

mišljenja i komentari

Temelji kemije

N. Raos

Institut za medicinska istraživanja i medicinu rada, Zagreb

Moj sin, dok je još bio sasvim mali, volio je leći na tepih i onda svašta crtati. No flomaster nije htio slušati, pa je uz sav trud i oprez na tepihu ostala mrlja. Nisam je ni primijetio dok sve nije bilo gotovo, naime mali se sjetio da je očisti nekom kremom koju je pronašao u frižideru. Meni suze radosnice na oči – ta sin mi je postao kemičar!

Da upravo tako, jer se poveo osebnom kemijskom intuicijom (premda još nije učio kemiju) koja kaže da se slično miješa sa sličnim. To je, dragi moji kolege, kemija: sjećam se da sam kao petnaestogodišnjak radio kod kuće kemijske pokuse dovijajući se što bi iz svakojakog miješanja moglo proizići, povodeći se za analogijom. Iako mi se još i danas diže kosa na glavi od onog što se moglo dogoditi (npr. grijanjem amonijeva nitrata na otvorenom plamenu da bih dobio N₂O), shvatio sam da sam upravo tada naučio o kemiji više nego ikad u životu. Razumjeti jezik formula, povezati mikroskopsko s makroskopskim, osjetiti u kemijskoj formuli boju, miris, okus... to je ono što čini kemičara kemičarom, pretvarajući ga od pretakača u znanstvenika.

Sve su mi te misli došle na pamet kad mi je naš ugledni kolega Milan Randić dao separat, zapravo primjerak svoje znanstvene biografije.¹ Čovjek bi očekivao da će u njoj pročitati ono što obično u takvim autobiografijama piše, naime kako se autor trudio oko ovog i onog, kako je otkrio ovo i ono, kako je razmišljao o ovom i onom... Ništa od toga! Ta je jedinstvena biografija napisana kao polemika s protivnicima teorije grafova u kemiji, s onim našim kolegama koji u toj znanstvenoj disciplini vide "numerologiju", neprimjerenu simplifikaciju kvantne mehanike, igranje statističkim pokazateljima i tome slično. Autor se naročito obrušava na jednog našeg znanstvenika (neću reći kojeg), fizičara koji se bavi kemijom, a koji teoriju grafova u kemiji naziva "primitivnom", lošom aproksimacijom Hückelove teorije, a one koji se njome bave smatra nekim čudim svatima, koji troše vrijeme i energiju na nešto za što je unaprijed jasno da ne valja. A naš se Milan Randić trudi da dotičnog i sve nas skupa – u maniri Platonovih sokratija – uvjeri da nije tako premda je jasno da čovjeka kojem nešto (ili ništa) nije jasno nećeš uvjeriti ni s deset knjiga. No možda i griješim, jer Machiaveli kaže da ima tri vrste ljudi: jedni – kaže – razumiju sami po sebi, drugi razumiju kad im se kaže, a treći ne mogu razumjeti ni na koji način. Za te treće je, kaže Machiaveli, svaki trud uzaludan. Zašto? Zato što nisu shvatili, da se vratimo na naš primjer, ono što sam ja shvatio učeći kemiju na pokusima kao petnaestogodišnjak, a moj sin je – eto – došao do toga sam od sebe.

Dakle, shvatio sam temelj kemije, a taj je temelj zaključivanje po analogiji. Ako je dušikov triklorid eksplozivan, bit će da je eksplozivan i dušikov trijodid, ako je heksan masna, uljasta tekućina bit će da je takav i cikloheksan. I premda mi se teorija grafova činila (i još mi se čini) previše opterećena matematičkim formalizmom (iako sam svjestan da tako treba biti), njezinu sam bit odmah razumio: ako sva svojstva molekule proizlaze iz strukturne (konstitucijske) formule i ako molekule slične formule imaju slična svojstva, što je bliže zdravom razumu nego pronaći neku mjeru sličnosti i prema njoj kvantitativno predviđati još nepoznata svojstva drugih, sličnih molekula? Kako sažeti čitavu molekularnu strukturu u jedan broj, u biti je tehničko pitanje, a valja li taj broj (topološki indeks) ili ne valja, jest pitanje na koje se može odgovoriti samo empirijski, dakle usporedbom s eksperimentalnim podacima. Teorija grafova u kemiji slijedi normalan način mišljenja kemičara (sudeći po analogiji), pa možemo reći da je riječ o kemijskom modelu za rješavanje kemijskih problema.

No problem nastaje kada se fizičar počne baviti kemijom, pa hoće kompleksna svojstva spojeva izvesti ne po analogiji (kako to čine kemičari), nego ih izračunati iz "prvih principa" – kao da takvi principi uopće postoje u prirodi. Ti principi, dragi moji čitatelji, postoje samo u ljudskoj glavi, oni su samo oruđe za misaonu obradu podataka ili – kao lijepo reče Fran Bubanović – "teorija je samo aparat u kojem kemičar radi svoj pokus". Ne prihvatimo li tu pragmatičnu definiciju kemijske, kao i svake druge teorije, činjenicu da "žlicom ne možemo jesti juhu" (kako lijepo kaže Randić u spomenutom članku),¹ put nas vodi ravno do platonizma, do vjerovanja kako "ideje" realno i objektivno postoje izvan čovjeka i ljudske misli, dapače da su upravo one temelj, bitak, svih iskustvu dostupnih stvari i pojava.

Kažem li da je protiv takve interpretacije odnosa iskustva i razuma (ili, da kažemo na moderan način, između eksperimenta i teorije) ustao već Platonov učenik Aristotel, mislim da ne trebam naglašavati kakvim misaonim aparatom raspolažu neki naši istaknuti znanstvenici.

Literatura

1. M. Randić, On history of the Randić indeks and emerging hostility toward Chemical Graph Theory, *MATCH Commun. Math. Comput. Chem.* **59** (2008) 5-124.