dílčí řešení
- 7.3 V analýze myšlenkových a pracovních postupů odkrývání podstaty chemických procesů je dobré vracet se k Descartovým pravidlům a postupně shromažďovat stále úplnější informace a údaje rozvíjením teorií, pozorováním a pokusem

8. Sledování míry změn, ke kterým dochází v průběhu chemické reakce u jednotlivých parametrů

- 8.1 V prováděném rozboru změn v reagujících soustavách začít s uvážením nejdříve těch faktorů, které jsou považovány za podstatné a nezbytné pro rozvíjení analýzy
- 8.2 Korelační vztahy vystihující korespondenci mezi dvěma proměnnými měřitelnými parametry je možno vyjádřit matematickými prostředky
- 8.3 Kauzalita umožňuje teoretický přechod od matematických formulací fyzikálních zákonů k vysvětlení makroskopické fyzikální realizace jednoho z možných řešení
- 8.4 Deduktivní sjednocování zkušeností si vynucuje nahrazování empirických postupů exaktními řešeními a jejich semikvantitativní procedury kvantitativními metodami

9. Prohlubování poznatků podstatných pro stále preciznější analýzu průběhu chemických reakcí

- 9.1 Třetí Descartovo pravidlo: Myslet popořádku, začít od věcí, které jsou nejjednodušší a nejsnáze poznatelné, a poněáhlu stoupat jako po stupních až k poznání nejsložitějšího...
- 9.2 Postupem od jedné závislosti a vztahu k dalším v jejich vzájemné souvislosti se s prohlubováním poznatků dospívá k postupnému zobecňování
- 9.3 Prováděný rozbor studovaného reakčního systému je třeba doplňovat především o posuzování postupných změn kvantitativních stránek základních parametrů. Dá se vysledovat, jak překročením míry posuzovaných faktorů se vytváří kvalitativně nový systém – reakční produkty
- 9.4 Jít k podstatě chemických reakcí vyžaduje pochopení podmínek jejich vzniku, poznání zákonitostí jejich průběhu a mechanismu jejich řešení
- 9.5 Vazba představuje komunikační systém, v němž se uskutečňuje výměna informací mezi jejími komponentami a energiemi
- 9.6 Jednota jevů a podstaty a jejich rozdíl tvoří objektivní základy jednoty smyslového a racionálního prvku v poznání chemické vazby, pohyb vědění od smyslového k racionálnímu
- 9.7 Nové metody a stále hlubší pronikání k podstatě analyzovaných jevů a procesů předpokládají postupné zpřesňování dosažených poznatků

10. Přiřazení jednotlivé studované chemické reakce do souboru (množiny) známých reakcí

- 10.1 Řešení lokalizace a pohybu valenčních elektronů v průběhu chemické reakce v intencích principu „rozděl a zvládni to“
- 10.2 Každá věc má mnoho stránek a k podchycení jejich mnohosti je zapotřebí mnoha modelů
- 10.3 Zobecňování se děje podle dvou principů: podle principu pojmového zobecňování a podle principu relačního zobecňování. Je třeba opakovaně posuzovat, zda byly vyčerpány všechny dostupné možnosti pojmového zobecňování v modelování změn elektronové hustoty při reakcích
- 10.4 Lidská imaginace je nevyčerpatelná. Je jen třeba umět vnímat souvislosti a jejich dosud neobjevená odvětvení rozvinout vhodným aparátem do nové koncepce, principu, i teorie

11. V systémovém myšlení jako postupu řešení problému jsou vytvářeny modely, které navozují obraz a obsahují příslušný popis a zcelování jednotlivých prvků řešeného systému

- 11.1 Nikdy se nespokojit s dosaženými výsledky, třeba se zdají být úplné, a postupně se dobývat v návaznosti na předchozí k novým, přesnějším poznatkům. Teprve ty umožňují sledovat vývoj v systémech, který řeší přechod změn kvantitativních parametrů v kvalitativně nové systémy – reakční produkty
- 11.2 Cesty ke stále hlubšímu poznávání obrazů vzniku a zániku chemických vazeb se neobejdou bez konstrukcí nových koncepcí a nových teorií a bez adaptací teorií z jiných oblastí vědění
- 11.3 Rozdělit každý nově kompletovaný systém = problémovou situaci na tolik prvků, kolik je možné a kolik je zapotřebí, aby se dospělo k optimálnímu řešení na úrovni dosažitelné v dané době

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

- 12.1 Prohlubování poznatků podstatných pro stále preciznější analýzu průběhu pohybů reaktantů po PES
- 12.2 Úkolem a cílem chemických teorií je zkoumat jevy a děje v celé mnohotvárnosti jejich zákonitých souvislostí
- 12.3 Znalost reakční cesty v podobě reakční koordináty RC a IRC elementárních procesů je ekvivalentní znalosti jejich reakčního mechanismu
- 12.4 Analýzou a syntézou se daný systém poznatků ve své celistvosti proměňuje z celku charakteru empirického objektu na celek charakteru modelu tohoto objektu prostřednictvím daných teorií, principů a metod
- 12.5 Výchozí axióm, že chemické reakce jsou ovlivněny mnoha faktory, je naplňován tak, že každý z faktorů se posuzuje jako separátní ohodnocená souřadnice v mnohorozměrném prostoru. Grafy reakčních mechanismů se osvědčují jako názorná a praktická pomůcka především při hledání analogií v množině chemických reakcí a jejich klasifikace
- 12.6 V určitých fázích myšlenkové analýzy širšího problému je účelné zrekapitulovat množinu poznatků ve vyváženém nadhledu

13. Odras jevů a dějů v našem vědomí je proces, který se uskutečňuje v různých stadiích a odehrává se na různých úrovních

- 13.1 Nejprve jde vždycky o podrobné zpracování informací získaných v předchozí fázi
- 13.2 V metodologii, v postupech a aparátu řešení problémů vědních oborů, i na první pohled různých, nacházíme mnoho společných rysů s možnostmi efektivních aplikací
- 13.3 Princip všeobecné souvislosti nabádá chemika nad každým úkolem vidět věci jinak, než je navyklý
- 13.4 Systémový přístup jako obecné nazírací, myšlenkové a explikační schéma nás vede ke krokům scelování dosavadních poznatků a tím k vytváření základny pro postupné chápání problému v jeho celistvosti

14. Komplexní systémy obsahují znaky holismu, ovšem ty vyjdou najevo jen když uvažujeme struktury a interakce jednotlivých složek těchto systémů

- 14.1 Chemie a umělé vědomí
- 14.2 Umělá inteligence
- 14.3 Expertní systémy
- 14.4 Fuzzy logika
- 14.5 V informatice znamená optimalizace hledání odpovědi na otázku „které řešení je nejlepší“ pro studovaný systém
- 14.6 Neuronové sítě
- 14.7 Evoluční a genetické stochastické optimalizační algoritmy slouží k řešení pracovních úloh chemiků
- 14.8 Umělá chemie je počítačový model používaný k simulaci různých typů chemických systémů
- 14.9 Zásadní změnu dosud platné filozofie představuje přechod od „chemie jedné molekuly“ ke komplexním seskupením

Předkládám čtenářům pokus o zformulování opěrných bodů racionálního postupu řešení problémů jako vodítko, něco jako chemikův malý manuál. Heslovitá forma může usnadnit orientaci v mapování chemického prostoru, vnímaného analogicky, jak prostor chápe matematik: pro něho je každý prvek (ať jím je doslova chemický element, elektron, proton, ion, substruktura, synthon, fragment molekuly, molekula, soustava reaktantů, chemická vazba, elektronová hustota, elektronegativita atd.) libovolné množiny bodem; vztahy mezi těmito body mu představují vektory (při koncentraci na chemii pak chemické transformace a vše, co je s nimi spojeno). Je to nástin intimnějšího vhledu chemika do posuzování strukturní reorganizace chemických systémů, usnadněný topologickým pohledem. Je kombinovaný s aparátem klasických představ, které popisují průběh reakcí v termínech strukturních formulí. Popsaný postup, usnadňující racionální poskládání myšlenkových procesů chemika není samozřejmě jediný možný, není neměnný, nemůže být vzhledem k přibývajícím novým poznatkům úplný, je to jen návod použitelný v dané době. A každý návod musí být adaptabilní pro odrážení specifičnosti konkrétních situací a úkolů. V obecném přístupu může být zhuštěn do uvedené sestavy hesel a vysvětlivek.

Zkoumání se skládá jako posloupnost aktů analýzy

V řeči psychologa je řešení problémů poznávací proces. Proto je třeba vnitřní jevy, které jsou podkladem řešení úloh, zkoumat jako posloupnosti aktů zahrnujících

- sbírání údajů a dat o znacích a vlastnostech prvků (zde je pojem prvek vzat z teorie systémů), které vytvářejí podmínky úloh,
- jejich uspořádání a třídění podstatných (v daných souvislostech) od méně důležitých,
- vystižení a pochopení vztahů mezi prvky daného systému,
- zjištění chování posuzovaného systému jako celku a postupným rozkladem vyňatých jednotlivých prvků systému, a to ve stále hlubších vzájemných vztazích,
- na tomto základě se prohlubuje porozumění problému, na který je poznávací proces soustředěn.

Proces řešení problémů má tedy informační stránku (spočívá ve shromažďování údajů, jejich utřídění a uspořádání, systemizaci), dynamiku poznávacího procesu (hledání a nacházení vztahů mezi prvky systému, analýzu chování systému a jeho částí), a dospívá k vypracování modelu problémové situace (vyústění procesu hledání funkčnosti modelu pro daný systém a jeho kompatibilitu s modely jiných systémů, případnou podobnost nebo dokonce identitu).

Je na čtenáři, bude-li souhlasit, nebo se i ztotožní s názorem autora, že Celá věda je založena na předpokladu, že

FYZIKÁLNÍ SVĚT JE STRUKTUROVANÝ

a my se snažíme, aby poznávané jevy, děje a fakta o nich korespondovaly s obecně přijatými zásadami a postupy NAŠEHO MYŠLENÍ

k tomu slouží LOGIKA jako přesný prostředek pro spolehlivé a pravdivé vyjádření informací

využívající rastr logického vyplývání a znalostí souborem formulí, výrokové predikátové fuzzy logiky

S následujícím manuálem může chemik pracovat podle zásad fungování řešení problémů: Cíle transformace jsme vytýčili ve větách 1. – 14. Další postup se řídí operátory (podle matematika to mohou být lemmy, heslová slova ve slovníku) 1. – 14., které mají řešitele dovést k cílové situaci. Pokusil jsem se zformulovat tyto body jako úkoly a adresné pokyny k postupu řešení úkolů. Heslovitá forma má usnadnit čtenáři orientaci, protože se zdá být dobrou radou vracet se k nim v rozpačitých situacích. Jejich pořadí a obsahy nejsou v žádném případě neměnné, i ony musejí odrazet specifickou konkrétních situací a úkolů a jejich vývoj. A samozřejmě nikdy nemohou být excerpované poznatky úplné.

Předkládaný text by mohl být uveden jako zrcadlení logiky uplatňované v budování koncepcí při neustálém rozvoji chemie. Čerpám z Reichenbachovy klasické diskuze o rozdílech mezi kontextem odkrývání nových poznatků a kontextem jejich potvrzování. Soudil, že vědci sice užívají logickou analýzu vědeckého ověřování formou teorie dokazování, ale chybí tu logická procedura pro vytváření hypotéz. Vytváření hypotéz je kreativní část vědy, jejich potvrzování je logickou částí vědy. Reichenbach přesto vyjádřil povzbudivou tézi: chemie dovede používat logiku k objevitelství. A doložil to dvěma důkazy. První podal E.J. Corey (1969) formulováním a ověřením logiky retrosyntetické analýzy svěřené počítači (název programu LHASA je akronym *Logic and Heuristics Applied to Synthesis Analysis*). Druhý doklad je z oblasti plánování syntéz léků. Goodman (Goodman, Ro, 1995) navrhl a ověřil čtyřkrokovou proceduru syntézy molekuly vytipovaného potenciálního léku (zahájil ji modelováním aktivity receptorů v lidském mozku syntézou analoga morfinu, studoval spektroskopickými metodami a počítačovou simulací trojrozměrnou strukturu favorizované

molekuly, následovaly testy biologickými zkouškami a na základě získaných informací modifikoval strukturu „na míru“). Je tedy mylné tvrzení, že by se nedalo v chemii objevovat nové na základě logických postupů.

Vývoj chemických teorií směřuje k jejich systémovému zjemňování

Teoretický výzkum v chemii v posledních letech je nemyslitelný bez využívání kvantové mechaniky. Rigorózní řešení chemických fenoménů kvantově mechanickými řešeními sice nejsou snadná, ale pokroky v teoretické fyzice, aplikované matematice a výpočetní chemii umožňují počítat chemické parametry (vlastnosti) mnoha i složitých molekul s dostatečnou přesností a jen s nevýznamnými idealizacemi. Například tým pracující na projektu Gaussian směřuje k metě provádět kvantově chemické výpočty s minimálními aproximacemi. Metoda vývoje chemické teorie spěje k jejímu systémovému zjemňování, aby výpočty byly co nejbližší k realitě. (Filozofie věd má pro tyto postupy termín galileánská idealizace – jsou nápodobou Galileova díla: zavádějí se nutné idealizace a ty jsou postupně zpřesňovanými výpočty redukovány.) Píše o tom například Weisberg (2007) a v enormní úspěšnost kvantové chemie v jejím prediktivním využití věří R. Hoffmann – četba jeho studií a esejí (např. v HYLE) stojí za to.

Tím nejsou opomíjeny jednoduché teorie, které jsou „pracovními návody“ experimentálních chemiků. Pro ně jsou často sofistikovaná teoretická řešení černou skříňkou, z jejichž výsledků dovedou pro svou práci vytěžit mnoho užitečných informací. Jednoduché modely jsou nezbytné pro modelování reakčních mechanismů na základě pozorovatelných a pozorovaných chemických jevů. Je tu ovšem potíž v tom, že kognitivní kapacita člověka je omezená, má-li v jednom posouzení synopticky „zpracovat“ větší soubor pozorovatelných. (Výkonné počítače mohou zpracovávat vstupní informace hodiny i dny a je pak na uživateli, jestli dokáže dobře rozšifrovat výsledky.) Zmíněné vztahy vyjádřil Hoffmann (1997) ve svém pojetí způsobů vysvětlování jevů a fakt : jsou horizontální a jsou vertikální.

Při horizontálním způsobu vysvětlování (explanaci) se chemik opírá o zavedené chemické koncepce. Ukázkou mohou být následující první témata. Vertikální explanace zná filozofie věd jako nomologické deduktivní výklady.

Nomologický výklad je formální metoda vysvětlování opírající se o testování hypotéz odvozených z obecných zákonů. Charakterizuje vědecké objasňování nejprve jako deduktivní argumenty vycházející z premis odvozených z přírodních zákonů. Model je ovlivněn logickým pozitivismem v jeho implikacích, chápaných jako "předpis" postupů vědeckých explanací. Vzhledem k tomu, že model se vystřihá kauzality, vědeckého modelování i zjednodušování a v podstatě odmítá logický pozitivismus, je často filozofy věd odmítán. Chemikům vyhovuje.
--

Tento způsob řeší chemické jevy prostředky kvantové mechaniky. Její metody jsou adaptované na poskytování predikcí na základě výpočtů, při horizontálních postupech vyslovuje chemik predikce na základě analogií, fenoménu podobnosti a intuice; užitečnou pomůckou jsou mu posuzování na základě ostře odlišujících rozdílů, odkrývající trendy v chování srovnávaných systémů.

Věda se vyvíjí a obohacuje mimo jiných faktorů střetáním extrémních názorů. Jeden takový publikovali Bogaard (1978) a Scerri (1991, 1994): Chemické teorie o stavbě atomů a molekul je možné redukovat na kvantovou mechaniku. Ovšem určité klíčové koncepce, třeba valence a vazby, v uvedených časech do kvantové mechaniky nezapadaly. Scerri soudil, že standardní kvantově mechanické výpočty atomových spekter poskytují jen hodně idealizované předpoklady o strukturách mnohaelektronových systémů a nepřesnosti vnášené těmito aproximacemi se nedají stanovit. Z argumentů Bogaarda a Scerriho vyplývá, že kvantová chemie je mimořádně osvětlujícím prostředkem, ale nemůže chemii redukovat na fyziku. Schwarz (v roce 2007) oponoval: Elektronová struktura atomů a periodická soustava prvků jsou v podstatě vyvoditelné kvantovou mechanikou. Problém je zatím v daných možnostech celé výpočetní vědy.

Není třeba sdílet obavy z redukcionismu (o něm ve 4. tématu); z chemické ontologie fyzikalismu plyne, že každá věc ve světě je fyzikální. Pokud bychom tuto myšlenku zastávali, pak svým způsobem uznáváme redukcionismus a dalo by se říct, že ontologie chemie je redukovatelná na ontologii fyziky.

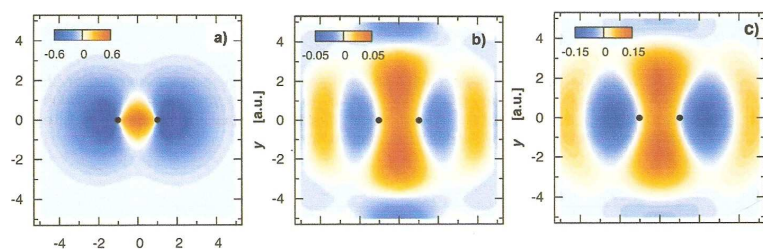
(Fyzikalismus je jedna z koncepcí logického pozitivismu, vypracovaná R. Carnapem, O. Neurathem aj., která podmiňuje pravdivost jakékoliv vědecké teze jejím převedením do jazyka fyziky.)

Ontologie v teorii informací představuje znalost jako množinu koncepcí v dané oblasti a vztahů mezi nimi. Osvětluje také smysl těchto entit. Nabízí výslovný (explicitní) a formalizovaný popis určité problematiky. Je to formální a deklarativní reprezentace, která obsahuje glosář (definici pojmů) a tezaurus (definici vztahů mezi jednotlivými pojmy). Ontologie je slovníkem, který slouží k uchování a předávání znalosti týkající se určité problematiky. Ve filozofii je ontologie chápána jako formální explicitní specifikace uspořádaného pojmání světa. Od Descarta lze odvodit jeho základní ontologický princip, kde vyvozuje jistotu bytí z jistoty myšlení: „Myslím, tedy jsem“, který znamenal obrat ve filozofii k novověké ontologii. Ontologie se staly strukturálním řešením pro organizování informací a mají své místo v umělé inteligenci, systémovém inženýrství, programovacím inženýrství, biomedicínské informatice, informační architektuře jako reprezentace znalostí o světě a vědách o něm.

Ovšem obsah „fyzikálního“ není zcela jasně vymezen. Když chemické entity jako molekuly nebo ionty se stávají součástí fyzikální ontologie, lze argumentovat tak, že to není redukce chemie na fyziku, ale jenom expanze ontologie fyziky do sféry ontologie chemie. Řada autorů (kromě jiných jsou to Earley 2005, Needham 2010, Harré, Llored 2011) se zabývá ontologií chemie na základě mereologie a dospívají k názoru, že je nutné obecné ontologické rozlišení mezi entitami, o kterých se dá tvrdit že existují, a stavy sice nejsouciami, ale vyplývajícími, vyvoditelnými z existujících entit.

Ve filozofii a v matematické logice je obsahem mereologie řešení vztahů mezi částmi a celkem. Podobně jako je teorie množin založena na příslušnosti vztahů mezi množinou a jejími prvky, zabývá se mereologie vztahy mezi entitami z hlediska jejich inkluze mezi množinami. Mereologie byla axiomatizována při aplikacích predikátové logiky na formální ontologii (je její významnou částí): Cokoli je částí sebe sama (vztah reflexivity), část celku je sama částí toho celku (vztah transitivita) a dvě různé entity nemohou být jedna částí druhé (vztah antisymetrie). Snadno domyslíte, že mereologie je aplikací matematické logiky (jako druh „proto-geometrie“) a umělé inteligence (AI).

K tomu, jak je obtížné tuto hranici nalézat, jeden příklad: Atomové a molekulové orbitály byly od počátku a někdy ještě jsou považovány za obrazy matematických konstruktů fyziků a chemiků. Chemie je „uměním změny“ a molekuly a orbitály jsou typickými koncepcemi dokládajícími toto podobenství. V roce 2004 informoval Itatani se spolupracovníky fyziky a chemiky o tomografickém zobrazení molekulových orbitalů; ale ještě v roce 2006 Schwarz nadepsal svoji publikaci *Measuring Orbitals? Provocation or Reality?* Přístrojové vybavení laboratoří dnes umožňuje zobrazování molekulových orbitalů i složitějších molekul (Gross ad. 2011, Vozi, Negro ad. 2011, Salieri ad. 2012 a řada dalších).



Legenda k obrázku: Orbital HOMO molekuly dusíku N_2 . a) vypočtený *ab initio* (Hartree-Fock), b) experimentálně rekonstruovaný tomografickou metodou založenou na attosekundové emisi v poli laseru, c) teoreticky rekonstruovaný za stejných podmínek jako při experimentu.

Rekonstruovaný orbital b) vykazuje charakteristickou strukturu, amplitudu a znaménko exaktního orbitalu HOMO. (Haessler, Salieri ad., 2010).

Všemi těmito stránkami hledání logické struktury chemie se zabývá **teoretická chemie**. Její náplní je formulování teorií, které vysvětlují výsledky chemických pozorování. Jejimi pracovními metodami jsou matematické a výpočetní metody, které se neobejdou bez znalosti kvantové chemie jako aplikace kvantové mechaniky. Podstatnou oblastí teoretické chemie je porozumění valenčním stavům atomů, jejichž kořeny jsou v Mendělejevově periodickém systému prvků, a elektronová struktura chemických systémů. Dalšími důležitými

složkami jsou kvantová mechanika, molekulární dynamika, statistická mechanika, statistická termodynamika, teorie reakčních rychlostí, řešení chemické reaktivity, teorie roztoků elektrolytů, teorie reakčních sítí, polymerací a katalýzy.

K vysvětlování a predikcím chemických jevů a dějů využívá teoretická chemie fyziku. Statistická mechanika představuje most mezi mikroskopickými jevy kvantového světa a makromolekulárními vlastnostmi chemických objektů. Na počátku rozvoje teoretické chemie je Schrödingerova rovnice a teorie kvantového pole. Ještě jednou shrneme hlavní odvětví teoretické chemie:

KVANTOVÁ CHEMIE

Aplikace kvantové mechaniky na řešení chemických problémů

VÝPOČETNÍ CHEMIE

Do výpočetní chemie spadá počítačová chemie jako obecný nástroj umožňující řešení chemických problémů s pomocí počítače; je opřena o postupy molekulární logiky a diskrétní matematiky spíše než infinitesimální matematiky

MOLEKULÁRNÍ MODELOVÁNÍ

Metody modelování chemických struktur se obejdou bez kvantové mechaniky

MOLEKULÁRNÍ DYNAMIKA

Aplikace klasické mechaniky na simulování pohybu jader v ensemblech atomů a molekul

MOLEKULÁRNÍ MECHANIKA

Modelování intra- a intermolekulárních interakcí na PES zprostředkované souhrnem interakčních sil

MATEMATICKÁ CHEMIE

Analýzy a predikce molekulárních struktur s využitím matematických metod, často i bez přispění kvantové mechaniky

TEORETICKÁ CHEMICKÁ KINETIKA

Teoretické studie dynamických systémů zahrnujících reaktivní sloučeniny s využitím odpovídajících diferenciálních rovnic

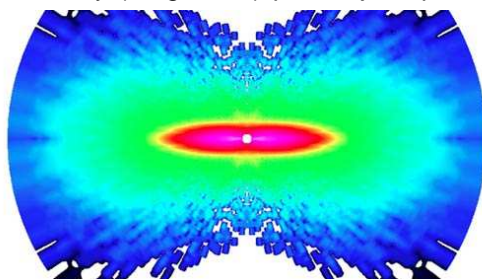
CHEMICKÁ INFORMATIKA

Chemoinformatika využívá počítače a informační techniky k aplikacím na široký okruh problémů z celé oblasti chemie

Právě čtete, že teoretická chemie se opírá při vysvětlování a predikci chemických jevů a dějů o fyziku. Často se uvádí dělení jejího soustředění na elektronovou strukturu, dynamiku a statistickou mechaniku. K dalším oblastem zájmu teoretické chemie patří matematická charakterizace látek v jejich různých fázích (studium reakční kinetiky) a studium aplikovatelnosti matematiky v různých oblastech (například jde o možnosti využití principů topologie (a nejen ke studiu elektronových struktur), a někteří autoři považují za synonyma teoretickou chemii a matematickou chemii.

Na větu *Teoretický výzkum v chemii v posledních letech je nemyslitelný bez využívání kvantové mechaniky* navazuje významný dovětek ... a bez někdy ohromujícího rozvoje v oblasti přístrojového zázemí a jeho prostřednictvím dosahovaného poznávání fantastických průniků do nitra atomárního světa. Uvedme si jeden z mnoha příkladů:

Agentura France-Press uveřejnila (2012) vzrušující zprávu o tom, jak fyzikální chemici z Ohio State University a Kansas State University (Blaga a d.) pořídili jako první zobrazení pohybujících se atomů v molekule N_2 . Zobrazení jsou pořízena pulzy vyrazí elektron z atomů. Elektron vyvolá malou kolizi rybníku pozorovanou Sensory snímají pohyb Pohyb atomů je narůstajícího v barvách od odpovídá oblasti největšího momentu.



v kvadriliontině sekundy, ultrarychlým laserem; jeho z jeho orbitalů jednoho spadne zpět do molekuly, připodobněnou vlnkám na jako zpětný obraz energie. vibrujících spojení atomů. zobrazen jako míra angulárního momentu tmavomodré k růžové, která

Moderní vědy jsou podloženy třemi operacemi – **experimentem, teorií a výpočty**. To platí samozřejmě také o chemii: teoretická chemie je založena na metodách analýzy, počítačová chemie je soustředěna na předvídání vlastností a chování komplexních systémů využitím zákonů kvantové mechaniky (nebo klasických aproximací, k nimž nejsou analytické teorie nezbytné). Výpočetní chemie operuje v principu se základními zákony – Schrödingerovou rovnicí, Newtonovými zákony pohybu a Boltzmannovou distribucí stavů energie. Dá se i říct, že výpočetní chemie je částí teoretické chemie, v níž některé predikce založené na aproximativních teoriích vyžadují počítačové programování a operace s čísly. O počítačové chemii se někdy hovoří jako o molekulárním modelování nebo molekulární simulaci.

Na soudobé úrovni teoretické chemie a výpočetní chemie je cenné to, že dokáží predikovat neměřitelné vlastnosti a rychlosti. V případech, kdy jsou měřené údaje k dispozici, se ukazují vypočtené výsledky přesnějšími než ty naměřené (mj. to platí o tvorných teplech reaktivních látek). Chválu počítačové chemie můžeme rozšířit o další významné schopnosti: k nim patří nepochybně výpočty geometrií a energií transičních stavů a z jiné oblasti rychlý screening syntetizovaných léčiv z mnoha tisíců kandidátů (vzpomeňme na metody PCR a kombinatorickou syntézu a banky); výpočty jsou soustředěny rovněž na předpovědi biologické aktivity syntetizovaných nebo proponovaných sloučenin a na hlubší porozumění a explanace trendů v množinách získaných dat.

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.

A co z toho plyne pro čtenáře:

Tato brožura je výběrem, subjektivním excerptem z fantastického objemu chemických poznatků a faktologie: je vsazena do rámce naznačujícího systemizaci metod, které chemikovi radí, jak by měl své vlastní i zprostředkované poznatky uspořádat v mysli, jak je hodnotit, jak s nimi co neúčinněji pracovat.

Informace, které by si chemik měl pamatovat

