

CHEMIA W ŚWIETLE FILOZOFII

**Studia z filozofii, metodologii
i semiotyki chemii**

Paweł Zeidler

CHEMIA W ŚWIETLE FILOZOFII

**Studia z filozofii, metodologii
i semiotyki chemii**

KOLEGIUM WYDAWNICZE

*Tadeusz Buksiński (przewodniczący), Bolesław Andrzejewski,
Barbara Kotowa, Anna Pałubicka, Krzysztof Przybyszewski (sekretarz), Jan Such*

Recenzent

prof. dr hab. Michał Tempczyk

© Copyright by Paweł Zeidler, 2011

Projekt okładki

Magdalena Rożynek

Redakcja

Izabela Baran

ISBN 978-83-7092-118-7

WYDAWNICTWO NAUKOWE INSTYTUTU FILOZOFII
UNIwersytetu IM. ADAMA MICKIEWICZA W POZNANIU
60-569 Poznań, ul. Szamarzewskiego 89c,
tel. 61 829 22 78, fax 61 829 21 47, e-mail: wnifuam@amu.edu.pl
www.staff.amu.edu.pl/~filozof, filozof.amu.edu.pl

DRUK: Zakład Graficzny UAM
ul. Wieniawskiego 1, 61-712 Poznań

Spis treści

Przedmowa	7
Źródła artykułów zamieszczonych w książce	11
I. Miejsce filozofii chemii w filozofii przyrodoznawstwa	13
II. Co, w jakim celu i w jaki sposób badają chemicy? Współczesne kontrowersje wokół przedmiotu i specyfiki metodologicznej praktyki badawczej chemii	29
III. Czy alchemia była protochemią? Studium metodologiczno-historyczne	41
IV. O teoretyczności chemii – studium metodologiczne	53
V. O redukcji chemii do fizyki, czyli o pewnym przesądzie filozoficznej refleksji nad nauką	77
VI. <i>Homo experimentator</i> a spór o realizm laboratoryjny	91
VII. Spór o status ontologiczny orbitali atomowych i molekularnych w kontekście zagadnienia autonomii chemii	109
VIII. Czy można zaobserwować orbitale? O problemie obserwowalności i realności przedmiotów teoretycznych	119
IX. Semiotyczny i poznawczy status wzorów strukturalnych związków chemicznych a przyczynowa teoria oznaczania	137
X. Metodologiczne i semiotyczne aspekty modelowania teoretycznego w chemii	153
XI. O funkcjach metafor w praktyce badawczej chemii	183
XII. Wyjaśnianie genetyczno-teoretyczne a praktyka eksplanacyjna w chemii organicznej	201
XIII. Spór o stabilność praktyki badawczej nauk empirycznych	219
Bibliografia	233
Indeks nazwisk	247
Indeks rzeczowy	253

Przedmowa

Chemia jako nowożytna nauka przyrodnicza wyłoniła się z filozofii przyrody Roberta Boyle'a w XVII wieku, a została ukonstytuowana w wieku XVIII między innymi przez trzech filozofów i chemików: Henry'ego Cavendisha, Antoine-Laurenta Lavoisiera i Josepha Priestleya. Jednakże, pomimo niewątpliwego filozoficznego rodowodu, praktyce badawczej chemii do lat dziewięćdziesiątych XX wieku nie towarzyszyła wnikliwa i systematyczna refleksja filozoficzna. Fakt ten musi budzić zdziwienie, gdyż w ciągu trzystu lat dziejów nowożytnej chemii nie tylko wzrosło jej znaczenie wśród nauk przyrodniczych, lecz przede wszystkim praktyczne efekty jej badań w sposób istotny zmieniły oblicze współczesnej cywilizacji. Na „zaniedbywanie” chemii przez filozofów przyrody i przyrodoznawstwa miało wpływ szeroko rozpowszechnione przekonanie, że chemia jest subdyscypliną fizyki. Bez wątplenia chemia nie mogłaby się rozwijać bez osiągnięć fizyki, a zwłaszcza bez fundamentalnych teorii fizycznych. Lecz chemia jest odrębną, w pełni ukształtowaną również pod względem instytucjonalnym nauką przyrodniczą, która posiada wyraźnie określony przedmiot badań. Chemicy badają budowę cząsteczek związków chemicznych i ich właściwości, a przede wszystkim ich reaktywność. Osiągnięcie olbrzymiego postępu w badaniach chemicznych stało się możliwe dzięki opracowaniu podstaw teoretycznych zjawisk chemicznych, lecz kluczowe znaczenie miał rozwój metod badań eksperymentalnych. To dzięki nim chemia stała się w głównej mierze nauką laboratoryjną, w ramach której otrzymano wiele milionów związków chemicznych, niewystępujących w naturze. Ścisłe powiązanie aspektu poznawczego z aspektem wytwórczym zadecydowało o specyfice chemii jako laboratoryjnej nauki przyrodniczej.

Filozofowie chemii sformułowali wiele ontologicznych, epistemologicznych, metodologicznych, semiotycznych, etycznych, a nawet estetycznych problemów, które dotyczą zarówno samej praktyki badawczej chemii, jak i jej poznawczych oraz materialnych wytworów. W ten bardzo bogaty nurt badań nad chemią wpisuje się niniejsza książka. Podejmuję w niej szereg kluczowych zagadnień, wokół których koncentruje się ożywiona dyskusja, jaką od ponad dwudziestu lat prowadzą filozofowie chemii.

W książce przyjąłem spójną perspektywę, z jakiej analizuję praktykę badawczą chemii. Jest nią koncepcja nowego eksperymentalizmu w wersji przedstawionej przez Iana Hackinga w książce *Representing and Intervening* oraz jego koncepcja

nauki laboratoryjnej zawarta w kilku później opublikowanych artykułach. Chemia analizowana w jej świetle jawi się jako paradygmatyczny przykład nauki laboratoryjnej. Głównym celem działalności badawczej chemików jest wytwarzanie nowych substancji. Cele poznawcze są osiągane niejako przy okazji, a działalność teoretyczna chemików umożliwia przede wszystkim konceptualizację i rozwiązanie problemów, przed którymi stają chemicy w trakcie ich działalności laboratoryjnej. Rozwiązując problemy badawcze, nie uciekają się do teorii fundamentalnych, gdyż występowanie takich teorii w chemii jest, moim zdaniem, bardzo dyskusyjne. Koncentrują się przede wszystkim na opracowywaniu metod umożliwiających konstrukcję modeli teoretycznych, które są podstawowym narzędziem służącym do rozwiązywania laboratoryjnych problemów badawczych. Modele teoretyczne budowane w chemii mają charakter metaforycznych. Wykazują, że dla efektywności praktyki eksperymentalnej olbrzymią rolę odgrywają modele (metafory), które są reprezentacjami ikoniczno-symbolicznymi, a więc obrazują modelowane zjawiska. W tym kontekście wskazuję na specyfikę semiotyczną chemii. Szeroki, od strony semiotycznej, wachlarz sposobów reprezentowania obiektów i zjawisk badanych przez chemików umożliwia zrozumienie zachodzących zjawisk, a w konsekwencji projektowanie eksperymentów. Staram się wykazać, że z teoretycznego punktu widzenia reprezentacje graficzne i materialne struktur cząsteczek związków chemicznych nie mogą być interpretowane realistycznie. Wyjaśniając, dlaczego chemicy eksperymentatorzy zazwyczaj traktują je realistycznie, wykazuję, iż takie stanowisko wpływa na efektywność ich praktyki laboratoryjnej. W tym celu odwołuję się do zasady pragmatycznej Peirce'a, która postuluje nadawanie znaczenia teoretycznym konstrukcjom, jeśli tylko można z nich wyprowadzać dyrektywy praktycznego działania. W takim pragmatycznym sensie można mówić o prawdziwości reprezentacji teoretycznych budowanych przez chemików.

W książce rozpatruję również kilka ważnych problemów szczegółowych filozofii chemii. Staram się wykazać, analizując genezę chemii jako nauki, że teza, mówiąca, iż alchemia była protochemią, nie znajduje wystarczająco mocnego uzasadnienia. Argumentuję na rzecz antyredukcjonizmu, polemizując z bardzo rozpowszechnionym, zwłaszcza wśród fizyków, przesądem redukcjonistycznym, zgodnie z którym chemia jest nauką fizykalną, której aparat pojęciowy i prawa w nim formułowane są wyprowadzalne z aparatu pojęciowego i praw fizyki. Podejmuję próbę zastosowania genetyczno-teoretycznej koncepcji wyjaśniania do eksplanacji przebiegu reakcji chemicznych. Wykazuję również, iż praktyka badawcza chemii, będąca przede wszystkim praktyką laboratoryjną, charakteryzuje się znacznie większą stabilnością niż praktyka badawcza fizyki.

*

Książka składa się z trzynastu studiów, z których jednaście było już wcześniej opublikowanych. Ich wydanie w jednym tomie wydaje się w pełni uzasadnione,

gdyż na polskim rynku wydawniczym brakuje pozycji, która podejmowałaby większość problemów analizowanych we współczesnej filozofii chemii i jednocześnie oferowała propozycje ich rozwiązań. Poszczególne studia zamieszczone w książce były pisane jako odrębne artykuły w ciągu ostatnich kilkunastu lat, stąd pojawiają się w nich nieuchronne powtórzenia związane z przyjętą perspektywą, z jakiej analizowałem poszczególne problemy, a także nawiązania do ustaleń poczynionych we wcześniej opublikowanych artykułach. W niektórych tekstach podejmuję wątki, które są obecne w innych artykułach, by ukazać je w nowym kontekście problemowym. Studium otwierające książkę, zatytułowane: *Miejsce filozofii chemii w filozofii przyrodznawstwa. Czy istnieją specyficzne problemy filozoficzne chemii?*, może być uznane za jej właściwy wstęp, gdyż zapoznaje czytelnika z problematyką filozofii chemii i wskazuje na jej specyfikę jako jednej z dziedzin filozoficznej refleksji nad naukami przyrodniczymi.

Wszystkie artykuły zamieszczone w książce zostały ponownie opracowane pod względem redakcyjnym. W studiach wcześniej już opublikowanych wprowadziłem trzy zmiany, aby uniknąć niepotrzebnych powtórzeń. W artykule *O teoretyczności chemii – studium metodologiczne* pominąłem paragraf 2.3, w artykule *O redukcji chemii do fizyki, czyli o pewnym przesądzie filozoficznej refleksji nad nauką* pominąłem fragment paragrafu drugiego, a w artykule *Homo experimentator a spór o realizm laboratoryjny* pominąłem jego ostatni paragraf.

Szczęśliwy zbieg okoliczności sprawił, że pod koniec ubiegłego wieku w Instytucie Filozofii na Uniwersytecie im. Adama Mickiewicza w Poznaniu kilka osób podjęło filozoficzną i metodologiczną refleksję nad chemią. Prekursorskie w tym względzie były badania prowadzone już w latach osiemdziesiątych XX wieku przez Danutę Sobczyńską, zwieńczone publikacją książki pt. *Osobliwości chemii*. W latach dziewięćdziesiątych dołączyli do tej autorki Ewa Zielonacka-Lis, która już od wielu lat analizowała stosowane w chemii sposoby wyjaśniania, oraz autor niniejszej książki. Ta niewielka, lecz jedyna w Polsce, grupa filozofów chemii nawiązała kontakty z czołowymi filozofami chemii na świecie, które owocowały zarówno spotkaniami naukowymi, jak i wspólnymi publikacjami. Dla autora książki inspirację do zainteresowania się filozoficznymi i metodologicznymi problemami chemii, a zwłaszcza molekularnej mechaniki kwantowej, stanowiły wykłady i artykuły Jerzego Konarskiego, który w czasie studiów chemicznych sprawował nad nim opiekę naukową. Bardzo ważny dla powstania niniejszej książki był też pośredni, ale stały kontakt ze współczesną praktyką badawczą chemii organicznej, który zawdzięczam Joannie Zeidler. U wszystkich tych osób zaciągnąłem dług wdzięczności.

Źródła artykułów zamieszczonych w książce

1. *Miejsce filozofii chemii w filozofii przyrodoznawstwa* – „Roczniki Filozoficzne”, t. LIV, nr 2, 2006, s. 313-333.
2. *Co, w jakim celu i w jaki sposób badają chemicy? Współczesne kontrowersje wokół przedmiotu i specyfiki metodologicznej praktyki badawczej chemii* – w: *Filozofia przyrody współcześnie*, M. Kuszyk-Bytniewska, A. Łukasik (red.), Wydawnictwo Universitas, Kraków 2010, s. 111-130.
3. *Czy alchemia była protochemią?* – w: *Pogranicza nauki. Protonauka – Paranauka – Pseudonauka*, W. J. Zon (red.), Wydawnictwo KUL, Lublin 2009, s. 151-164.
4. *O teoretyczności chemii – studium metodologiczne* – w: *Chemia: laboratorium myśli i działań*, D. Sobczyńska P. Zeidler (red.), Wydawnictwo Naukowe IF UAM, Poznań 1999, s. 45-73.
5. *O redukcji chemii do fizyki, czyli o pewnym przesądzie filozoficznej refleksji nad nauką* – w: *Między przyrodoznawstwem, matematyką a humanistyką*, E. Piotrowska, M. Szcześniak, J. Wiśniewski (red.), Wydawnictwo Naukowe IF UAM, Poznań 2000, s. 403-421.
6. *Homo experimentator a spór o realizm laboratoryjny* – w: *Homo experimentator*, D. Sobczyńska, P. Zeidler (red.), Wydawnictwo Naukowe IF UAM, Poznań 2003, s. 105-137.
7. *Spór o status ontologiczny orbitali atomowych i molekularnych w kontekście zagadnienia autonomii chemii* – „Przegląd Filozoficzny”, nr 3, 2007, s. 191-201.
8. *Czy można zaobserwować orbitale? O problemie obserwowalności i realności przedmiotów teoretycznych* – „Filozofia Nauki”, nr 4 (72), 2010, s. 5-22.
9. *Semiotyczny i poznawczy status wzorów strukturalnych związków chemicznych a przyczynowa teoria oznaczania* – w: *Logos – rozum i logika*, P. Leśniewski, Z. Tworak (red.), Wydawnictwo Naukowe IF UAM, Poznań 2001, s. 119-140. Przekład na język angielski: *The Semiotic Status of Structural Formulas and the Causal Theory of Reference*, w: *Chemistry in the Philosophical Melting Pot*, D. Sobczyńska, P. Zeidler, E. Zielonacka-Lis (eds.), Peter Lang, Frankfurt am Main 2004, s. 151-169.

10. *Metodologiczne i semiotyczne aspekty modelowania teoretycznego w chemii* – artykuł publikowany po raz pierwszy.
11. *O funkcjach metafor w praktyce badawczej chemii* – artykuł publikowany po raz pierwszy.
12. *Wyjaśnianie genetyczno-teoretyczne a praktyka eksplanacyjna w chemii organicznej* – „Nowa Krytyka”, nr 16, 2004, s. 175-196.
13. *Spór o stabilność praktyki badawczej nauk empirycznych* – w: *Nauka – humanistyka – człowiek*, J. Kmita, B. Kotowa, J. Sójka (red.), Wydawnictwo Naukowe UAM, Poznań 2005, s. 139-155.

I

Miejsce filozofii chemii w filozofii przyrodoznawstwa

1. Wstęp

Próba określenia miejsca filozofii chemii w filozofii nauki odniesionej do nauk przyrodniczych, a więc w filozofii przyrodoznawstwa, wymaga choćby schematycznej charakterystyki tej ostatniej. Odwołam się w tym zakresie do propozycji Zygmunta Hajduka zawartej w książce *Filozofia przyrody. Filozofia przyrodoznawstwa. Metakosmologia* [Hajduk, 2004, s. 284-290]. W filozofii przyrodoznawstwa można, zdaniem jej autora, wyróżnić dwa podstawowe rodzaje badań: standardowo rozumianą filozofię nauk przyrodniczych oraz przedmiotową filozofię przyrodoznawstwa. W ramach tej pierwszej prowadzi się – w trybie albo bardziej opisowym, albo bardziej normatywnym – analizę procedur badawczych stosowanych w naukach przyrodniczych oraz analizę języka tych nauk. Niewątpliwie w literaturze przedmiotu od co najmniej dwudziestu lat dominują analizy procesu badawczego, który faktycznie ma miejsce w tych naukach, a więc rozważania z zakresu opisowej filozofii nauk przyrodniczych zorientowanej pragmatycznie. Natomiast dociekania z zakresu przedmiotowo rozumianej filozofii przyrodoznawstwa koncentrują się na wytworach nauk przyrodniczych. Jeśli formułowane w ich ramach prawa i teorie są interpretowane realistycznie, to analiza ich treści wpływa na filozoficzny obraz świata tworzony w ramach filozofii przyrody, która pozostaje w ścisłym związku z przedmiotową filozofią przyrodoznawstwa.

Zakładając powyższy podział badań prowadzonych w ramach filozofii przyrodoznawstwa, będę bronił tezy, głoszącej, że filozofia chemii ma niewielkie znaczenie dla przedmiotowo rozumianej filozofii przyrodoznawstwa. Natomiast istotny, i ciągle rosnący, jest jej wkład do standardowo rozumianej filozofii nauk przyrodniczych.

Filozoficzna refleksja nad chemią jako nauką laboratoryjną, która od początku lat dziewięćdziesiątych prowadzona jest na dużą skalę, nie tylko rozszerza problematykę badawczą standardowo rozumianej filozofii przyrodoznawstwa, lecz także skłania do modyfikacji, rewizji lub uszczegółowienia wielu jej wcześniejszych ustaleń. Celem niniejszego artykułu jest uzasadnienie powyższej tezy.

2. Dlaczego filozofia chemii powstała tak późno?

W literaturze z zakresu historii chemii rozpowszechnione jest twierdzenie, że chemia jako nowożytna nauka wyłoniła się z filozofii przyrody Roberta Boyle'a w XVII wieku, a została ukonstytuowana w wieku XVIII przez H. Cavendisha, A. L. Lavoisiera i J. Priestleya, których uważa się za trzech filozofów – twórców nowożytnej chemii [Aykroyd, 1970]. Tak więc filozoficzna geneza chemii nie wzbudza większych kontrowersji, choć należy również wspomnieć o poglądzie, zgodnie z którym chemia wyrosła z alchemii, ta zaś bywa uznawana za przednaukowe stadium jej rozwoju. Alchemia z kolei jest ściśle kojarzona z próbą ukonstytuowania określonej filozofii przyrody, dodajmy: filozofii niezwykle mętnej, w której podstawową rolę odgrywało myślenie mistyczne i praktyki magiczne. Nie wchodząc w skądinąd ciekawy problem genetycznych związków chemii z alchemią, zadeklaruję, że przekonuje mnie stanowisko tych historyków nauki i filozofów chemii, którzy twierdzą, że nie można wykazać, iż miało miejsce ewolucyjne przejście od alchemii do chemii. Cele, które stawiała przed sobą chemia, były zasadniczo odmienne od tych, które chcieli osiągnąć alchemicy, choć nikt nie poddaje w wątpliwość ani wpływu ich praktycznej działalności na powstanie laboratorium chemicznego i ukształtowanie się praktyki eksperymentalnej chemii, ani faktów ustalenia przez alchemików reaktywności i innych właściwości licznych substancji chemicznych¹.

Ze względu na niewątpliwy filozoficzny rodowód chemii musi budzić zaskoczenie fakt, że jej praktyce badawczej i rezultatom tej praktyki przez trzysta lat nie towarzyszyła bardziej rozbudowana, systematyczna refleksja filozoficzna. O powstaniu filozofii chemii jako wyodrębnionej dziedziny refleksji z zakresu filozofii przyrodoznawstwa mówi się dopiero od początku lat dziewięćdziesiątych XX wieku².

¹ Niektórzy historycy nauki podejmują próby wyodrębnienia z dorobku alchemii tych jej osiągnięć, które z punktu widzenia nowożytnej chemii można by uznać za *stricte* chemiczne. Na przykład A. C. Crombie wyróżnia chemię średniowieczną, „której celem było wyjaśnienie szczególnego rodzaju zmian będących przedmiotem zainteresowania chemii, mianowicie zmian jakościowych i substancjalnych w nieożywionych substancjach strefy ziemskiej”, lecz dodaje, iż „teoria ta splotła się nierozłącznie z alchemią i połączenie to określiło charakter badań chemicznych na przeciąg czterech stuleci” [Crombie, 1960, s. 159-160].

² O powstaniu filozofii chemii jako odrębnej dyscypliny filozoficznej w ramach filozofii przyrodoznawstwa decydują kryteria instytucjonalne, tj.: ukazywanie się profesjonalnych czasopism

Wyjaśniając ten fakt, filozofowie chemii powołują się bardzo często na wpływ stanowiska Kanta, który uważał, że chemię należy uznać raczej za usystematyzowaną sztukę niż za naukę, gdyż w bardzo niewielkim stopniu jest ona zmatematyzowana, a jej zasady i prawa są jedynie empiryczne, nie są więc apodyktycznie pewne³. Należy jednakże wskazać także na inny, nie mniej ważny, powód, dla którego pozycja filozofii chemii w filozofii przyrodoznawstwa jest marginalna w porównaniu z pozycją filozofii fizyki czy biologii. Otóż uzyskiwane przez chemików wyniki ich badań nie implikowały – w przeciwieństwie do wyników badań uzyskiwanych przez fizyków i biologów – szczególnie ważnych konsekwencji dla przedmiotowej filozofii przyrodoznawstwa czy filozofii przyrody. Wkład fizyki i biologii w udzielane przez filozofów przyrody odpowiedzi na pytania typu: „Jaka jest struktura świata przyrody?” lub „Jakim zasadom rozwoju podlega przyroda nieożywiona i ożywiona?”, był nieporównanie większy niż wkład chemii. Nie bagatelizując znaczenia na przykład koncepcji atomistycznej Daltona czy układu okresowego pierwiastków Mendelejewa dla filozoficznych koncepcji budowy materii w XIX wieku bądź roli tzw. ewolucji chemicznej w koncepcjach biogenezy, należy stwierdzić, że chemia ani nie generowała ważnych pytań, które były stawiane w obrębie filozofii przyrody, ani nie wpływała w zasadniczym stopniu na obraz świata przez nią tworzony⁴. Za przyczynę tego stanu rzeczy uznaje się często fakt, że chemia bada świat przyrody na pośrednim, molekularnym stopniu złożoności materii. Tym samym jej koncepcje nie posiadają ani tak podstawowego charakteru, jak teorie fizyki, ani nie dotyczą tak złożonych i – chciałoby się powiedzieć – doniosłych filozoficznie obiektów, jakie bada biologia⁵. Jeśli to stwierdzenie uzupełnimy o powszechnie akceptowaną wśród filozofów nauki tezę o zasadniczej redukowalności chemii do fizyki, to uzyskamy odpowiedź na pytanie o przyczyny marginalizowania, zaniedbywania, a nawet lekceważenia filozoficznej refleksji nad chemią w filozofii przyrodoznawstwa.

Sądzę jednak, że można wskazać na inną, nie mniej istotną przyczynę tego stanu rzeczy, która leży raczej po stronie filozofii przyrodoznawstwa. Otóż, jak powszechnie wiadomo, przez prawie cały XX wiek w filozofii nauk przyrodniczych dominował

naukowych oraz monografii i prac zbiorowych wyłącznie jej poświęconych, powstanie międzynarodowego towarzystwa filozofii chemii oraz fakt organizowania wielu konferencji z jej zakresu. Na temat historii filozofii chemii zobacz: [van Brakel, 2000(a), s. 1-40]. Natomiast bibliografia prac z filozofii chemii znajduje się na stronie internetowej czasopisma „Hyle. An International Journal for the Philosophy of Chemistry” – <http://www.hyle.org/service/biblio.htm>.

³ Zobacz [Fierz-David, 1958, s. 14].

⁴ Powyższe przekonanie bywa często kwestionowane. Część autorów broni tezy, że w wieku XIX to właśnie chemia miała zasadniczy wpływ na kształtowanie się naukowego obrazu świata. Obok podkreślania roli wspomnianych już faktów, stawia się również tezę, że to pod wpływem chemii w latach 1870-1900 miała miejsce nowa faza w rozwoju cywilizacji naukowo-technicznej [Baracca, 1996, s. 61-80].

⁵ Zobacz na ten temat [Theobald, 1977, s. 139].

pogląd, zgodnie z którym za metodologiczny wzorzec nauki empirycznej uznawana były fizyka. Wpływał on z mocno ugruntowanego w filozofii nauki przekonania, iż podstawowymi wytworami nauk przyrodniczych, a szerzej – empirycznych, które powinny być przedmiotem metodologicznej i filozoficznej refleksji, są teorie naukowe. Stopień teoretycznego zaawansowania danej dyscypliny naukowej był uznawany za podstawowy miernik jej naukowości. Natomiast zdolność do tworzenia teorii była ściśle wiązana ze stopniem zmatematyzowania jej języka i możliwością budowania systemów dedukcyjnych. Teorie empiryczne, ujmowane jako sformalizowane systemy dedukcyjne, spełniały warunki, które umożliwiały ich analizę za pomocą metod formalno-logicznych. Wszystkie pozostałe „segmenty” praktyki badawczej nauk przyrodniczych były analizowane w świetle teorii, co w szczególności dotyczyło praktyki eksperymentalnej tych nauk. Jej rola była ograniczana do procedur sprawdzania teorii naukowych oraz do sytuacji, w których dokonuje się wyboru pomiędzy konkurencyjnymi teoriami. Co więcej, eksperymentowanie, w każdym jego aspekcie, miało być ściśle uzależnione od teorii⁶.

W przeciwieństwie do fizyki, chemia w niewielkim stopniu spełniała, powyżej zarysowany – zorientowany na teorie naukowe – ideał nauki przyrodniczej. Była to, jak sądzę, główna przyczyna braku zainteresowania filozofów nauki chemią, której praktyka badawcza jest przede wszystkim praktyką laboratoryjną. Szczegółowe analizy tej praktyki, dokonywane przez historyków nauki, bardzo nielicznych metodologów i filozofów nauki zainteresowanych chemią, a także samych chemików, nie spotykały się z większym odzewem, gdyż nie pasowały do „teoretycznego” paradygmatu. Pozycja filozofii chemii w standardowo rozumianej filozofii przyrodoznawstwa mogła więc ulec zmianie dopiero wraz z zaproponowaniem nowego paradygmatu badań nad naukami przyrodniczymi. Został on wypracowany przez filozofów nauki zwanych „nowymi eksperymentalistami”. Nurt ten jest na ogół, lecz niesłusznie, kojarzony przede wszystkim z I. Hackingiem, autorem książki *Representing and Intervening* [Hacking, 1983], i filozoficznymi tezami przez niego głoszonymi. Tymczasem pod tę nazwę podpada szeroka grupa filozofów nauki, którzy za główny przedmiot metodologicznych i filozoficznych analiz uznali eksperymentalną praktykę badawczą nauk przyrodniczych⁷. Rezultatem ich działalności były nie tylko szczegółowe opracowania różnych aspektów tej praktyki, lecz przede wszystkim stworzenie odmiennego obrazu nauk przyrodniczych w standardowo rozumianej filozofii przyrodoznawstwa.

⁶ Zagadnienie to omówiłem szeroko w artykule *Nowy eksperymentalizm a teoretycyzm. Spór o przedmiot i sposób uprawiania filozofii nauki* [Zeidler, 1994, s. 87-108].

⁷ Przyznał to sam I. Hacking, postulując, że termin „nowy eksperymentalizm” powinien oznaczać przede wszystkim przesunięcie zainteresowania z teorii na eksperyment niezależnie od tego, w jakiej dziedzinie refleksji nad nauką ma ono miejsce i z jakich filozoficznych pozycji jest dokonywane [Hacking, 1995/1996, s. 537-538].

Z punktu widzenia filozofii chemii za szczególną zasługę I. Hackinga należy uznać jego koncepcję nauk laboratoryjnych, wypracowaną na początku lat dziewięćdziesiątych XX wieku. Właśnie z perspektywy „nowego eksperymentalizmu” zorientowanego na nauki laboratoryjne badania filozofów chemii uzyskują istotną rangę w standardowo rozumianej filozofii przyrodoznawstwa. Należy zauważyć, że zarówno pierwotna koncepcja nauk eksperymentalnych I. Hackinga, przedstawiona w *Representing and Intervening*, jak i jej późniejsze uszczegółowienie odnoszące się do nauk laboratoryjnych, zaprezentowane w artykule *The Self-Vindication of the Laboratory Science* [Hacking, 1992(a), s. 29-64], zostały wypracowane przede wszystkim w oparciu o analizę praktyki eksperymentalnej fizyki. Sądzę, i będę starał się to przekonanie w skrócie uzasadnić, że analiza praktyki badawczej chemii upoważnia do sformułowania tezy, iż to chemia, a nie fizyka, jest paradygmatycznym przykładem nauki laboratoryjnej. Badania z zakresu filozofii chemii mogą więc w istotny sposób wpłynąć na modyfikację koncepcji nauki laboratoryjnej zaproponowanej przez Hackinga. Mogą również umożliwić ponowne postawienie i nowatorskie rozwiązanie niektórych „starych” problemów standardowo rozumianej filozofii przyrodoznawstwa.

3. Nauka laboratoryjna w ujęciu Iana Hackinga

Praktyka badawcza nauk przyrodniczych to, w ujęciu I. Hackinga, aktywność polegająca na rozwiązywaniu problemów badawczych, z których większość powstaje w trakcie, dominującej w tych naukach, praktyki eksperymentalnej. Jednakże to, co wyróżnia nauki eksperymentalne, a zwłaszcza laboratoryjne nauki przyrodnicze, to możliwość kreowania przez badaczy nowych zjawisk, a „interweniowanie” i „manipulowanie” stają się centralnymi pojęciami koncepcji autora *Representing and Intervening*. Hacking, śledząc przede wszystkim praktykę eksperymentalną fizyki, doszedł do wniosku, że należy odróżnić dwie podstawowe kultury nauki: teoretyczną i eksperymentalną, które uznał za relatywnie autonomiczne, a ta ostatnia daje, jego zdaniem, względnie niezależny wkład w rozwój nauki. Stwierdzenie to, prowadzące do rozróżnienia na fizykę teoretyczną i fizykę eksperymentalną, wydaje się w pełni uzasadnione w świetle analizy praktyki badawczej tej nauki. Dziesięć lat później, w artykule *The Self-Vindication of the Laboratory Science*, Hacking wyodrębnił spośród nauk eksperymentalnych nauki laboratoryjne.

Zdaniem Hackinga należy rozpatrywać trzy grupy składników konstytuujących naukę laboratoryjną⁸. Pierwszą stanowi szeroko rozumiane teoretyczne

⁸ Przedstawiając taksonomię składników nauki laboratoryjnej w ujęciu Hackinga, wykorzystuję fragment artykułu: *Spór o stabilność praktyki badawczej nauk laboratoryjnych* [Zeidler, 2005(a), s. 144-151].

„zaplecze” eksperymentów, druga obejmuje przedmiotowe składniki praktyki laboratoryjnej, a trzecia odnosi się do wyników uzyskiwanych w badaniach laboratoryjnych⁹. Intelktualne składniki praktyki laboratoryjnej to: pytania, wiedza podstawowa, teoria systematyczna i hipotezy lokalne (fenomenologiczne)¹⁰. W dyscyplinach laboratoryjnych pytania dotyczą przede wszystkim samej praktyki laboratoryjnej, rzadziej odnoszą się do jej zaplecza teoretycznego, a jeszcze rzadziej zadawane są pytania – stawiane najczęściej przez filozofów nauki – które dotyczą oceny konkurujących teorii w świetle wyników badań laboratoryjnych. Do elementów stanowiących „zaplecze” teoretyczne eksperymentu należy również wiedza podstawowa, do której Hacking zalicza nieusystematyzowane przekonania badaczy, bez których przeprowadzenie eksperymentów nie byłoby możliwe. Bardziej wyczerpująca charakterystyka tej wiedzy nie wydaje się możliwa i dlatego twórca „nowego eksperymentalizmu” rezygnuje z jej przedstawienia. Można jedynie podjąć się próby jej rekonstrukcji wówczas, gdy rozważa się konkretne przypadki z zakresu praktyki laboratoryjnej określonej nauki przyrodniczej. Ważne jest w tym kontekście stwierdzenie, że wiedza ta może pochodzić z różnych dziedzin nauki, a nawet z praktyki życia codziennego. Zdarza się na przykład dość często w praktyce laboratoryjnej z zakresu chemicznej syntezy organicznej, że jedynym dobrym uzasadnieniem syntez nowych związków chemicznych są ich przewidywane farmakologiczne właściwości. Oczywiście to wiedza teoretyczna eksperymentatorów, a także doświadczenie wyniesione z praktyki laboratoryjnej decydują o tym, że daną syntezę uważają oni za możliwą do przeprowadzenia. Trzeci składnik zaplecza intelektualnego eksperymentatora stanowią ogólne i zarazem najczęściej stosowane prawa teorii naukowej, choć należy w tym kontekście mówić raczej w liczbie mnogiej – o teoriach naukowych, gdyż eksperymentowanie bardzo często zakłada prawa fundamentalne należące do różnych teorii. Prawa te mogą nie posiadać same przez się eksperymentalnych konsekwencji, lecz dostarczają uzasadnienia teoretycznego dla przypuszczalnego przebiegu planowanego eksperymentu. Najbardziej złożony i niejednoznaczny charakter posiada ten element teoretycznego „zaplecza” eksperymentatora, który Hacking określił mianem *topical hypotheses*. Zalicza do nich hipotezy lokalne o charakterze fenomenologicznym,

⁹ Zapropionowana przez Hackinga *taksonomia* elementów składających się na naukę laboratoryjną nie spełnia podstawowych kryteriów metodologicznych nakładanych na klasyfikację i może być uznana co najwyżej za próbę ich pogrupowania. Również nazwy stosowane przez Hackinga na ich oznaczenie są bardzo mylące. Dlatego na ogół rezygnuję z próby ich dosłownego tłumaczenia, dążąc jedynie do przybliżenia roli, jaką odgrywają one w nauce laboratoryjnej.

¹⁰ Wiele elementów praktyki eksperymentalnej nauki, które zostały wyróżnione przez Hackinga, było analizowanych przez innych filozofów nauki zajmujących się badaniami eksperymentalnymi. Zobacz na przykład książkę D. Sobczyńskiej pt. *Sztuka badań eksperymentalnych* [1993]. Jej autorka nie wyróżniła jednakże nauk laboratoryjnych spośród nauk eksperymentalnych.

które mają wiązać prawa ogólne systematycznej teorii ze zjawiskami. W tradycji neopozytywistycznej były to *reguły korespondencji* Carnapa, choć Hacking przywołuje w tym kontekście *prawa pomostowe* Hempla i *słownik* Campbella. Ponieważ, podobnie jak inni współcześni zwolennicy tradycji empiryzmu, autor *The Self-Vindication of the Laboratory Science* rezygnuje z dychotomii: terminy teoretyczne – terminy obserwacyjne, dlatego utożsamia ten element teoretycznego „zaplecza” eksperymentu ze zbiorem procedur aproksymowania i modelowania, które są przedmiotem analiz Cartwright [Hacking, 1992(a), s. 45]. W najbardziej ogólnym sensie elementy tej grupy mają podpadać pod to, co Kuhn nazwał *artykulacją* teorii w celu powiązania jej z doświadczeniem. Ten zmienny element myślowej aktywności eksperymentatorów posiada dla praktyki laboratoryjnej znaczenie decydujące, gdyż to właśnie on, a nie systematyczne teorie, decyduje, zdaniem Hackinga, o jej przebiegu. Ostatnim składnikiem o charakterze teoretycznym jest modelowanie stosowanej aparatury badawczej, w którym wykorzystuje się teorie opisujące sposób zachowywania się aparatury i jej oddziaływanie z przedmiotami, z którymi lub na których się eksperymentuje.

Do przedmiotowych składników praktyki laboratoryjnej Hacking zalicza wszystkie te jej elementy, które podpadają pod kategorię rzeczy. Należą do niej nie tylko obiekty, na których się eksperymentuje, lecz również cała aparatura laboratoryjna, a także sami eksperymentatorzy. Wybór przedmiotów eksperymentowania jest w sposób oczywisty zależny od stawianych pytań. Natomiast aparatura badawcza, która służy do detekcji lub przetwarzania (modyfikowania) obiektów, jest uzależniona od różnorodnych założeń teoretycznych, opisujących oddziaływanie aparatury z badanymi obiektami. To samo dotyczy tzw. „generatorów” danych, którymi mogą być odpowiednie urządzenia, lecz także sami badacze. Trzecią grupę elementów stanowią dane (wyniki) eksperymentów, a dokładniej – wszystkie operacje, jakie mogą być na nich dokonywane. Oprócz otrzymywania danych (wyników) są to: oszacowanie danych, ich redukowanie, analizowanie i wreszcie – interpretacja. Operacje te w różnym stopniu wymagają zastosowania określonych elementów teoretycznych należących do pierwszej grupy składników konstytuujących naukę laboratoryjną. Choć Hacking zdaje sobie sprawę, że w laboratorium wyniki badań eksperymentalnych nie są dane, lecz są uzyskiwane, a nawet – można powiedzieć – wytwarzane, to wyróżnia dane jako względnie ateoretyczne przedstawienia wyników badań: odczyty przyrządów pomiarowych, wykresy, fotografie, tabele itp. Można zgodzić się z jego analizą danych jedynie wtedy, gdy pod pojęciem *teoretycznego ujęcia wyników badań* będziemy rozumieli ich interpretację w świetle teorii. Jednakże, nawet abstrahując od faktu pominięcia w przeprowadzonej analizie teorii „zamrożonych” w urządzeniach pomiarowych, wystarczy zauważyć, że wyniki badań laboratoryjnych są przedstawiane przez współczesne urządzenia rejestrujące jako wielkości wymiarowe, co już zakłada odpowiednie prawa teorii. Jeśli przedstawienie wyników przybiera postać wykresu lub tabeli,

to udział założeń teoretycznych w tworzeniu tej reprezentacji jest niewątpliwy. Większość z wymienionych przez Hackinga sposobów przedstawiania danych wymaga przeprowadzenia operacji, które autor *The Self-Vindication of the Laboratory Science* zaliczył do trzeciej grupy składników. Należy do nich analizowanie danych, które zależy od wybranych pytań, lokalnych hipotez, sposobów modelowania aparatów i innych elementów „myślowego” zaplecza eksperymentu. Niewątpliwie najbardziej teoretyczny charakter posiada interpretacja danych, choć – w przeciwieństwie do Hackinga – sądzę, że jest ona dokonywana zazwyczaj w świetle modeli teoretycznych, a nie teorii systematycznej. Tak więc teoretyczne składniki nauki laboratoryjnej są istotne nie tylko przy projektowaniu i przeprowadzaniu eksperymentu, lecz również przy uzyskiwaniu danych i ich szeroko rozumianej analizie.

W opinii Hackinga nauki laboratoryjne charakteryzuje nowy styl rozumowania naukowego, który nazywa on stylem laboratoryjnym, choć należałoby raczej mówić o laboratoryjnym stylu badań naukowych [Hacking, 1992(b), s. 3]¹¹. To, co wyróżnia ten styl, to budowa aparatury w celu wytwarzania nowych zjawisk, które mogą potwierdzać lub obalać hipotetyczne modele opisujące sposób jej działania. Od stylu teoretyków, który nastawiony jest na reprezentowanie odkrywanych praw przyrody, odróżnia go dążenie do interweniowania w świat i kreowanie nowych zjawisk [Hacking, 1992(b), s. 6-7]. Jest rzeczą znamioną, że okres, w którym styl ten się narodził, symbolizuje, jego zdaniem, fakt zbudowania pompy powietrznej przez Boyle’a w XVII wieku. Tak więc ukonstytuowanie się stylu laboratoryjnego wiąże się ściśle z początkami nowożytnej chemii. Niewątpliwie, chemia jest nauką, w której styl laboratoryjny jest dominujący, a jego wewnętrzną charakterystykę określają wzajemne relacje, w jakich pozbudowane składniki tworzące jej laboratoryjną praktykę badawczą. Za uznaniem chemii za paradygmatyczny przykład nauki laboratoryjnej przemawia również fakt, że rozważania z zakresu chemii teoretycznej, które nie są związane chociażby pośrednio z praktyką laboratoryjną, stanowią nieznaczny ułamek całej praktyki badawczej tej nauki. Można nawet zaryzykować twierdzenie, że nie istnieje chemia teoretyczna jako względnie autonomiczna subdyscyplina chemii na wzór fizyki teoretycznej.

¹¹W rozważaniach nad stylami ‘rozumowań’ Hacking nawiązał do stylów „naukowego myślenia” wyróżnionych przez Crombiego. Styl laboratoryjny wyłania się, zdaniem Hackinga, z połączenia dwóch stylów wyodrębnionych przez Crombiego: stylu charakteryzującego się eksperymentowaniem w celu kontroli postulatów teoretycznych oraz w celu poznania przez obserwację i pomiar, a także stylu polegającego na konstruowaniu modeli – analogów [Hacking, 1992(b), s. 4-7].

4. Chemia jako paradygmatyczny przykład nauki laboratoryjnej

W licznych pracach z filozofii chemii – zwłaszcza tych, które zostały opublikowane w ciągu ostatnich piętnastu lat – analizowano wiele problemów, które są niejako implikowane przez, zarysowaną skrótowo w poprzednim paragrafie, taksonomię składników laboratoryjnej praktyki badawczej¹². W rezultacie tych analiz wiele tez, przyjmowanych w standardowo rozumianej filozofii przyrodoznawstwa, powinno ulec istotnej modyfikacji, a niekiedy zasadniczej rewizji¹³. Przykładowo wymienię i krótko scharakteryzuję niektóre z nich.

1. Teza o stabilności nauk laboratoryjnych. Zdaniem Hackinga składniki laboratoryjnej praktyki badawczej „dopasowują” się do siebie, tworząc samouwiarygodniającą się strukturę, która zapewnia stabilność tej praktyce. Teza ta pozostaje w opozycji do, dominującego w teoretycznie nastawionej filozofii przyrodoznawstwa, obrazu zasadniczo niestabilnej praktyki badawczej nauk przyrodniczych, który ma być konsekwencją zmieniających się, konkurujących ze sobą, a często niewspółmiernych koncepcji teoretycznych. Teza o niestabilności tych nauk jest niejako implikowana przez koncepcje T. Kuhna [Kuhn, 1985, 2001] i P. Feyerabenda [Feyerabend, 1979, 1996], a w skrajnej wersji została przedstawiona przez J. F. Lyotarda w książce *Kondycja ponowoczesna* [Lyotard, 1997]. Ze zwolennikami tego poglądu trudno jest polemizować, jeśli broni się tezy o stabilności nauk laboratoryjnych w taki sposób, jak to uczynił Hacking, odwołując się do analizy praktyki badawczej fizyki. Konkurencyjność systematycznych (fundamentalnych) koncepcji teoretycznych z danej dziedziny fizyki i ich mocny wpływ na praktykę eksperymentalną tej nauki jest trudny do podważenia. Jeśli natomiast odwołamy się do wyników analiz praktyki laboratoryjnej chemii, które w odmiennym świetle ukazują rolę „zaplecza” teoretycznego w działalności eksperymentalnej chemików, to teza o stabilności nauki laboratoryjnej, przynajmniej w odniesieniu do chemii laboratoryjnej, stanie się dobrze uzasadniona¹⁴. Jest to przede wszystkim konsekwencją znacznie mniejszego uzależnienia praktyki laboratoryjnej chemii od teorii systematycznych (fundamentalnych).

¹²Filozofowie chemii w niewielkim stopniu nawiązywali bezpośrednio do koncepcji nauki laboratoryjnej I. Hackinga. Ich analizy miały charakter niezależny i może dlatego dostarczają wartościowych egzemplifikacji licznych ustaleń autora *The Self-Vindication of the Laboratory Science*. Odnosi się to również do pierwszej polskiej książki poświęconej w całości filozofii i metodologii chemii pt. *Osobliwości chemii* [Sobczyńska, 1984], która została opublikowana, zanim I. Hacking sformułował swoją koncepcję nauki laboratoryjnej.

¹³W artykule *Chemia i filozofia. Czy istnieją specyficzne problemy filozoficzne chemii?* [Zeidler, 2002] analizowałem zagadnienie istnienia specyficznych problemów filozoficznych chemii.

¹⁴Zagadnienie stabilności nauk laboratoryjnych było przedmiotem rozważań zawartych w artykule *Spór o stabilność praktyki badawczej nauk empirycznych* [Zeidler, 2005(a), s. 135-155].

2. Teza o prymacie praktyki eksperymentalnej nad praktyką teoretyczną w naukach laboratoryjnych. Teoretyczność chemii jako nauki laboratoryjnej, ukazywana w licznych pracach z zakresu filozofii chemii, w znacznie większym stopniu odpowiada charakterystyce teoretyczności nauk przyrodniczych w ujęciu „nowych eksperymentalistów” niż teoretyczność fizyki¹⁵. To, czy w chemii zostały sformułowane jakieś teorie fundamentalne, jest przedmiotem ciągłych kontrowersji. Oczywiście stosuje się, zaadaptowany do opisu zjawisk molekularnych, aparat pojęciowy i prawa takich teorii fundamentalnych, jak na przykład termodynamiki czy mechaniki kwantowej. Nie są to jednakże teorie chemii, lecz fizyki. Nie powstała jak dotąd np. fundamentalna teoria reaktywności chemicznej o dużej mocy przewidywczą, która dostarczałaby uniwersalnych dyrektyw sterujących praktyką laboratoryjną w zakresie syntezy. Zamiast tego dysponujemy szczegółowym katalogiem typów reakcji chemicznych, który zawiera opisy (mechanizmy) ich przebiegu sformułowane w aparacie pojęciowym różnych koncepcji, stanowiących bazę teoretyczną praktyki syntetycznej chemii nieorganicznej i organicznej. Moc przewidywczą tych opisów jest silnie uzależniona od warunków, w jakich przeprowadza się określone syntezy. W literaturze z zakresu filozofii chemii podkreśla się kluczową rolę, jaką w praktyce laboratoryjnej chemii odgrywają hipotezy lokalne i hipotezy modelujące działanie aparatury, a także udział bardzo szerokiej i niejednorodnej wiedzy podstawowej. To, na co w filozofii chemii kładzie się szczególnie nacisk, to fakt zestrojenia w praktyce laboratoryjnej chemii „zaplecza” teoretycznego z jej składnikami przedmiotowymi oraz metodami otrzymywania i opracowywania danych. Dzięki temu stosunkowo rzadko mamy w niej do czynienia z ostrymi wewnętrznymi sporami co do oceny stosowanych metod i procedur badawczych, to zaś sprawia, że praktyka laboratoryjna chemii jest względnie stabilna, a jej zmiany mają charakter ewolucyjny.

3. Problem redukcji chemii do fizyki. W filozofii nauk przyrodniczych jest powszechnie akceptowane przekonanie o możliwości redukcji chemii do fizyki¹⁶. K. Popper twierdził nawet, że jest to paradygmatyczny przypadek redukcji [Popper, 1992, s. 370]. Jednakże najczęściej przyjmowany w filozofii nauki dedukcyjny model redukcji, zgodnie z którym prawa teorii redukowanych z zakresu chemii powinny wynikać logicznie z praw teorii redukujących z zakresu fizyki i założeń dodatkowych, nie może być zastosowany nie tylko ze względu na – już wspomnianą – niewielką liczbę fundamentalnych teorii chemii. Nawet redukcja teorii

¹⁵Zagadnienie teoretyczności chemii jest szeroko dyskutowane w literaturze z zakresu filozofii chemii. Omówiłem je szczegółowo w artykule *O teoretyczności chemii – studium metodologiczne* [Zeidler, 1999(a), s. 45-73].

¹⁶Problem redukcji chemii do fizyki analizowałem w artykule *O redukcji chemii do fizyki, czyli o pewnym przesądzie filozoficznej refleksji nad nauką* [Zeidler, 2000(a), s. 403-421]. Artykuł zawiera również obszerną bibliografię dotyczącą tego zagadnienia.

z zakresu molekularnej mechaniki kwantowej do mechaniki kwantowej, w której nie występuje problem niejednorodności języków teorii redukowanej i redukującej, napotyka na poważne trudności natury matematycznej, wynikające z faktu, że rozwiązanie równania Schrödingera dla cząsteczek wymaga przyjęcia szeregu przybliżeń, a dla dużych cząsteczek obliczenie np. wartości energii stanu podstawowego wiąże się z wprowadzeniem parametrów, których wartości uzyskiwane są eksperymentalnie. Zastosowanie nowoczesnych metod obliczeniowych, wykorzystujących superszybkie komputery, znacznie ułatwiło dokonywanie obliczeń, lecz bynajmniej nie przesądziło sporu na rzecz redukcjonizmu. Nie ulega wątpliwości, że elementy (w sensie mereologicznym) układów chemicznych (atomy, elektrony, jądra atomowe, protony, neutrony) są opisywane przez fizykę, lecz w układach chemicznych – przede wszystkim cząsteczkach – wykazują nowe właściwości i powinny być analizowane z chemicznego punktu widzenia. Takie pojęcia, jak: aromatyczność, kwasowość, zasadowość, grupa funkcyjna, efekt podstawnika, nie mogą zostać zmatematyzowane ani jednoznacznie zdefiniowane [Hoffmann, 1995, s. 20]. Ich sens jest konstytuowany przede wszystkim przez laboratoryjną praktykę badawczą chemii, a tego aspektu tworzenia się znaczeń terminów stosowanych w chemii nie sposób uwzględnić w trakcie rozważań prowadzonych nad zagadnieniem redukcji chemii do fizyki. Jedno z centralnych pojęć chemii – pojęcie wiązania – posiada różne eksplikacje w języku mechaniki kwantowej, lecz jego sens może być oddany jedynie na poziomie chemicznym, gdyż jest ono stosowane do opisu i wyjaśniania właściwości specyficznie chemicznych, przede wszystkim reaktywności, która jest ujawniana w trakcie badań laboratoryjnych [Scerri, McIntyre, 1997, s. 220].

4. Wpływ aparatury badawczej na rozwój nauk laboratoryjnych. Truizmem jest stwierdzenie, że rozwój technologii wpływa w decydujący sposób na aparaturę badawczą stosowaną w laboratoriach, a tym samym na wyniki nauk laboratoryjnych. Jednakże z perspektywy filozofii nauki zorientowanej na teorie naukowe rozwój technologii, a tym samym poziom wyposażenia laboratoriów, jest uznawany za konsekwencję stanu zaawansowania teoretycznego nauk przyrodniczych – zwłaszcza fizyki. Oczywiście współcześni filozofowie nauki zdają sobie sprawę, że zachodzi w tych naukach swoiste „sprzężenie zwrotne” pomiędzy stanem ich teoretycznego zaawansowania a rozwojem technologii i praktyki laboratoryjnej. Jednakże to analiza praktyki laboratoryjnej chemii dostarcza wielu przykładów ukazujących silny wpływ zmian zachodzących w wyposażeniu laboratorium chemicznego na stan wiedzy chemicznej. Doskonałym przykładem jest współczesna chemia analityczna, która wprowadziła do praktyki laboratoryjnej styl badań instrumentalnych¹⁷. Metody chemii instrumentalnej są stosowane na szeroką skalę

¹⁷ Jest to teza D. Sobczyńskiej sformułowana w: [Sobczyńska, 1998, s. 196-197]. Zobacz również na ten temat [Sobczyńska, 1999, s. 89-110].

nie tylko w tej nauce i niewątpliwie przyczyniły się do tego, co nazywa się niekiedy rewolucją aparaturową w naukach przyrodniczych. Jej składnikiem było na przykład połączenie współczesnej techniki informatycznej z nowoczesnymi technikami spektroskopowymi, czego konsekwencją jest rejestracja widm o bardzo wysokiej rozdzielczości, które dostarczają wielu nowych danych, np. o strukturze cząsteczek związków chemicznych. Dane te zmuszają chemików do rewizji zapatrywań na modele teoretyczne reprezentujące struktury tych cząsteczek¹⁸.

5. Spór o realizm laboratoryjny – problem eksperymentalnych kryteriów istnienia przedmiotów teoretycznych chemii. Spór o realizm w filozofii nauki jest przede wszystkim sporem o status poznawczy teorii naukowych. I. Hacking [1983] zaproponował jego zasadnicze przeorientowanie, przyjmując, że powinien być on rozpatrywany z punktu widzenia praktyki eksperymentalnej laboratoryjnych nauk przyrodniczych. Centralnym problemem staje się wówczas kwestia istnienia przedmiotów nieobserwowalnych (teoretycznych), które są postulowane przez teoretyczne składniki praktyki laboratoryjnej. I. Hacking – podobnie jak N. Cartwright [1983] – przyjmuje stanowisko dualistyczne, zgodnie z którym uzasadnione jest przekonanie o istnieniu przedmiotów teoretycznych, jakimi badacze posługują się w praktyce eksperymentalnej w celu wytworzenia nowych zjawisk, przy równoczesnym odrzuceniu prawdziwości fundamentalnych praw i teorii opisujących te przedmioty¹⁹. Realistycznie mogą być interpretowane jedynie prawa „niskiego poziomu”, które nazywa się prawami fenomenologicznymi lub eksperymentalnymi. Powyższa opinia nie jest jednakże powszechna wśród *nowych eksperymentalistów*. Allan Franklin głosi – w swej najnowszej książce – stanowisko, które można określić mianem *realizmu całościowego*, gdyż realistycznie traktuje zarówno *teoretyczne przedmioty eksperymentatora*, jak i prawa oraz teorie zakładane w badaniach eksperymentalnych [Franklin, 1999]. Jego zdaniem to badacze eksperymentatorzy posiadają uzasadnione racje, aby sądzić, że odpowiednie prawa nauki są prawdziwe, a także przyjmować, że istnieją przedmioty teoretyczne, za pomocą których i na których się eksperymentuje. W jego przekonaniu „nie ma żadnych antyrealistów w laboratorium”²⁰.

Praktyka laboratoryjna chemii dostarcza bogatego materiału, który może być wykorzystany w analizie sporu o realizm laboratoryjny. I. Hacking uważa, że

¹⁸ Zobacz na ten temat [Zeidler, 2000(b), s. 17-34].

¹⁹ Spór o realizm laboratoryjny rozważałem szczegółowo w artykule *Homo experimentator a spór o realizm laboratoryjny* [Zeidler, 2003, s. 105-137].

²⁰ Stwierdzenie to jest tytułem jednego z rozdziałów jego książki *Can that Be Wright?* [Franklin, 1999]. Należy podkreślić, że Franklin sformułował swoje stanowisko na podstawie analizy poglądów i działań podejmowanych przez uczonych w laboratoriach. Równocześnie autor ten zaznaczył, iż nie twierdzi, że prawa nauki mogą być prawdziwe w sensie absolutnym, a przedmioty teoretyczne „rzeczywiście” istnieją [Franklin, 1999, s. 160].

manipulowanie przedmiotami i kreowanie nowych zjawisk jest najmocniejszym argumentem na rzecz istnienia przedmiotów teoretycznych i ‘przekształcania’ ich w przedmioty eksperymentatora. Natomiast, jego zdaniem, argumenty będące rezultatem badań dokonywanych „na” przedmiotach, np. pomiary właściwości tych przedmiotów, są konkluzywne w znacznie mniejszym stopniu, gdyż można podać wiele przykładów błędnych pomiarów. Powyższe stanowisko nie wytrzymuje krytyki z punktu widzenia analizy laboratoryjnej praktyki badawczej chemii w zakresie stwierdzania przez chemików istnienia cząsteczek związków chemicznych o określonym składzie i strukturze. Okazuje się bowiem, że na ogół za wystarczające w tym względzie uznawane są badania pomiarowe właściwości cząsteczek związków chemicznych, np. analiza elementarna, badania spektroskopowe, chromatograficzne i inne. Kreowanie nowych zjawisk tylko w szczególnych sytuacjach uważane jest za argument rozstrzygający na rzecz ich istnienia²¹. Należy również zauważyć, że stosowane w laboratoryjnej praktyce badawczej chemii kryteria istnienia cząsteczek określonego związku chemicznego nie przesądzają o realistycznej interpretacji modeli teoretycznych reprezentujących skład i strukturę tych cząsteczek.

6. Modele i modelowanie teoretyczne na przykładzie praktyki laboratoryjnej chemii. Modele teoretyczne są tymi wytworami badań naukowych, które od dziesięciu lat skupiają na sobie szczególną uwagę filozofów nauki i metodologów. Twierdzi się nawet, że nastąpiło swoiste przeniesienie zainteresowania z teorii naukowych na modele teoretyczne, co można wyjaśnić ich rolą w codziennej praktyce badawczej uczonych – zarówno teoretyków, jak i eksperymentatorów. Dotyczy to również nauk laboratoryjnych, bowiem ich praktyka eksperymentalna jest zazwyczaj „sterowana” modelami teoretycznymi. Zgodnie z dominującą wśród metodologów i filozofów nauki opinią, modele teoretyczne służą zarówno do reprezentowania badanych układów empirycznych oraz teorii naukowych, jak i są podstawowymi narzędziami umożliwiającymi skuteczne interweniowanie w świat przyrody. Tak ujęte stają się podstawowym składnikiem „skrzynki narzędziowej nauki”²². Zdaniem M. Morrison i M. Morgan: „Modele mogą być obiektami fizycznymi, matematycznymi strukturami, diagramami, programami komputerowymi lub czymkolwiek innym, lecz wszystkie one działają jak instrumenty służące do badania świata, naszych teorii, a nawet innych modeli” [Morrison, Morgan, 1999, s. 32]. Modele są narzędziami projektowania i wytwarzania nie dlatego,

²¹ Argumentacja na rzecz tej tezy została przedstawiona w artykule [Zeidler, Sobczyńska, 1995/1996, s. 517-535].

²² Pojęcie „skrzynki narzędziowej nauki” wprowadziła N. Cartwright [Cartwright, Shomar, Suarez, 1995, s. 139], lecz nie umieściła w niej modeli teoretycznych. Te ostatnie, konstruowane za pomocą takich narzędzi, jak teorie naukowe, metody aproksymacji, ekstrapolacji itp., mają reprezentować konkretne zjawiska i układy empiryczne.

że są replikami układów modelowanych, lecz dlatego, że dostarczają o tych układach informacji, które umożliwiają interweniowanie w świat [Morrison, Morgan, 1999, s. 23]. Przytoczona opinia wyraża jeden ze sposobów wyjaśniania efektywności modeli teoretycznych w naukach laboratoryjnych. Analiza praktyki laboratoryjnej chemii dostarcza licznych przykładów zastosowań różnorodnych modeli teoretycznych, które potwierdzają powyższe przekonanie²³. Dotyczy to zwłaszcza różnego typu modeli struktur cząsteczek związków chemicznych, które pozwalają przewidywać ich właściwości, co z kolei umożliwia wykorzystanie tych modeli w komputerowym modelowaniu przebiegu projektowanych syntez chemicznych.

7. Teza o intersubiektywnej sprawdzalności wyników badań naukowych a praktyka laboratoryjna chemii. Na wyniki badań naukowych, które mają tworzyć wiedzę z zakresu danej dyscypliny naukowej, nakłada się – obok warunku intersubiektywnej komunikowalności – warunek intersubiektywnej sprawdzalności. Tylko wyniki, które zostały sprawdzone lub przynajmniej mogą być sprawdzone za pomocą metod intersubiektywnych, są uznawane za wkład do wiedzy z danej dziedziny nauki. W naukach laboratoryjnych sprawdzenie rezultatów eksperymentu polega na jego ponownym wykonaniu w tych samych warunkach, w których wykonany był eksperyment pierwotny. Jeśli wyniki eksperymentu będą zgodne, w granicach dopuszczalnego błędu, z wynikami eksperymentu pierwotnego, to można powiedzieć, że został on powtórzony. Peter Plesch, chemik i metodolog chemii, w artykule *On the Distinctness of Chemistry* [Plesch, 1999, s. 6-15] dokonał analizy stosowania zasady intersubiektywnej sprawdzalności w praktyce laboratoryjnej chemii²⁴. Na jej podstawie postulował wyodrębnienie w procedurze sprawdzenia eksperymentu procedur jego powtórzenia i odtworzenia. Można powiedzieć, że eksperyment pierwotny został powtórzony, gdy jego charakterystyka, dokonana w kategoriach jakościowych, jest taka sama jak eksperymentu pierwotnego, tzn. gdy wytworzono to samo zjawisko. Eksperyment został odtworzony, gdy jego charakterystyka pod względem ilościowym jest taka sama jak eksperymentu pierwotnego – oczywiście w granicach dopuszczalnego błędu. Na przykład synteza organiczna została powtórzona, jeśli – mówiąc w dużym uproszczeniu – substratami i produktami były te same związki chemiczne, co w syntezie pierwotnej. Natomiast można mówić o jej odtworzeniu wówczas, gdy np. warunki termodynamiczne, w których przeprowadzono syntezę, oraz wydajności uzyskanych produktów były – w granicach błędu – takie jak syntezы odtwarzanej.

²³ Literatura z zakresu filozofii chemii zawiera wiele analiz modeli teoretycznych budowanych w chemii. Zobacz na przykład zbiór artykułów pt. *Tools and Modes of Representation in the Laboratory Sciences* pod redakcją U. Klein [2001].

²⁴ Powyższa kwestia była przedmiotem analiz R. Kazibuta [2003, s. 189-210].

Powyższe rozróżnienie pozwala scharakteryzować różne aspekty procedury sprawdzania rezultatów eksperymentu pierwotnego. Można np. wskazać na problemy związane z odtworzeniem warunków eksperymentu pierwotnego i będące ich konsekwencją trudności z odtworzeniem jego rezultatów. Problemy te prowadzą do osłabiania w praktyce laboratoryjnej chemii wymogów, jakie nakłada się na odtworzenie eksperymentu pierwotnego przez znaczne rozszerzanie zakresu dopuszczalnego błędu. Zdarza się dość często, że ponowne wykonanie eksperymentu, wiążące się z niezamierzoną lub zamierzoną zmianą warunków jego przebiegu, prowadzi do wytworzenia nowego zjawiska (np. uzyskania odmiennych produktów reakcji), a więc może pełnić w nauce laboratoryjnej funkcję heurystyczną.

8. Teza o wpływie swoistości języka chemii na jej praktykę laboratoryjną. Semiotyczna specyfika chemii ma olbrzymi wpływ na efektywność jej praktyki laboratoryjnej. W chemii, jak wiadomo, bardzo ważną rolę, obok wzorów sumarycznych, odgrywają wzory strukturalne reprezentujące określone aspekty struktury cząsteczek związków chemicznych. Ich status semiotyczny jest przedmiotem dyskusji, lecz z całą pewnością zawierają one elementy typowe dla znaków ikonicznych, a niekiedy są wprost nazywane ikonami²⁵. Odgrywają one kluczową rolę, np. w zapisie mechanizmów reakcji chemicznych. Ich występowanie w języku chemii sprawia poważne kłopoty w trakcie logicznej rekonstrukcji języka chemii i rekonstrukcji wnioskowań formułowanych w języku zawierającym wzory strukturalne. Z drugiej strony, zapisy mechanizmów reakcji chemicznych pozwalają na formułowanie reguł laboratoryjnych, które sterują otrzymywaniem nowych związków chemicznych, a więc stanowią podstawę preparatyki. Jest to możliwe dzięki temu, że wzory strukturalne są nośnikami wielu ważnych informacji o właściwościach związków chemicznych używanych w syntezie²⁶. Można powiedzieć, że znaczenie języków chemii – symbolicznego oraz ikonicznego – polega na tym, że niejako łączą one dwa światy chemików: świat „mikro” ze światem „makro”, a jedną z ważnych konsekwencji tego stanu rzeczy jest reintegracji współczesnej chemii organicznej i biologii²⁷.

*

²⁵ Zagadnienie statusu semiotycznego wzorów strukturalnych dyskutowałem szczegółowo w artykule *The Semiotic Status of Structural Formulas and the Causal Theory of Reference* [Zeidler, 2004(a), s. 151-169]. We współczesnej literaturze z zakresu semiotyki wskazuje się na częściowo symboliczny (konwencjonalny) charakter znaków ikonicznych. Dotyczy to również wzorów strukturalnych. Zobacz [Hoffmann, 1995, s. 53-82] oraz [Hoffman, Laszlo, 1994, s. 133-174].

²⁶ Zobacz na ten temat: [Schummer, 1999, s. 191-194].

²⁷ Znakomitą egzemplifikację w tym zakresie podają E. R. Grosholz i R. Hoffmann [2000, s. 230-247].

Można wymienić szereg innych zagadnień z zakresu standardowo rozumianej filozofii przyrodoznawstwa, które są modyfikowane, dopełniane lub uszczegółowiane przez wyniki badań prowadzonych w filozofii chemii. Należą do nich między innymi: analiza logicznych aspektów wnioskowań stosowanych w badaniach laboratoryjnych²⁸, pogłębienie dyskusji nad metodami wyjaśniania w naukach laboratoryjnych²⁹, stosowanie odpowiednio interpretowanej brzytwy Ockhama w naukach przyrodniczych³⁰, wpływ akceptowanych przez badaczy systemów aksjologicznych, a zwłaszcza wartości etycznych i estetycznych, na rozwój badań laboratoryjnych³¹ oraz wiele innych. Należy zatem wyrazić nadzieję, że wraz z dalszym rozwojem badań z zakresu filozofii chemii ocena ich znaczenia dla standardowo rozumianej filozofii przyrodoznawstwa ulegnie zasadniczemu przewartościowaniu, a jej oryginalny wkład w poznanie metod i procedur badawczych stosowanych w naukach przyrodniczych zostanie w pełni doceniony.

²⁸ Zobacz na przykład: [Jacob, 2004, s. 117-139].

²⁹ Zagadnienie to było przedmiotem szczegółowych analiz E. Zielonackiej-Lis [2003].

³⁰ Sposoby wykorzystywania brzytwy Ockhama w chemii zostały omówione w: [Hoffmann, Minkin, Carpenter, 1999, s. 13-44].

³¹ Zobacz na przykład: [Hoffmann, 1995, s. 197-228] oraz [Buchler, 2004, s. 73-97].

II

Co, w jakim celu i w jaki sposób badają chemicy? Współczesne kontrowersje wokół przedmiotu i specyfiki metodologicznej praktyki badawczej chemii

1. Wstęp

Przedmiot, cele i metody badań prowadzonych w chemii są ze sobą ściśle powiązane, a ich ustalenie stanowi przedmiot sporów toczonych przez filozofów chemii. Jeśli przyjmie się, zgodnie z dominującym w tradycyjnej filozofii nauki przekonaniem, że badania prowadzone przez uczonych, w tym także przez chemików, realizują przede wszystkim cel poznawczy, to chemia – w opinii Linusa i Petera Paulingów – „ma dwa główne aspekty: chemię opisową, tj. *odkrywanie i zestawianie faktów chemicznych*, oraz chemię teoretyczną, *polegającą na formułowaniu teorii, które po zweryfikowaniu łączą te fakty i wiążą je w system*” [L. Pauling, P. Pauling, 1998, s. 15]. Powyższe ujęcie celu, jaki stawiają przed sobą chemicy, sprawia, że za podstawowy przedmiot badań tej nauki uznaje się związki chemiczne, których własności są pochodną składu i struktury ich cząsteczek. Poznanie zasad rządzących budową cząsteczek związków chemicznych stało się zatem głównym zadaniem nie tylko przedstawicieli chemii laboratoryjnej, lecz przede wszystkim teoretyków tej dyscypliny wiedzy. Badania, odnoszące się do obiektów mikroświata, doprowadziły do powstania licznych teorii budowy cząsteczek związków chemicznych. Teorie te umożliwiły wyjaśnienie makroskopowych właściwości substancji chemicznych, a zwłaszcza ich reaktywności. Przyjęcie powyższej koncepcji celów i przedmiotu chemii sprawia, że badania eksperymentalne, prowadzone w laboratoriach, uznaje się za ściśle podporządkowane działalności zmierzającej do zbudowania możliwie ogólnych teorii chemii. Twierdzi się, że wyniki tych badań mogą być wprawdzie impulsem prowadzącym do sformułowania teorii chemicznych, lecz przede wszystkim służą do ich weryfikacji. Powyższa koncepcja

chemii nie wskazuje na istnienie jakiejś metodologicznej specyfiki tej nauki, co sprzyja poglądom zakładającym możliwość redukcji chemii do fizyki. Od strony filozoficznej ujęcie to odpowiada dominującemu w filozofii nauki XX wieku paradygmatowi, zgodnie z którym badania eksperymentalne są ściśle podporządkowane podstawowemu celowi nauki – dążeniu do zbudowania możliwie ogólnych teorii.

Zarysowane powyżej ujęcie praktyki badawczej chemii odrzucają ci filozofowie chemii, którzy odwołują się do wyników badań naukometrycznych. Wynika z nich, że głównym celem praktyki laboratoryjnej chemii, która jest podstawowym typem praktyki badawczej tej nauki, jest synteza i analiza nowych substancji (związków chemicznych). Ten „kreacyjny” aspekt praktyki badawczej chemii uznają oni za nadrzędny w stosunku do jej aspektu poznawczego. Definiują oni chemię jako *makroskopową naukę o substancjach i ich przemianach* [van Brakel, 1997, s. 254]. Z tego punktu widzenia mikroskopowe koncepcje budowy cząsteczek związków chemicznych odgrywają wprawdzie ważną rolę zwłaszcza wówczas, gdy dąży się do zrozumienia i projektowania przemian chemicznych, lecz są ściśle podporządkowane podstawowym – praktycznym celom działalności laboratoryjnej chemików. Dla metodologii chemii oznacza to, że głównym przedmiotem jej zainteresowania powinny być zasady, którymi kierują się uczeni, przeprowadzając eksperymenty w laboratoriach. Powyższa koncepcja chemii posiada antyredukcjonistyczny charakter i wyraża przekonanie jej zwolenników o metodologicznej specyfice i autonomii chemii jako nauki laboratoryjnej.

2. Wyniki badań naukometrycznych nad praktyką badawczą chemii

Wyniki badań naukometrycznych nad praktyką badawczą chemii mogą stanowić istotny, choć nie rozstrzygający argument w sporze o przedmiotową i metodologiczną charakterystykę chemii. Zreferuję poniżej wyniki uzyskane przez Joachima Schummera, który od połowy lat dziewięćdziesiątych XX wieku prowadził badania naukometryczne nad chemią [Schummer, 2004, s. 395-410]. Pozwalają one na wyciągnięcie wielu ważnych wniosków dotyczących rozważanego w tym artykule zagadnienia.

Analizując podstawowe czasopisma zawierające abstrakty artykułów, patentów i książek z zakresu nauk przyrodniczych, z uwzględnieniem związanych z nimi technologii, stwierdził on, że publikacji z zakresu chemii w 2000 roku było więcej niż publikacji ze wszystkich pozostałych dyscyplin przyrodniczych razem wziętych. Fakt ten stanowi wystarczająco mocne uzasadnienie dla prowadzenia – do tej pory zaniedbywanych – intensywnych analiz metodologicznych, filozoficznych, historycznych i socjologicznych praktyki badawczej chemii. Na przełomie XX i XXI wieku około czterech milionów chemików „produkowało” rocznie mniej

więcej 900 000 publikacji, z których dwie trzecie dotyczyły syntezy i analizy nowych substancji, których w roku 2001 otrzymano około 1,6 miliona¹. Nie ulega tym samym żadnej wątpliwości, że chemia spełnia podstawowe kryterium nauki laboratoryjnej, którym jest – zdaniem Iana Hackinga – kreowanie nowych obiektów i zjawisk. Publikacje poświęcone syntezie chemicznej są na ogół łatwo rozpoznawalne. Zawierają one tak zwaną część eksperymentalną opisującą działania laboratoryjne, które doprowadziły do uzyskania nowej substancji, a także określają jej najważniejsze właściwości makroskopowe. Ważną częścią publikacji jest również podanie wyników badań analitycznych, spektroskopowych i innych, które dowodzą tożsamości chemicznej otrzymanej substancji. Pozostała jedna trzecia publikacji związana jest z realizacją innych niż syntetyczny celów badawczych. Dotyczą one: proponowania nowych i ulepszania starych metod badań eksperymentalnych, fizykochemicznych pomiarów przemian chemicznych i samych produktów reakcji chemicznych, obliczeń kwantowo-mechanicznych, zastosowań uzyskiwanych wyników w procesach technologicznych i wielu innych. Jednakże zdecydowana dominacja publikacji z zakresu syntezy chemicznej nie jest rozstrzygającym argumentem na rzecz tezy, że podstawowym celem ich autorów było otrzymanie nowych substancji.

Joachim Schummer przebadł próbę złożoną z trzystu artykułów wybranych z jednego z najważniejszych czasopism z chemii ogólnej „*Angewandte Chemie*”, które zostały opublikowane w latach 1980, 1990 i 1995 [Schummer, 2004, s. 404-406]. Publikacje te dotyczyły syntezy chemicznej, lecz wyodrębnił on pięć różnych celów szczegółowych, które zamierzali zrealizować ich autorzy: teoretyczny, klasyfikacyjny, strukturalny, syntetyczny i aplikacyjny. Otóż w roku 1995 bezpośredni cel syntetyczny, polegający albo na otrzymaniu nowych reagentów i katalizatorów, albo na opracowaniu nowych metod syntezy i to zarówno na poziomie preparatyki, jak i na poziomie teoretycznego opisu, deklarowali autorzy czterdziestu procent publikacji. Autorzy trzydziestu procent publikacji deklarowali chęć zsyntetyzowania nowych substancji ze względu na ich przewidywane zastosowania praktyczne. Liczba prac tego typu wzrosła od roku 1980 do roku 1995 o kilkanaście procent. Cele związane z wyróżnianiem klas substancji chemicznych deklarowali autorzy dwunastu procent publikacji, a cele związane z ustalaniem własności strukturalnych cząsteczek poszczególnych związków chemicznych autorzy dziesięciu procent z nich. W roku 1995 autorzy jedynie około pięciu procent publikacji stwierdzali, że prowadzą badania eksperymentalne w celu potwierdzenia lub zmodyfikowania odpowiednich teorii naukowych. Co więcej, w 1980 roku taki cel przyświecał jeszcze jedenastu procentom publikacji naukowych. Interpretacja podanych wyników jest jednoznaczna i świadczy o tym, jak bardzo mylny jest pogląd

¹ Jeśli weźmie się pod uwagę również sekwencjonowane biopolimery, to liczba nowych substancji otrzymanych w 2001 roku sięgać będzie 6,75 miliona.

– przynajmniej w odniesieniu do chemii – że eksperyment pełni przede wszystkim służebną funkcję względem teorii naukowej.

Dla dyskusji tytułowego zagadnienia tego artykułu bardzo istotne okażą się wyniki, które uzyskał Joachim Schummer, analizując sposoby, w jakie chemicy syntetyzują nowe substancje [Schummer, 2004, s. 402-404]. Swoje badania przeprowadził na próbie trzystu publikacji naukowych z zakresu nieorganicznej i organicznej syntezy chemicznej. Podzielił je na sześć kategorii. Pierwszą z nich stanowiły publikacje, których autorzy nie formułowali *explicite* żadnych przesłanek, jakimi kierowali się, syntetyzując nowe substancje, a do drugiej zaliczył te, w których deklarowano, że rezultat badań był niezgodny z oczekiwanym. Trzecią i czwartą grupę stanowiły publikacje opisujące badania, które były prowadzone analogicznie do badań wcześniej wykonanych przez tych samych bądź innych autorów. Piątą grupę publikacji charakteryzowało to, że syntezy w nich opisywane były przeprowadzane w oparciu o znane lub postulowane mechanizmy reakcji chemicznych. Wreszcie ostatnia z wyróżnionych grup miała obejmować syntezy „wydedukowane” z modeli zbudowanych na gruncie molekularnej mechaniki kwantowej.

Z przeprowadzonych przez Joachima Schummera analiz wynika, że istnieją zasadnicze różnice między syntezą związków nieorganicznych a syntezą związków organicznych. Publikacje poświęcone syntezie związków nieorganicznych aż w 45% należały do pierwszej grupy, a więc nie zawierały żadnego uzasadnienia wyboru sposobu syntezy, gdy w odniesieniu do związków organicznych dotyczyło to jedynie niecałych 20% publikacji. W przypadku nieprzewidzianego wyniku syntezy publikacji z syntezy nieorganicznej było dwa razy więcej niż z organicznej, choć nie były to liczby znaczące – odpowiednio: około 8 i około 4%. Powoływanie się na wcześniejsze syntezy, a więc rozumowanie przez analogię, stanowiło uzasadnienie postępowania syntetycznego w czterdziestu kilku procentach przypadków w odniesieniu do obu rodzajów związków chemicznych. Istotna różnica zachodziła w piątej grupie publikacji, poświęconych w 35% syntezie związków organicznych i jedynie w 3% syntezie związków nieorganicznych. Można więc uznać, że mechanizmy reakcji stanowią istotną podstawę działalności syntetycznej jedynie w chemii organicznej. Przedstawione wyniki upoważniają do wyciągnięcia wniosku, że synteza organiczna wymaga zazwyczaj lepszego uzasadnienia podejmowanych działań laboratoryjnych. Jednakże, w kontekście rozważanego problemu, najciekawszy rezultat dotyczył ostatniej kategorii publikacji wyróżnionej przez Schummera. Okazało się, że w ani jednym przypadku autorzy nie powoływali się na modele teoretyczne zbudowane w aparacie pojęciowym mechaniki kwantowej jako na uzasadnienie wybranego sposobu syntezy. W świetle powyższych wyników przeanalizujemy oba konkurencyjne stanowiska w kwestii przedmiotu, celów i metod praktyki badawczej chemii.

3. Chemia jako nauka teoretyczna o budowie cząsteczek związków chemicznych i ich właściwościach

Przytoczone w poprzednim paragrafie wyniki badań naukometrycznych podważają tezę, że zasadniczą funkcją chemii laboratoryjnej jest, jak zakładali Paulingowie, dostarczanie faktów, które stanowią podstawę formułowania i sprawdzania teorii chemicznych. Potwierdzają one natomiast przekonanie, że jej podstawowa funkcja polega na wytwarzaniu i badaniu nowych substancji, które nie występują w przyrodzie. Jest to wniosek zgodny ze stanowiskiem Iana Hackinga, który dążenie do kreowania nowych zjawisk uznał za podstawową cechę wyróżniającą naukę laboratoryjną². Co więcej, w świetle powyższych wyników nie ulega wątpliwości, że to właśnie chemię należy uważać za paradygmatyczny przykład nauki laboratoryjnej w rozumieniu tego autora³. Uzyskane wyniki niewątpliwie podważają odmienną koncepcję nauki laboratoryjnej, zgodnie z którą celem badań laboratoryjnych jest odkrywanie podstawowych praw, które rządzą przebiegiem zjawisk w przyrodzie. W laboratorium, zdaniem R. Bhaskara, wytwarza się i bada układy zamknięte, które są przynajmniej częściowo izolowane od wpływu czynników zewnętrznych⁴. Odkryte w trakcie badania takich układów prawa obowiązują również w systemach otwartych, które występują poza laboratorium – w przyrodzie. Ich odkrycie poza laboratorium nie byłoby możliwe ze względu na równoczesne działanie innych praw. Jednakże przytoczone w poprzednim paragrafie wyniki wykazują, że publikacje, których autorzy deklarowali cel teoretyczny, stanowiły relatywnie niewielki odsetek prac poświęconych syntezie i analizie chemicznej.

Bez wątpienia cel taki rzeczywiście przyświeca eksperymentatorom, gdy dążą do odkrycia mechanizmu jakiejś syntezy chemicznej lub starają się ustalić zakres jego obowiązywania. Jednakże mechanizmy reakcji chemicznych, choć sformułowane w języku teoretycznym, są prawami fenomenologicznymi, a więc nie mogą być uznane za składniki systematycznej teorii naukowej. Jeśli zatem chce się bronić nadrzędnej roli teorii naukowej w chemii eksperymentalnej, to należy skoncentrować się na analizie teoretycznego zaplecza badań laboratoryjnych. Można utrzymywać, że bez teorii umożliwiających poznanie składu, a zwłaszcza struktury cząsteczek związków chemicznych chemia laboratoryjna nie byłaby możliwa. Podstawowy dogmat chemii głosi bowiem, że właściwości chemiczne, fizyczne i biologiczne związków chemicznych są wyznaczone przez skład i strukturę ich

² Ian Hacking przedstawił koncepcję nauki laboratoryjnej w artykule: *The Self-Vindication of the Laboratory Sciences* [Hacking, 1992(a), s. 29-64].

³ Tezę tę uzasadniłem niezależnie od wyników badań naukometrycznych w artykule *Miejsce filozofii chemii w filozofii przyrodoznawstwa* [Zeidler, 2006, s. 322-323].

⁴ Powyższą koncepcję nauki laboratoryjnej sformułował jeden z wpływowych zwolenników realizmu krytycznego R. A. Bhaskar [1997].

cząsteczek. Teza ta ściśle wiąże ze sobą omawiany problem z zagadnieniem redukcji chemii do fizyki, a zwłaszcza do mechaniki kwantowej⁵. Wielu słynnych fizyków, a za nimi i filozofów nauki, twierdziło, iż chemię można uznać za dział fizyki, tak jak termodynamikę lub elektromagnetyzm. Jeśli pojawiają się jakieś problemy, to są one związane ze skomplikowaną postacią równań opisujących sytuacje chemiczne, co sprawia, że nie można ich rozwiązać z pożądaną dokładnością. Powołując się zwłaszcza na elektrodynamikę kwantową i autorytet Diraca, twierdzono, że prawa fizyki w zasadzie obejmują zjawiska i prawa chemii⁶. Zwrot „w zasadzie” oznaczał, że nie uwzględnia się klasycznych przybliżeń chemii kwantowej, tj. założenia adiabaticznego, które odseparowuje ruch elektronów od ruchu jąder, oraz przybliżenia Borna-Oppenheimera, które zakłada statyczność jąder, dzięki czemu można obliczyć energię stanu podstawowego dla określonego kształtu cząsteczki. Lecz – jak dobrze wiadomo – bez przyjęcia tych przybliżeń nie można zbudować modeli struktury chemicznej, a tym samym wyjaśnić wielu *stricte* chemicznych właściwości związków chemicznych. *Stricte* chemiczne właściwości to te, które decydują o reaktywności substancji chemicznych, gdyż – zgodnie z definicją – chemia jest nauką o przemianach, jakim substancje te ulegają.

Jeśli można by wyprowadzić kształt cząsteczek związków chemicznych z praw molekularnej mechaniki kwantowej, którą można uznać za efektywną teorię mechaniki kwantowej, wówczas teza o determinującej roli teorii naukowej względem praktyki eksperymentalnej znalazłaby potwierdzenie. Jednakże kształtu cząsteczek konkretnego związku chemicznego nie można wyznaczyć za pomocą metod chemii kwantowej, tak jak tych ostatnich nie można dedukcyjnie wyprowadzić z praw mechaniki kwantowej. Hans Primas wykazał, że redukcja, rozumiana jako dedukcyjne wyprowadzenie zinterpretowanych praw teorii wyższego poziomu (molekularnej mechaniki kwantowej) z praw teorii podstawowej (mechaniki kwantowej), jest nonsensem [Primas, 1991, s. 163]. Stosowanie odpowiednich aproksymacji jest ściśle związane z metodami pomiaru, które określają sens proceduralny odpowiednich wielkości. Podstawowe funkcje określające kształt cząsteczki związku chemicznego uzyskują interpretację dopiero wówczas, gdy zastosujemy odpowiednie metody pomiaru. Tym samym wartości podstawowych parametrów wyznaczających kształt cząsteczek i ich empiryczna interpretacja mogą ulegać zmianie wraz z zastosowaniem ulepszonych technik pomiarowych⁷.

W jakim sensie można zatem utrzymywać tezę, że teoria stanowi podstawę laboratoryjnej praktyki badawczej chemika? Niewątpliwie, praktyka laboratoryjna wykorzystuje na szeroką skalę modele, które umożliwiają zrozumienie i projektowanie

⁵ Zagadnienie teoretyczności chemii, a w tym problem redukcji chemii do fizyki, analizowałem w artykule *O teoretyczności chemii – studium metodologiczne* [Zeidler, 1999(a), s. 45-73].

⁶ Zobacz na ten temat [van Brakel, 2000(b), s. 164-166].

⁷ Zobacz na ten temat [Konarski, 1999, s. 137-141] oraz [Zeidler, 2000(b), s. 17-34].

eksperymentów naukowych oraz wyjaśnianie działania zastosowanej aparatury i uzyskanych wyników. Nie są to jednakże modele „kierowane teorią” w tym znaczeniu, że można je z teorii dedukcyjnie wyprowadzić. Na ogół posiadają one charakter semiempiryczny, gdyż choć są konstruowane w aparacie pojęciowym określonych teorii naukowych, to konieczne jest wprowadzenie parametrów uzyskiwanych z doświadczenia. Większość użytecznych praktycznie metod molekularnej mechaniki kwantowej, stosowanych do konstrukcji różnorodnych modeli, to metody semiempiryczne.

Za jedno z największych osiągnięć teoretycznej chemii stosowanej uchodzi teoria symetrii orbitali molekularnych R. Woodwarda i R. Hoffmanna dla reakcji pericyklicznych. „Reakcje pericykliczne to reakcje przebiegające w ten sposób, że tworzenie nowych wiązań i rozrywanie starych następuje jednocześnie w cyklicznym stanie przejściowym” [McMurry, 2003, s. 1214-1215]. Teoria ta, jak sama nazwa wskazuje, odwołuje się do pojęć pojawiających się w ramach teorii orbitali molekularnych, a zatem nie może być wyprowadzona bezpośrednio z praw mechaniki kwantowej. Teoria Woodwarda i Hoffmanna jest *de facto* zbiorem reguł określających warunki nakładane na symetrię orbitali molekularnych substratów i produktów. Zakłada ona, mówiąc ogólnie, że symetria orbitali molekularnych substratów i produktów musi być taka sama. Można zatem odróżnić reakcje dozwolone od zabronionych ze względu na symetrię odpowiednich orbitali molekularnych. Stosowanie reguł sformułowanych przez Woodwarda i Hoffmanna jest skomplikowane, gdyż wymaga analizy symetrii wszystkich orbitali substratów i produktów. Istotne znaczenie dla praktyki syntetycznej w zakresie reakcji pericyklicznych ma metoda K. Fukui, która ogranicza analizę do rozważenia symetrii orbitali granicznych, tj. najwyższego obsadzonego orbitalu molekularnego i najniższego nieobsadzonego orbitalu molekularnego [McMurry, 2003, s. 1218-1219]. Na gruncie tej koncepcji można wyjaśnić odmienną stereochemię przebiegu fotochemicznych reakcji pericyklicznych od przebiegu tych samych reakcji wzbudzanych termicznie, a znajomość odpowiednich reguł umożliwia „analizę i przewidywanie stereochemicznego przebiegu praktycznie tysięcy znanych reakcji pericyklicznych” [McMurry, 2003, s. 1240]. Jednakże orbitale molekularne są konstruowane przy założeniu przybliżenia jednoelektronowego, które umożliwia przypisanie każdemu elektronowi w cząsteczce oddzielnej jednoelektronowej funkcji falowej. Orbitale molekularne należy więc uznać za, w pewnym sensie, „specyficznie chemiczne” konstrukty (byty) matematyczne, których nie można wyprowadzić z praw mechaniki kwantowej. Tym samym teoria Woodwarda, Hoffmanna i Fukui nie może być uznana za potwierdzenie tezy redukcjonizmu. Zauważmy również, że dla praktyki laboratoryjnej podstawowe znaczenie ma możliwość graficznego reprezentowania zasad działania odpowiednich reguł, zwłaszcza w metodzie Fukui. Jednakże reprezentacje graficzne orbitali molekularnych i zasad działania reguł symetrii mogą być interpretowane wyłącznie metaforycznie.

4. Chemia jako nauka laboratoryjna o substancjach i ich przemianach

Pod koniec XVIII wieku i w pierwszej połowie wieku XIX dominowało podejście do chemii wyznaczone przez stanowisko Kanta, który uznał, że chemia nie jest nauką, lecz rodzajem sztuki eksperymentalnej. Dla Filozofa z Królewca kryterium naukowości był stopień zmatematyzowania danej dziedziny wiedzy, który określał możliwość jej ujęcia w postać systemu dedukcyjnego, a więc teorii naukowej. Z tego punktu widzenia wzorcowymi dyscyplinami naukowymi były mechanika Newtona i geometria Euklidesa. Niektórzy historycy i filozofowie chemii twierdzą, że powyższe stanowisko było anachroniczne już w XIX wieku, gdyż wielu ówczesnych chemików uważało, iż głównym celem chemii jest poszukiwanie możliwie ogólnej teorii, a centralną rolę odgrywają tzw. hipotezy sterujące, które pełnią rolę heurystyczną zarówno w poszukiwaniu nowej teorii naukowej, jak i w prowadzeniu badań eksperymentalnych⁸. Przytacza się w tym kontekście nazwiska wybitnych chemików: Liebiga, Berzeliusa, Wurtza, Butlerowa, Kekulégo, Mendelejewa oraz niektórych filozofów tamtego okresu, np. Wundta. W XX wieku zdecydowana większość chemików deklaruwała już podejście do chemii zgodne z paradygmatem zorientowanym na teorie naukowe, choć ich własna praktyka badawcza znacznie od niego odbiegała. W kontekście przytoczonych wyników badań naukometrycznych należy się zatem zastanowić, czy to aby nie teza Kanta, rzecz jasna w znacznie zmodernizowanej postaci, opisuje trafnie współczesną praktykę badawczą chemii. Należałoby przede wszystkim odrzucić stopień zmatematyzowania jako kryterium naukowości wiedzy. Specyfika metodologiczna laboratoryjnej praktyki eksperymentalnej nie może być podstawą do relegowania jej z naukowej praktyki badawczej. W świetle kluczowej roli, jaką praktyka laboratoryjna odgrywa w prawie wszystkich współczesnych naukach przyrodniczych, prowadziłyby to do zakwestionowania ich naukowości. Kryterium naukowości wiąże się współcześnie przede wszystkim ze stopniem intersubiektywnego potwierdzenia uzyskiwanych wyników badań, a nie ze stopniem ich zmatematyzowania. Jednakże fakt, że publikacje z syntetycznych badań eksperymentalnych, zwłaszcza w chemii nieorganicznej, w znacznym procencie nie zawierały opisu zasad, na jakich opierały się przeprowadzane syntezy, albo powoływały się na metody stosowane w artykułach wcześniej opublikowanych, przekonuje o trafności zastosowania terminu „sztuka” do opisu praktyki laboratoryjnej.

W publikacjach z zakresu syntezy organicznej instrukcje działania laboratoryjnego są dość często „uzasadniane” odpowiednimi mechanizmami reakcji chemicznych lub są wprost poświęcone ich odkryciu bądź badaniu. Jednakże, jak zauważyliśmy

⁸ Zobacz np. [Rodny, 1977, s. 60-78].

w poprzednim paragrafie, mechanizmy reakcji chemicznych, choć sformułowane w języku teoretycznym, są prawami fenomenologicznymi, których formułowanie i weryfikowanie następuje w trakcie badań laboratoryjnych. Mechanizmy są hipotezami opisującymi przebieg reakcji chemicznych na poziomie cząsteczkowym. Są one uzupełniane wynikami badań kinetycznych, co sprawia, że można określić termodynamiczne warunki przemian chemicznych przebiegających zgodnie z tymi mechanizmami. Mechanizmy odgrywają ważną rolę w procesie klasyfikacji syntez chemicznych, co powoduje, że są efektywnymi narzędziami sterującymi praktyką syntetyczną chemii organicznej. Ze znajomości mechanizmów reakcji chemicznych (z „wiedzy, że”) wyprowadza się instrukcje działania laboratoryjnego („wiedzę jak”). R. I. Jackson, autor książki *Mechanizmy reakcji chemicznych*, wyliczył możliwości, jakie stwarza – dla poszczególnych grup chemików – znajomość i stosowanie mechanizmów reakcji chemicznych. Chemikom zajmującym się syntezą organiczną „wiedza mechanistyczna pozwoli na inteligentne różnicowanie warunków reakcji, temperatury i proporcji substratów w celu uzyskania maksymalnej wydajności czystych produktów” [Jackson, 2007, s. 16]. Chemikom zatrudnionym w przemyśle „wiedza mechanistyczna pozwala na prognozowanie nowych odczynników chemicznych i warunków procesów chemicznych, które mogą wywołać oczekiwane przekształcenia” [Jackson, 2007, s. 16-17]. Dla biochemików i osób związanych z badaniami medycznymi „przemiany metaboliczne zachodzące w organizmach żywych to reakcje organiczne i szczegóły wielu z nich są [dzięki mechanizmom – P.Z.] zrozumiałe. Ustalenie mechanizmu ma kluczowe znaczenie dla zrozumienia, w jaki sposób choroba wpływa na metabolizm, w jaki sposób cząsteczki leków mogą wspomagać lub zapobiegać konkretnym reakcjom biochemicznym oraz dla rozwoju nowych leków” [Jackson, 2007, s. 17]. Dla chemików doradzających w sprawach środowiska „cząsteczki organiczne w środowisku mogą wywierać wpływ korzystny lub szkodliwy (albo obydwu). Zrozumienie mechanizmów reakcji chemicznych jest związane z degradacją substancji chemicznych w środowisku i może prowadzić do poprawy jakości środowiska” [Jackson, 2007, s. 17]. I wreszcie dla studentów „mechanizmy tworzą szkielet, na którym można zbudować faktyczny szczegółowy obraz chemii organicznej, potrzebny do dobrego jej zrozumienia” [Jackson, 2007, s. 16]. Dla wszystkich wymienionych grup chemików oraz przedstawicieli innych dyscyplin naukowych i stosowanych, związanych z szeroko rozumianą praktyką badawczą chemii, mechanizmy umożliwiają zrozumienie procesów zachodzących w trakcie syntezy organicznej i przekładają się na określone działania laboratoryjne. Jednakże nie jest to proces dedukcyjny, gdyż dyrektywy działania („wiedza jak”) nie mogą być dedukcyjnie wyprowadzone z mechanizmów reakcji chemicznych („wiedzy, że”), tym bardziej że mechanizmy są zazwyczaj zapisywane w ikonycznym języku chemii.

Joachim Schummer wysunął koncepcję przekładu reguł semiotycznych – mechanizmów reakcji chemicznych na reguły laboratoryjne [Schummer, 1999,

s. 191-194]. Zdaniem Schummera reguły semiotyczne chemii (mechanizmy reakcji chemicznych), dotyczące przekształcania znaków tworzących wzory strukturalne, reprezentują relacje dynamiczne, w jakie wchodziły cząsteczki związków chemicznych. Wzory strukturalne mogą być scharakteryzowane przez dopuszczalne sposoby ich przekształcania, a nie – jak się to na ogół czyni – poprzez ich właściwości strukturalne, wyrażające się w podobieństwie strukturalnym wzoru i kształtu cząsteczki związku chemicznego⁹. Jest to przejście od statycznego do dynamicznego sposobu rozumienia wzorów strukturalnych, a semiotyczne reguły przekształcania znaków są przekładane na instrukcje działania laboratoryjnego. Każda dyrektywa działania laboratoryjnego odpowiada jednej regule semiotycznej określającej sposób przekształcania wzoru strukturalnego. Jednoznaczność tego przyporządkowania ma zapewnić skuteczność działania laboratoryjnego. Jednakże Schummer zdaje sobie sprawę, że olbrzymia liczba nowych substancji chemicznych, problemy z zasadami ich klasyfikacji, a co najważniejsze, wpływ zróżnicowania termodynamicznych warunków reakcji na ich przebieg, sprawiają, że mechanizmy tracą na ogólności. Tym samym zmniejsza się ich „wydajność” klasyfikacyjna, a zarazem moc przewidzyczna i laboratoryjna skuteczność. Realizacja propozycji Schummera napotyka na liczne problemy, lecz idea rozumienia wzorów strukturalnych jako nośników informacji specyficznie chemicznych, a więc decydujących o reaktywności substancji chemicznych, wyjaśnia rosnącą rolę mechanizmów w sterowaniu praktyką syntetyczną chemii organicznej. Odnotujmy również, że mechanizmy reakcji chemicznych zapisane za pomocą wzorów strukturalnych są metaforycznymi przedstawieniami obiektów mikroświata i mogą być ujmowane jako modele teoretyczne. Ich metaforyczny charakter wyraża się w tym, że nie posiadają one interpretacji literalnej. Należy przyjąć, zgodnie z najbardziej rozpowszechnioną w odniesieniu do nauki koncepcją metafory, że wzory strukturalne, ujmowane jako modele, reprezentują układ modelowany przez analogię, tzn. dzięki podobieństwu do struktury cząsteczki związku chemicznego. Jednakże relacji podobieństwa nie sposób ustalić, gdyż nie mamy niezależnego od teorii „wglądu” w strukturę cząsteczki. Wydaje się, że podstawą dla metaforycznego rozumienia wzorów strukturalnych i innych sposobów reprezentowania budowy cząsteczek związków chemicznych oraz przemian, jakim one ulegają, może być koncepcja metafory G. Lakoffa i M. Johnsona zawarta w książce *Metafory w naszym życiu* [1988]. Autorzy zakładają, że sposób rozumienia języka metaforycznego i ikonicznych przedstawień metaforycznych został ukonstytuowany przez szeroko rozumianą praktykę życia codziennego. T. Brown zastosował tę koncepcję metafory do analizy licznych przykładów z nauk przyrodniczych, w tym do przedstawień struktur cząsteczek związków chemicznych [Brown, 2003]. Jednakże

⁹ Schummer nawiązuje do koncepcji semiotycznej Peirce’a, który zmierzał do stworzenia takiego systemu reguł semiotycznych, który opisywałby dynamikę systemu semiotycznego.

przyjęcie powyższej koncepcji metafory sprawia, że jeszcze trudniej zrozumieć niezwykle skuteczną ikonicznych przedstawień struktur cząsteczek związków chemicznych, skoro nie opiera się ona na ich strukturalnym podobieństwie do „oryginałów”. W wymiarze filozoficznym należałoby zatem zrezygnować z przypisywania metaforom konceptualnym funkcji poznawczej i zadowolić się konstatacją faktu, że są one skutecznymi narzędziami umożliwiającymi projektowanie działań laboratoryjnych i wyjaśnianie uzyskiwanych rezultatów¹⁰.

Istotna jest również inna trudność związana z rozumieniem mechanizmów reakcji chemicznych jako metaforycznych przedstawień przemian przeprowadzanych w laboratorium. Mechanizmy są zapisywane w języku odnoszącym się do postulowanych obiektów mikroświata – atomów, elektronów, cząsteczek, wiązań chemicznych itp. Natomiast w syntezach przeprowadzanych w laboratorium stosowane są – z założenia czyste – substancje chemiczne, a więc obiekty makroświata, charakteryzowane za pomocą wyników pomiarów wielkości makroskopowych. Zauważmy, że pojęcie substancji chemicznej nie posiada jednoznacznej charakterystyki na poziomie mikro. Przecież woda, będąca makroskopowo czystą substancją, nie składa się wyłącznie z cząsteczek H₂O. Pojęcie związku chemicznego, reprezentowanego przez cząsteczkę o ściśle określonym składzie i strukturze, ma ograniczoną przydatność do charakterystyki próbek czystych substancji chemicznych stosowanych w syntezie. Sztywna teoria oznaczania, która zakłada relację sztywnej desygnacji ze względu na skład i strukturę cząsteczki związku chemicznego, jest w praktyce laboratoryjnej powszechnie stosowana, lecz z teoretycznego punktu widzenia jej przydatność jest mocno ograniczona¹¹. Zatem w odniesieniu do chemii zawodzi nie tylko redukcjonizm, lecz także esencjalistyczny realizm. Iluzją jest zarówno pomysł scharakteryzowania właściwości makroskopowych za pomocą pojęć mikroskopowych, jak również zdefiniowanie czystej substancji za pomocą jej składu i struktury¹².

Przytoczone argumenty przekonują do tezy, że to właśnie charakterystyka substancji za pomocą tzw. właściwości makroskopowych odgrywa w praktyce laboratoryjnej chemii kluczową rolę. Ujęcie chemii jako makroskopowej nauki o przemianach substancji chemicznych jest rozwijane i uzasadniane przez dwóch czołowych filozofów chemii: J. van Brakela [1997, 2000(a), 2000(b)] i J. Schumera [1999, 2004]. Analiza ich stanowiska wymaga jednakże osobnego opracowania¹³.

¹⁰ Nazwę „metafora konceptualna” na oznaczenie koncepcji metafory Lakoffa i Johnsona wprowadził Brown [2003, s. 32].

¹¹ Zagadnienie to analizowałem szczegółowo w artykule *The Semiotic Status of Structural Formulas and the Causal Theory of Reference* [Zeidler, 2004(a), s. 151-169].

¹² Pisz na ten temat szeroko J. van Brakel [2000(a), 2000(b)].

¹³ Niektóre zagadnienia z tego zakresu omówiła D. Sobczyńska [1998, 1999].

5. Zakończenie

Wyniki badań naukometrycznych nad publikacjami z zakresu chemii oraz przeprowadzone powyżej analizy uprawniają do postawienia szeregu tez dotyczących praktyki badawczej chemii. Bez wątpienia centralną rolę odgrywa w niej praktyka laboratoryjna. Dążenie do wytwarzania nowych substancji chemicznych o pożądanych właściwościach, a zwłaszcza o określonej reaktywności, jest podstawowym celem tej nauki. Wiedza laboratoryjna jest wiedzą proceduralną – wiedzą „jak” i bardzo często nie jest *explicite* formułowana. Chemicy w laboratorium praktykują sztukę badań eksperymentalnych, a tym samym współtworzą „styl badań laboratoryjnych”. Praktyka laboratoryjna, zwłaszcza w zakresie syntezy organicznej, bazuje na różnorodnych metodach i modelach, które mają charakter teoretyczny. Nie można wyznaczyć struktury cząsteczek związków chemicznych ani jednoznacznie określić przebiegu większości przemian chemicznych, stosując teorie chemii kwantowej niezawierające parametrów, których wartości nie pochodzą z pomiarów. Teorii chemii kwantowej nie można dedukcyjnie wyprowadzić z praw mechaniki kwantowej. Mechanizmy reakcji chemicznych są podstawowym narzędziem teoretycznym umożliwiającym projektowanie i przeprowadzanie syntez organicznych. Aparatura pojęciowa chemii, jej koncepcje teoretyczne, metody i modele są swoiste dla tej nauki i tym samym zachowuje ona znaczny stopień autonomii. Ideę redukcji chemii do fizyki należy uznać za przesąd dwudziestowiecznej filozofii nauki.

III

Czy alchemia była protochemią? Studium metodologiczno-historyczne

1. Wstęp

Alchemia, jako forma praktyki społecznej, występowała we wszystkich znaczących kulturach w dziejach ludzkości, wyróżnianych przez antropologię kulturową. Fakt ten tłumaczy olbrzymie zainteresowanie alchemią w ramach różnych dyscyplin naukowych badających kulturę. Można wyróżnić co najmniej cztery podstawowe, lecz nierozłączne, perspektywy, z których prowadzi się badania nad alchemią: a) psychologiczną, a zwłaszcza psychoanalityczną (Carl Jung); b) antropologii kulturowej (Mircea Eliade); c) filozoficzno-mistyczno-religijną; d) historii nauki, a zwłaszcza historii chemii. Rozważania niniejszego artykułu związane są ściśle z czwartą z wymienionych perspektyw. Na jej gruncie stawiane jest pytanie o wzajemne relacje między alchemią a chemią, przede wszystkim w aspekcie genezy chemii jako wyodrębnionej nauki przyrodniczej. Każda próba odpowiedzi na powyższe pytanie musi zakładać przyjęcie określonej definicji alchemii oraz określone rozstrzygnięcie sporu o status metodologiczny chemii.

Różnorodność praktyk alchemicznych, wynikająca z odmiennych kontekstów historycznych i kulturowych, w jakich się realizowały, sprawia, że podawane są odmienne definicje regulujące alchemii, a każda z nich rzutuje na rezultaty prowadzonych badań. Dla realizacji celów niniejszego artykułu przyjmę definicję podaną przez Harry'ego Shepparda: „Alchemia jest sztuką kosmiczną, dzięki której części kosmosu – mineralne i zwierzęce – mogą być uwolnione od swej chwilowej egzystencji i osiągnąć stan doskonałości: złota – w przypadku minerałów, a w przypadku ludzi – długowieczności, nieśmiertelności i odkupienia. Transformacje te mogą być dokonane, z jednej strony, wskutek użycia substancji materialnej, takiej jak *kamień filozoficzny* lub *eliksir*, z drugiej strony zaś – dzięki wiedzy objawionej

lub oświeceniu psychologicznemu”¹. Z powyższej definicji wynika kilka istotnych konsekwencji. Wyraźnie oddziela się w niej dwa podstawowe składniki praktyk alchemicznych: egzoteryczne i ezoteryczne, oraz określa się odrębne cele alchemików w odniesieniu do minerałów i w odniesieniu do ludzi. Ważnym, lecz dyskusyjnym z historycznego punktu widzenia, rozstrzygnięciem jest uznanie *kamienia filozoficznego* i *eliksiru życia* za odrębne substancje materialne, które były poszukiwane przez alchemików². Natomiast ezoteryczne składniki ich praktyk: wiedza objawiona lub stan oświecenia psychologicznego, są uznawane za niezbędne warunki realizacji wyszczególnionych celów.

Jednakże próba udzielenia odpowiedzi na tytułowe pytanie artykułu: *Czy alchemia była protochemią?*, zakłada również rozstrzygnięcie sporu o status metodologiczny chemii. Sądzę, iż chemia może być uznana za paradygmatyczny przykład nauki laboratoryjnej³. Powyższą tezę można uzasadnić, jeśli przyjmie się charakterystykę nauki laboratoryjnej zaproponowaną przez Iana Hackinga, lecz idea laboratorium, jako szczególnego miejsca praktyki naukowej, posiada również odmienne konceptualizacje, np. w ramach realistycznej filozofii nauki Roya Bhaskara oraz w ramach mikro-konstruktywistycznej koncepcji z zakresu socjologii nauki Karin Knorr Cetiny. Zanim odpowiem na pytanie, w jakim zakresie praktyki alchemiczne realizowały ideę laboratorium chemicznego, bardzo krótko przedstawię wymienione koncepcje.

2. Trzy charakterystyki nauki laboratoryjnej

Laboratorium naukowe jest miejscem stworzonym po to, by móc przeprowadzać eksperymenty naukowe w ściśle określonych i kontrolowanych warunkach, których prawdopodobieństwo zaistnienia w przyrodzie (na Ziemi) jest niewielkie. Wiele dyscyplin empirycznych z zakresu przyrodznawstwa to dyscypliny, w których kluczową, a nawet konstytutywną rolę odgrywa praktyka laboratoryjna, której rozwój doprowadził do wytworzenia się laboratoryjnego stylu badań naukowych. Dokonywane we współczesnej filozofii nauki opisy sztucznego środowiska, jakim jest laboratorium naukowe, nie różnią się od siebie w sposób zasadniczy. To, co

¹ Cyt. za: [Brock, 1999, s. 17].

² Niektórzy historycy zwracają uwagę na fakt, że wielu alchemików, poszukując *kamienia filozoficznego* i *eliksiru życia*, dążyło raczej do znalezienia magicznej formuły umożliwiającej transmutację lub uzyskanie nieśmiertelności niż do odkrycia odpowiedniej substancji materialnej. Nierzadko zresztą utożsamiano *kamień filozoficzny* z *eliksirem życia*. Ze względu na ograniczone ramy tego artykułu muszę pominąć istotne różnice występujące między praktykami alchemicznymi, które rozwijały się w różnych kręgach kulturowych i w różnym czasie.

³ Powyższe stanowisko uzasadniłem szeroko w artykule *Miejsce filozofii chemii w filozofii przyrodznawstwa* [Zeidler, 2006, s. 313-333].

różnicuje podejścia do laboratorium, to przypisywanie badaniom laboratoryjnym odmiennych celów. Znacznie szerszą charakterystykę laboratorium proponuje się w ramach różnych koncepcji z zakresu socjologii wiedzy⁴.

2.1. Idea laboratorium w realistycznej koncepcji nauki Roya Bhaskara

Filozofia nauki Roya Bhaskara należy do nurtu realizmu krytycznego, który rozwinął się pod wpływem koncepcji filozoficznej Karla Poppera⁵. Jej realizm wyraża się również w podejściu do nauk laboratoryjnych, którym przypisuje się wartości poznawcze. Celem nauk laboratoryjnych jest odkrycie podstawowych praw (mechanizmów), rządzących przebiegiem zjawisk. W naukach laboratoryjnych bada się układy zamknięte, które są przynajmniej częściowo izolowane od wpływu czynników zewnętrznych. Wszelkie działania podejmowane w laboratorium mają na celu odkrycie obiektywnych praw, obowiązujących również poza nim. Jednakże w systemach otwartych, które występują poza laboratorium – w przyrodzie, nie mogą być one odkryte, gdyż ich działanie jest zaburzane przez działanie innych praw. Powyższa idea laboratorium nie może być zrealizowana w naukach społecznych, co odróżnia je w sposób zasadniczy od nauk przyrodniczych i sprawia, że ich nomologiczność jest kwestionowana.

2.2. Cel badań laboratoryjnych w ujęciu Iana Hackinga

Ian Hacking jest uważany za jednego z twórców „nowego eksperymentalizmu”, zgodnie z którym dominującym typem praktyki badawczej w naukach przyrodniczych jest praktyka eksperymentalna podejmowana w laboratoriach⁶. W laboratorium tworzy się warunki, w których staje się możliwe kreowanie nowych obiektów i zjawisk niewystępujących w przyrodzie. Jest to podstawowy cel badań laboratoryjnych, któremu ściśle podporządkowany jest cel poznawczy, a centralnymi pojęciami opisującymi praktykę laboratoryjną są: *manipulowanie* i *interweniowanie*. Styl badań laboratoryjnych wyłonił się, zdaniem Hackinga, z połączenia dwóch stylów wyodrębnionych przez Crombiego⁷, tj. stylu charakteryzującego się eksperymentowaniem w celu kontroli postulatów teoretycznych oraz w celu poznania

⁴ Laboratorium naukowe było przedmiotem refleksji nie tylko – przywoływanej w tym artykule – Karin Knorr Cetiny, lecz również innych socjologów nauki: Bruno Latoura i Stevensa Woolgara, a także prekursora badań socjologicznych nad wiedzą naukową – Ludwika Flecka.

⁵ Zobacz [Bhaskar, 1997].

⁶ Podstawowe idee „nowego eksperymentalizmu” Ian Hacking zawarł w książce *Representing and Intervening* [1983], natomiast koncepcję nauki laboratoryjnej rozwinął w: [1992(a), s. 29-64].

⁷ Zobacz [Crombie, 1994].

przez obserwację i pomiar, a także stylu polegającego na budowaniu aparatury w celu wytwarzania nowych zjawisk, które mogą potwierdzać lub obalać hipotetyczne modele opisujące sposób jej działania. To, co odróżnia badania laboratoryjne od badań teoretycznych, to ich stabilność, która wyraża się niewielką zmiennością wyników tych badań.

Ian Hacking wyróżnił trzy grupy składników konstytuujących praktykę nauk laboratoryjnych: składniki intelektualne (teoretyczne), przedmiotowe oraz operacje przeprowadzane na wynikach badań eksperymentalnych. Intelektualne (teoretyczne) składniki praktyki laboratoryjnej to: a) pytania formułujące problemy badawcze; b) wiedza podstawowa; c) teoria systematyczna; d) hipotezy lokalne (fenomenologiczne); e) modelowanie stosowanej aparatury badawczej. Przedmiotowe składniki praktyki laboratoryjnej to: a) przedmioty (układy empiryczne), na których się eksperymentuje; b) aparatura badawcza służąca do przetwarzania (modyfikowania) układów empirycznych i do detekcji; c) generatory danych; d) eksperymentatorzy. Operacje dokonywane na wynikach badań eksperymentalnych to: a) otrzymywanie danych (wyników); b) oszacowanie danych; c) redukcja danych; d) analiza danych; e) interpretacja danych⁸. Szczegółowa analiza porównawcza praktyk alchemicznych z praktyką laboratoryjną chemii musiałaby wziąć pod uwagę powyższe składniki nauki laboratoryjnej.

2.3. Koncepcja laboratorium Karin Knorr Cetina

Karin Knorr Cetina, reprezentująca mikro-konstruktywizm w socjologii nauki, twierdzi, że wyniki prac badawczych nie są odkrywanymi przez uczonych naturalnymi danymi, lecz kulturowo (społecznie) ukonstytuowanymi obiektami⁹. Społeczne aspekty praktyki laboratoryjnej (przyjęte techniki argumentacji, sposoby przedstawiania wyników badań, organizacja grup badawczych, respektowane przez badaczy systemy wartości, ekonomiczne aspekty pracy laboratoryjnej, wpływ czynników politycznych i światopoglądowych i wiele innych) wraz z całym jej wyposażeniem materialnym konstytuują specyficzne środowisko, jakim jest laboratorium. Manipulacja naturalnymi przedmiotami w laboratorium sprawia, że nabierają one charakteru społecznego i tracą walor obiektywności w rozumieniu realizmu. Laboratorium jest to miejsce, w którym porządek naturalny zostaje wzbogacony przez odniesienie go do porządku społecznego. W laboratorium

⁸ Powyższe składniki nauki laboratoryjnej w kontekście praktyki laboratoryjnej chemii omówiłem szerzej w: [Zeidler, 2006, s. 318-322].

⁹ Podstawowe idee swojej konstruktywistycznej socjologii wiedzy Karin Knorr Cetina przedstawiła w *The Manufacture of Knowledge: An Essay on the Constructivist and Contextual Nature of Science* [1981], a podejście do nauk laboratoryjnych w *The Couch, the Cathedral, and Laboratory: On Relationship between Experiment and Laboratory in Science* [1992, s. 113-138].

przeobrażeniu ulegają nie tylko naturalne przedmioty, lecz także sami badacze, a wyniki badań laboratoryjnych wpływają na społeczeństwo. Laboratorium jest więc złożonym bytem społecznym i tylko jako taki może być analizowane.

3. Dwa typy wiedzy: „wiedza, że” oraz „wiedza jak”

Dla dokonania analizy porównawczej praktyk alchemicznych z praktyką laboratoryjną chemii odwołam się do znanego rozróżnienia, wprowadzonego przez Ryle'a, na „wiedzę, że” i „wiedzę jak”¹⁰. „Wiedza, że” to tzw. *wiedza propozycjonalna*, wyrażona w zdaniach stwierdzających fakty, a przede wszystkim w prawach i teoriach naukowych. Natomiast „wiedza jak” to wiedza dotycząca umiejętności praktycznych. Jest to wiedza proceduralna wyrażana w dyrektywach działania, np. w preparatyce chemicznej. W odniesieniu do chemii jest to więc wiedza, która jest sformułowana w zasadach wykonywania poszczególnych czynności laboratoryjnych. W szerszym ujęciu będzie to cała wiedza niezbędna do podejmowania działań laboratoryjnych.

W kontekście nauki laboratoryjnej stawia się pytanie o relację zachodzącą między „wiedzą jak” a „wiedzą, że”: czy „wiedza jak” zakłada „wiedzę, że”? Na to pytanie, w odniesieniu do współczesnej praktyki laboratoryjnej chemii, udziela się na ogół odpowiedzi twierdzącej – „wiedza jak” jest możliwa dzięki „wiedzy, że”. Uzasadnia się również tezę, że rozwój metod badań laboratoryjnych oraz technicznego wyposażenia laboratorium chemicznego jest ściśle uzależniony od rozwoju wiedzy teoretycznej¹¹. Nie oznacza to jednak, że chemik pracujący w laboratorium musi każdorazowo uświadamiać sobie teoretyczne podstawy podejmowanych czynności laboratoryjnych. Co więcej, nie musi nawet „dysponować” określoną wiedzą teoretyczną. Można przyjąć, że postępuje on racjonalnie, gdy podejmuje czynności, co do których zakłada, że posiadają teoretyczne uzasadnienie. Założenie to odnosi się zwłaszcza do procedur kierujących posługiwaniem się bardzo skomplikowaną aparaturą badawczą. Chemicy nierzadko nie znają teoretycznych podstaw działania stosowanej aparatury, co – na ogół – nie wpływa na wyniki prowadzonych za jej pomocą badań.

¹⁰ Powyższe rozróżnienie zostało wprowadzone w ramach filozofii analitycznej i było dyskutowane zwłaszcza w kontekście kompetencji językowej użytkowników języka. Dla rozważań prowadzonych w tym artykule nie są istotne ani subtelne dystynkcje pojęciowe, wprowadzane w trakcie tej dyskusji, ani jego odniesienie do koncepcji znaczenia.

¹¹ Zdaniem Iana Hackinga „wiedza jak” (wiedza proceduralna) jest częściowo autonomiczna względem „wiedzy, że” (wiedzy teoretycznej). Wydaje się, iż powyższe twierdzenie nie znajduje uzasadnienia w odniesieniu do współczesnego laboratorium chemicznego.

4. Składniki praktyki alchemicznej

W ramach dokonywanej w literaturze przedmiotu analizy praktyki alchemicznej wyróżnia się dwa rodzaje jej składników: egzoteryczne i ezoteryczne. Składniki egzoteryczne są związane z – szeroko rozumianymi – materialnymi aspektami tej praktyki. Są to nie tylko substancje, z którymi eksperymentowano, jak i całe wyposażenie pracowni alchemicznej, lecz również wiedza proceduralna wypracowana przez alchemików, a także teoretyczne próby racjonalizacji działań podejmowanych w pracowni alchemicznej. Wymienione elementy można odnaleźć zwłaszcza w drugiej grupie składników praktyki laboratoryjnej wyróżnionej przez Hackinga. Trudno natomiast w grupie składników intelektualnych znaleźć taki, który odpowiadałby ściśle wiedzy proceduralnej.

Ezoteryczne elementy praktyk alchemicznych były związane z aktywnością „duchową” alchemików, wyrażającą się w filozoficznych, mistycznych, magicznych i religijnych aspektach tych praktyk. W różnych kontekstach kulturowych, w których działali alchemicy, udział poszczególnych elementów ezoterycznych był zróżnicowany. Zauważmy, że elementy ezoteryczne zasadniczo nie posiadają odpowiednika w charakterystyce praktyki laboratoryjnej zaproponowanej przez Hackinga. Można, co najwyżej, uznać, że filozoficzne koncepcje akceptowane przez alchemików stwarzały możliwość racjonalizacji podejmowanych przez nich działań. Jednakże w takim ujęciu filozofia stanowiłaby namiastkę teorii systematycznej i powinna być raczej zaliczona do egzoterycznych składników praktyki alchemicznej.

5. Podstawowe stanowiska dotyczące związków alchemii z chemią

Część historyków nauki stawia tezę, że nie można analizować praktyki alchemicznej ani rozpatrywać relacji zachodzących między alchemią a chemią, oddzielając jej składniki egzoteryczne od ezoterycznych. Uważają oni odseparowanie alchemii egzoterycznej od alchemii ezoterycznej za zabieg metodologicznie nieuprawniony. Zwolennicy „całościowego” ujmowania alchemii bronią tezę, że była ona pseudonauką, której nie można uznać za poprzedniczkę chemii, gdyż cele, jakie sobie stawiali alchemicy, nie były celami naukowymi. Wykazują także, że wraz z kształtowaniem się naukowego podejścia do badania przyrody wzrastało wśród filozofów i uczonych przekonanie, iż były one niemożliwe do zrealizowania¹².

¹² W tym zakresie istniała istotna różnica między uczonymi XVII i XVIII wieku. Jeśli w XVII wieku wielu wybitnych uczonych (np. Newton) interesowało się alchemią z powodów,

„Alchemia to nie prymitywna lub przednaukowa chemia, bowiem była ona zarazem czymś mniej (w ograniczonym zakresie swych aspiracji) niż nauką przyrodniczą i czymś więcej (w swych mistycznych powiązaniach)”¹³.

Wśród historyków nauki przeważają jednakże ci, którzy dowodzą, że istnieją ściśle związki egzoterycznych aspektów praktyki alchemicznej z praktyką laboratoryjną chemii. Twierdzą oni, że w ramach praktyki alchemicznej ukonstytuowało się pojęcie laboratorium. Stosowane przez alchemików materiały i przyrządy, wypracowane procedury eksperymentalne, podane przepisy otrzymywania różnych substancji są tymi składnikami praktyki alchemicznej, które ukonstytuowały laboratorium chemiczne i tym samym uzasadniają tezę, że alchemia była protochemią. Zgodnie ze słabszą wersją tej tezy, wymienione składniki praktyki alchemicznej zostały przejęte przez powstałą w XVII wieku chemię i dlatego istnieją ściśle genetyczne związki alchemii z chemią. Powyższe tezy uczynimy przedmiotem krytycznej analizy w dalszej części artykułu.

6. Analiza krytyczna tezy o związkach egzoterycznych składników praktyki alchemicznej z praktyką laboratoryjną chemii

6.1. Czy alchemicy stworzyli *laboratorium* i zapoczątkowali praktykę laboratoryjną?

Twierdzi się, że alchemicy przeprowadzali swoje doświadczenia w układach częściowo izolowanych (idea hermetyzmu w odniesieniu do aparatury). Dążąc do otrzymania kamienia filozoficznego, panaceum lub eliksiru życia, interweniowali w porządek naturalny, manipulując jakościowymi warunkami dokonywanych przemian. Zamierzali więc wytworzyć substancje, które nie są obserwowane w przyrodzie, choć niektórzy z nich zakładali, że transmutacja dokonuje się we wnętrzu Ziemi. Nadrzędnym celem ich działań było uzyskanie zjawisk niewystępujących w naturze – przemiany prowadzącej do otrzymania złota i nieśmiertelności. Należy tym samym uznać, że w pracowni alchemicznej był realizowany podstawowy cel badań laboratoryjnych w sensie Hackinga.

Alchemicy, postulując jedność przyrody i wzajemne oddziaływania wszystkich procesów, twierdzili, że dokonując przemiany chemicznej, sami biorą w niej udział. Przemiana metali nieszlachetnych w szlachetne miała doprowadzić nie tylko do uszlachetnienia materii, lecz również do uszlachetnienia ich samych.

mówiąc ogólnie, teologicznych, to w wieku XVIII, choć filozofia mechanistyczna zasadniczo dopuszczała możliwość transmutacji materii, „niemal wszyscy chemicy i fizycy uważali alchemię za pseudonaukę, a transmutację za proces technicznie niemożliwy” [Brock, 1999, s. 36-37].

¹³ Zobacz [Hall, 1966, s. 354].

Doskonalenie się alchemików miało wpływ na możliwość ingerowania w porządek naturalny. Powyższy postulat jest zbieżny z jednym z postulatów wysuwanych przez Knorr Cetinę w odniesieniu do praktyki laboratoryjnej współczesnej chemii. Można także wykazać, prowadząc rozważania w duchu koncepcji tej autorki, że usytuowanie społeczne alchemików determinowało sposoby, w jakie starali się realizować oczekiwania swoich mocodawców. Jednakże tym, co z socjologicznej perspektywy zasadniczo odróżnia działanie alchemików od sposobu pracy współczesnych chemików, jest fakt, że ci pierwsi działali w pojedynkę, a we współczesnym laboratorium chemicy pracują kolektywnie.

Celem działań alchemików nie było uzyskanie wiedzy teoretycznej o mechanizmach (prawach) rządzących zjawiskami naturalnymi, dlatego ich praktyka nie była działalnością laboratoryjną w sensie Roya Bhaskara. Z punktu widzenia koncepcji tego autora cele alchemii i chemii były zasadniczo odmienne. Alchemicy zmierzali do odkrycia tajemnicy, którą chcieli zawrzeć w formułach umożliwiających transmutację lub osiągnięcie nieśmiertelności. Odkrycie pewnych przemian chemicznych było jedynie ubocznym efektem ich działalności.

6.2. Egzoteryczne składniki alchemii a chemiczne aspekty praktyk rzemieślniczych

Ocenę rzeczywistego wkładu egzoterycznych składników alchemii w powstanie laboratorium chemicznego utrudnia fakt występowania różnorodnych praktyk rzemieślniczych, które rozwinęły się na ogół znacznie wcześniej niż działalność alchemików. Niekiedy były one ze sobą ściśle związane. Niewątpliwie alchemicy posługiwali się wieloma aparatami (urządzeniami), które należy uznać za prototypy aparatury badawczej używanej w laboratoriach chemicznych, np.: kolbami, chłodnicami, ambiksami (kolumnami rektyfikacyjnymi), piecami, retortami, alembikami (kompletnymi aparatami do destylacji) i wieloma innymi. Jednakże w przypadku każdego z tych urządzeń jedynie szczegółowe analizy historyczne mogą prowadzić do ustalenia, czy zostało ono odkryte przez alchemika, czy w ramach jednej z wielu praktyk rzemieślniczych. To samo dotyczy różnych technik rozdzielania i oczyszczania substancji oraz ich łączenia, które są również – w udoskonalonej formie – metodami praktyki laboratoryjnej chemii (destylacja, rektyfikacja, różne metody ogrzewania, krystalizacja, sublimacja i inne). Twierdzi się na przykład, że prototypy kotłów ekstrakcyjnych były stosowane w Mezopotamii przez zielarzy i wytwórców perfum już w 3000 roku p.n.e., a metodę destylacji doskonalono w trakcie wielu procesów rzemieślniczych, jak chociażby wyrobu stężonego alkoholu¹⁴. W literaturze przedmiotu alchemikom przypisuje się otrzymanie relatywnie niewielu nowych substancji – kilku podstawowych kwasów nieorganicznych i zasad,

¹⁴ Zobacz [Brock, 1999, s. 28-29].

antymonu, fosforu i kilku innych pierwiastków, których uzyskanie było, jak już stwierdziliśmy, ubocznym efektem ich pracy. Co istotniejsze, dzięki osiągnięciom metalurgii wszystkie podstawowe metale były znane już w starożytności. Także wiele przepisów otrzymywania konkretnych substancji (zwłaszcza stopów), zawartych np. w papirusach: Lejdejskim i Sztokholmskim, było inspirowanych osiągnięciami metalurgii, farbiarstwa czy tych aptekarzy i medyków, którzy wytwarzali leki. Dążenie do przeprowadzenia transmutacji mogło wyrażać się w chęci otrzymania „prawdziwego” złota, lecz częściej polegało na uzyskiwaniu substancji podobnej do złota poprzez barwienie metali i stopów złotem. W tym zakresie znaczne osiągnięcia posiadali również dawni jubilerzy, zwłaszcza z Syrii i Egiptu.

Traktat *Tajemnica tajemnic* perskiego lekarza i alchemika Rhazesza (Al-Raziego), żyjącego w IX-X wieku, jest uznawany za kompendium wiedzy o substancjach, aparaturze i metodach eksperymentalnych, które wykorzystywano w europejskiej alchemii i różnych praktykach rzemieślniczych w okresie średniowiecza, a następnie w wiekach XVI, XVII i XVIII, gdy powstawały nowożytne laboratoria chemiczne. Choć traktat ten był dziełem alchemicznym, to trudno uznać, że zawiera on wyłącznie opisy osiągnięć wczesnej alchemii. Jest on raczej wyrazem stanu zaawansowania technologicznego kultur materialnych znanych Rhazesowi.

Nie można jednakże nie dostrzegać wpływu niektórych alchemików na rozwój różnych wczesnych dziedzin zarówno chemii, jak i medycyny. Paracelsus, którego poglądy miały wiele wspólnego z alchemią ezoteryczną, rozwinął jatrochemię, której celem miało być wytwarzanie leków mineralnych. Tak więc idea uzyskiwania na drodze przemian chemicznych lekarstw narodziła się w obrębie światopoglądu alchemicznego.

6.3. Dlaczego nowożytne laboratorium chemiczne różni się istotnie od pracowni alchemicznej?

Choć praktyka alchemików współtworzyła – do pewnego stopnia – sytuację w kulturze, która doprowadziła do nowożytnej rewolucji naukowej, to podzielam opinię tych, którzy uważają, że jej wkład w ten proces nie był znaczący. Jest bowiem wiele istotnych różnic pomiędzy pracownią alchemiczną a laboratorium, w którym Lavoisier przeprowadzał eksperymenty, których wyniki doprowadziły do rewolucji w chemii¹⁵. Jedną z podstawowych była niemożność kontrolowania w pracowni alchemicznej warunków dokonywanych przemian – przede wszystkim tych parametrów, które posiadały charakter ilościowy. Na przykład alchemicy nie posiadali możliwości utrzymywania i kontrolowania temperatury, w której przeprowadzali

¹⁵ Przedstawiając problemy związane z egzoterycznymi aspektami praktyki alchemicznej, wykorzystuję niektóre ustalenia zawarte w artykule *The Chemical Background of Alchemical Recipes – Problems of Analysis* [Karpenko, 2004, s. 315-347].

eksperymenty. Nie określali również pod względem wagi substratów użytych do przemiany, zadowalając się jedynie nieprecyzyjnym określeniem stosunku, w jakim powinny być one użyte. Brak kontroli, a tym samym powtarzalności ilościowych aspektów przemian, sprawiał, że również powtarzalność, a zwłaszcza odtwarzalność uzyskiwanych rezultatów była niewielka¹⁶. Niemożność ścisłego określania ilościowych warunków zachodzenia przemian powodowała, że niektóre metody eksperymentalne nie posiadały jednoznacznej charakterystyki. Były też inne techniczne ograniczenia pracowni alchemicznej, które musiały być przezwyciężone, aby mogła powstać nowożytna chemia. Były to problemy związane z zatężaniem roztworów oraz zbieraniem lotnych produktów przemian i ich ilościową charakterystyką. Uporanie się z tą ostatnią kwestią umożliwiło sformułowanie tlenowej teorii spalania. Kolejny problem stanowiły zanieczyszczenia, z których identyfikacją i usuwaniem alchemicy sobie nie radzili, a przecież mogły one wpływać na przebieg przeprowadzanych przemian i uniemożliwiać ich powtarzalność i odtwarzalność. Na wyniki pracy alchemików wpływały negatywnie również ezoteryczne aspekty ich praktyki, które sprawiały, że dodawali substancje, których obecność w przemianie była podyktowana jedynie względami magiczno-religijnymi.

6.4. Wiedza alchemików związana z egzoterycznymi aspektami ich praktyki w świetle wiedzy współczesnej chemii

Wskażę wyłącznie na te składniki intelektualnego zaplecza praktyki alchemików, które miały umożliwiać racjonalizację przeprowadzanych eksperymentów. Pomiędzy natomiast ezoteryczne aspekty ich działalności, które z punktu widzenia dzisiejszej chemii nie mogły mieć wpływu na ich rezultaty. Wiedza związana z praktyką alchemiczną była przede wszystkim „wiedzą jak” (wiedzą proceduralną), a nie „wiedzą, że” (systematyczną teorią w sensie Hackinga). Z powodów wymienionych w poprzednim paragrafie stosowane przez alchemików procedury nie gwarantowały powtarzalności, a zwłaszcza odtwarzalności wyników eksperymentów. Alchemicy nie byli również w stanie charakteryzować otrzymanywanych substancji za pomocą wielkości mierzalnych. Z powyższych względów wiedza proceduralna, będąca rezultatem praktyki alchemicznej, nie spełniała w wystarczającym stopniu warunku intersubiektywnej sprawdzalności¹⁷.

¹⁶ Odwołuję się do rozróżnienia na powtarzalność i odtwarzalność eksperymentu, które wprowadził H. P. Plesch w artykule *On the Distinctness of Chemistry* [1999, s. 6-15]. Powtarzalność wiązał on z jakościowymi aspektami przeprowadzanych eksperymentów (np. użyciem tych samych substratów i otrzymaniem tych samych produktów), a odtwarzanie z ich aspektami ilościowymi. Plesch wykazał, że nawet we współczesnej chemii mogą się pojawić kłopoty z odtworzeniem niektórych syntez chemicznych.

¹⁷ Intersubiektywność wiedzy proceduralnej oznaczałaby, że stosowanie danej procedury w tych samych warunkach prowadzi zawsze do tych samych rezultatów.

Wiedza proceduralna alchemików nie była sterowana systematyczną wiedzą teoretyczną; nie sformułowali oni również teoretycznych modeli przedstawiających zasady działania stosowanej aparatury. W starożytnej Grecji, w Egipcie okresu hellenistycznego, w alchemii arabskiej późniejszych wieków oraz w średniowiecznej Europie teoretycznego uzasadnienia praktyce alchemicznej dostarczały filozoficzne koncepcje budowy materii, a zwłaszcza koncepcja czterech elementów Empedoklesa, którą rozwinął Arystoteles. Zgodnie z nią cztery elementy (zasady, pierwiastki), posiadające określone właściwości, mogą łączyć się ze sobą, tworząc różne substancje. W późniejszym okresie próbowano wyjaśniać przemiany związane z otrzymywaniem różnych stopów przez odwołanie się do trzech podstawowych „pierwiastków”: rtęci, siarki i soli. Natomiast w bardzo niewielkim stopniu alchemicy odwoływali się do koncepcji atomistycznej Demokryta, choć pojawiła się w niej idea wiązania pomiędzy atomami.

Rozwój chemii mógł więc nastąpić dopiero w XVII wieku, gdy Robert Boyle zaproponował mechanistyczną koncepcję korpuskularnej budowy materii¹⁸. W kontekście rozważanego zagadnienia istotne jest to, że wraz z powstaniem tej teorii pojawiły się nie tylko możliwości teoretycznego wyjaśnienia przebiegu obserwowanych przemian, lecz można było także postawić pytanie o skład chemiczny substancji oraz o ilościowe proporcje, w jakich uczestniczą one w przemianach chemicznych. Tymczasem wyjaśnianie i przewidywanie w alchemii posiadało jedynie charakter jakościowy i stanowiło – niezbyt udaną – próbę racjonalizacji działań podejmowanych przez alchemików.

W literaturze z zakresu historii chemii stawia się niekiedy tezę, że język alchemii, w którym na szeroką skalę posługiwano się symbolami nie tylko na oznaczenie używanych substancji, lecz również na oznaczenie przyrządów i stosowanych procedur, przyczynił się do powstania symboliczno-ikonicznego języka nowożytnej i współczesnej chemii. Jednakże język alchemików był strukturalnie odmienny od języka chemii, gdyż tylko za pomocą symboliki, reprezentującej atomowe i molekularne aspekty budowy materii, można wyjaśniać i przewidywać przemiany chemiczne. Tymczasem symbolika, jaką posługiwali się alchemicy, choć upraszczała zapis eksperymentów alchemicznych, mogła być interpretowana wyłącznie w świetle ezoterycznych składników ich praktyki.

¹⁸ William Newman starał się wykazać, że niektórzy alchemicy wnieśli istotny wkład w rewolucję naukową w chemii, powołując się na fakt, iż nie tylko rozwinęli różnorodne techniki eksperymentalne, lecz próbowali, na przykład Geber, łączyć koncepcję Arystotelesa z atomistycznymi ideami odniesionymi do zachodzących procesów. Zobacz [Newman, 2006, s. 31-35].

7. Wnioski

Zakładając możliwość oddzielenia egzoterycznych składników praktyki alchemicznej od jej składników ezoterycznych, można szukać genetycznych związków tych pierwszych z praktyką badawczą chemii. Wiele materialnych składników praktyki alchemicznej zostało wykorzystanych w praktyce laboratoryjnej chemii, lecz związana z działalnością praktyczną wiedza alchemików była przede wszystkim wiedzą proceduralną. Ponieważ alchemicy nie byli w stanie kontrolować ilościowych aspektów przemian, dlatego wytworzona przez nich wiedza proceduralna tylko w niewielkim stopniu spełniała warunek intersubiektywnej sprawdzalności. Praktyka alchemiczna ani nie doprowadziła do wytworzenia wiedzy teoretycznej w nowożytnym sensie tego terminu, ani się na niej nie opierała. Zaplecze teoretyczne wiedzy proceduralnej alchemików stanowiły koncepcje filozoficzne. Wyjaśnianie stosowane w alchemii miało charakter jakościowy, niekiedy racjonalizujący, lecz na ogół mistyczno-magiczno-religijny. Nie ma więc wystarczająco uzasadnionych powodów, aby twierdzić, że praktyka alchemików doprowadziła do wykształcenia się laboratoryjnego stylu badań naukowych, charakterystycznego dla nowożytnej i współczesnej chemii.

IV

O teoretyczności chemii – studium metodologiczne

1. Wstęp

Przyjmuje się, iż tzw. nauki fizykalne zajmują się opisywaniem i wyjaśnianiem właściwości materii. Choć poszczególne nauki fizykalne badają materię na różnych stopniach jej złożoności i czynią to na wiele odmiennych sposobów, to w filozoficznej i metodologicznej refleksji nad tymi naukami dominuje teoretycystyczny paradygmat, w którym dokonuje się ich opisu i oceny. Zgodnie z tym paradygmatem jedynie te z nich są naukami w pełni dojrzałymi, których wytworami są teorie naukowe ujęte w postać zmatematyzowanych systemów dedukcyjnych. Tylko one, dzięki wyjaśniającej i przewidystycznej mocy teorii naukowych, dostarczają wiedzy wartościowej poznawczo, która umożliwia zarazem realizację technologicznych celów nauki. Paradygmatycznym przykładem takiej nauki jest fizyka, gdyż to przede wszystkim do analizy jej wytworów można zastosować, wypracowane w ramach teoretycyzmu, metody rekonstrukcji wiedzy naukowej. Dlatego właśnie do fizyki odnosi się większość rozważań prowadzonych w ramach tradycyjnej filozofii i metodologii nauk empirycznych i to do niej sięgają zwolennicy badań diachronicznych nad nauką, gdy ustalają prawidłowości rządzące jej rozwojem. Inne dyscypliny fizykalne, a wśród nich chemia, spełniają teoretycystyczne standardy w znacznie mniejszym stopniu; stąd są uznawane za nauki znajdujące się w mniej zaawansowanym teoretycznie stadium rozwoju. Owe odstępstwa od modelu, jaki stanowi fizyka, tłumaczy się na ogół ontologiczną złożonością przedmiotu ich badań, która prowadzi do metodologicznych, a w konsekwencji także poznawczych osobliwości tych nauk.

Filozofowie i metodolodzy, którzy próbowali stosować teoretycystyczne standardy do opisu chemii, stwierdzali, że wytwory tej nauki tylko w niewielkim

stopniu poddają się analizie za pomocą kategorii pojęciowych i metod wypracowanych w ramach tego paradygmatu. Konstatowali, że to, co chemicy określają mianem teorii, nie spełnia zazwyczaj warunków nakładanych na teorie w metodologii formalnej nauk empirycznych, a próby ich logicznej rekonstrukcji nie tylko zawodzą w większości przypadków, lecz nie są w stanie objąć znaczącej części rezultatów badań chemików. Fakt ten tłumaczono zazwyczaj ontologiczną specyfiką przedmiotu badań chemii jako nauki o pewnego typu przemianach materii dotyczących substancji chemicznych, które mogą być rozpatrywane na poziomie molekularnym. To właśnie wyższy stopień „substancjalnej” złożoności przedmiotu chemii niż fizyki miał sprawiać, że rezultaty badań nad tymi pierwszymi nie dawały się ująć w postać teorii o odpowiednio wysokim stopniu ogólności. Zwolennicy teoretycyzmu zakładali jednakże, iż skoro cząsteczki zbudowane są z atomów, których własności bada fizyka, to chemia jako nauka o układach złożonych z atomów będzie mogła być zredukowana do fizyki. Sugerowany w powyższym stwierdzeniu program redukcji chemii do fizyki na bazie mechaniki kwantowej miał swojego poprzednika w mechanicyzmie, którego próby realizacji w XIX wieku na terenie chemii nie doprowadziły do znaczących rezultatów. Niezależnie od kłopotów związanych z realizacją idei redukcji chemii do fizyki przekonanie o tym, że chemię zasadniczo można sprowadzić do fizyki bądź że jest ona wprost działem fizyki, było wśród fizyków i filozofów nauki bardzo rozpowszechnione. Jednakże wydaje się, że rację miał D. W. Theobald, gdy pisał: „Obie te nauki zajmują się właściwościami materii, ale [...] różnice między nimi wystarczają, aby wchłonięcie chemii przez fizykę uczynić simpliciter błędem filozoficznym, który działa na szkodę praktyki chemicznej” [Theobald, 1977, s. 142]. Redukcjonistyczna ideologia, którą wyznawało także wielu chemików, była niewątpliwie współodpowiedzialna za to, że do lat osiemdziesiątych XIX wieku nie wykształciła się filozofia chemii jako osobny dział refleksji filozoficznej nad nauką.

Nowe filozoficzne i metodologiczne ujęcie chemii powstało wraz ze zmianą spojrzenia na praktykę badawczą chemii i wiązało się z uświadomieniem sobie tego oczywistego faktu, że jest to przede wszystkim praktyka laboratoryjna, a zasadniczym przedmiotem filozoficznych i metodologicznych badań nad chemią powinien być eksperyment chemiczny. O specyfice chemii jako dyscypliny naukowej zajmującej się wytwarzaniem nowych substancji, których zdecydowana większość nie występuje w przyrodzie w sposób naturalny, rozstrzyga praktyka eksperymentalna. Chcąc oddać tę specyfikę, należy zrezygnować z teoretycyzmu, który rozpatrywał eksperyment naukowy jedynie w kontekście testowania teorii naukowych, i zwrócić się w kierunku filozofii „nowego eksperymentalizmu”. Filozofię tę stanowi bardzo zróżnicowany wewnętrznie nurt badań nad naukami empirycznymi, który kładzie nacisk na analizę ich eksperymentalnej praktyki badawczej. Jeden z jego zasadniczych nurtów został zapoczątkowany

książką Iana Hackinga *Representing and Intervening* [1993], gdzie autor zaproponował aparat pojęciowy, za pomocą którego można opisywać daną naukę empiryczną od strony jej praktyki eksperymentalnej. Choć sam Hacking analizował głównie eksperymentalną praktykę badawczą fizyki, to wypracowany przez niego aparat pojęciowy nadaje się w jeszcze większym stopniu do opisu chemii, w której praktyka eksperymentalna odgrywa rolę kluczową. Spojrzenie na chemię z perspektywy „nowego eksperymentalizmu” umożliwi przedstawienie tej nauki od strony podejmowanych w niej czynności badawczych, a takie ujęcie bardziej odpowiada przedmiotowi chemii, która zajmuje się przede wszystkim celowymi przemianami materii – wytwarzaniem nowych substancji chemicznych.

Analizując laboratoryjną praktykę badawczą chemii, można w nowym świetle ujrzeć również działalność teoretyczną chemików, która stanowi nieodłączny element składowy prowadzonych przez nich badań. Z tej perspektywy teoretyzowanie w chemii przestaje być ujmowane jako odrębny rodzaj praktyki badawczej. I chociaż są tacy chemicy, którzy prowadzą jedynie rozważania teoretyczne, to jednak rolę teorii w chemii dostrzeże się dopiero wtedy, gdy założy się, że myślenie teoretyczne steruje praktyką laboratoryjną. Teoretyzowanie tak ujęte nie jest już jednorodną formą pracy naukowej, ale ulega rozbiciu na wiele działań, takich jak: spekulacja, kalkulacja czy budowanie modeli. Proponowane w tym artykule podejście do chemii prowadzi do pozbycia się redukcjonistycznych marzeń i pozwala w pełni ujrzeć specyfikę chemii jako nauki eksperymentalnej. Okaze się wtedy, że znaczna moc przewidywczą i wyjaśniającą (racjonalizującą) chemii wcale nie musi być rezultatem występowania w tej nauce teorii o wysokim stopniu uniwersalności. Uzasadnione stanie się przekonanie, wyrażane już przez niektórych chemików, a także filozofów chemii, że jest to nauka szczególnego rodzaju, różniąca się od innych nauk empirycznych i dlatego zasługująca na odrębną refleksję filozoficzną i metodologiczną¹.

Celem rozważań zawartych w tym artykule jest analiza teoretycznych składników praktyki badawczej chemii. Proponuję w nim zrezygnować z teoretycznego sposobu charakteryzowania chemii i zastąpić go analizą roli myślenia teoretycznego w eksperymentalnej praktyce badawczej chemii. Rozważania ostatniej części artykułu będą wykorzystywały aparat pojęciowy wypracowany przez I. Hackinga, choć będzie on musiał ulec znacznym modyfikacjom i uzupełnieniom, gdyż praktyka eksperymentalna chemii różni się pod wieloma względami od praktyki eksperymentalnej fizyki.

¹ Takiego zdania jest np. J. Schummer w artykule *W kierunku filozofii chemii* [1999, s. 173-202].

2. Chemia z perspektywy teoretycyzmu

2.1. O teoretycystycznym paradygmacie w filozofii nauki

„Nauki empiryczne są systemami teorii. Logikę poznania naukowego można więc scharakteryzować jako teorię teorii” [Popper, 1977, s. 53]. Choć powyższe stwierdzenie jest w większym stopniu wyrazem normatywnych przekonań jego autora niż opisem stanu faktycznego, to w literaturze poświęconej filozofii i metodologii nauk empirycznych stopień teoretycznego zaawansowania poszczególnych dyscyplin jest często uznawany za miarę ich naukowości. Teoretyczność natomiast jest wiązana ze stopniem zmatematyzowania danej nauki i jej zdolnością do budowania systemów dedukcyjnych, u których podstawy znajdują się prawa ściśle ogólne. Badania nad teoriami empirycznymi, wykorzystujące metody formalno-logiczne lub teoriomnogościowe, doprowadziły do ukształtowania się pojęcia teorii jako zbioru formuł zdaniowych zamkniętych ze względu na operację konsekwencji logicznej lub jako klasy modeli o strukturze zdefiniowanej przez odpowiedni predykat teoriomnogościowy. Teoretycystyczny punkt widzenia zdaje się akceptować przede wszystkim wielu fizyków, choć niewielu z nich interesuje się logiką poznania naukowego, której produktem końcowym ma być, jak stwierdza F. Rohrlich [1981, s. 15], teoria naukowa ujęta jako aksjomatyczny, dedukcyjny, logiczno-matematyczny system.

Celem tak rozumianych nauk empirycznych jest poszukiwanie teorii wyjaśniających, umożliwiających wydedukowanie, przy założeniu znajomości warunków początkowych, zdań o faktach rozstrzygalnych na drodze doświadczalnej. Jeśli w danej dyscyplinie empirycznej można budować teorie naukowe, które są podstawowymi nośnikami treści empirycznej, to wtedy uchwycenie jej skuteczności przewidywającej, eksplanacyjnej, a nawet technologicznej nie napotyka – w metodologii i filozofii nauki – na większe przeszkody. To, co w istotny sposób różnicuje przedstawicieli teoretycystycznego paradygmatu, to ich zapatrywania dotyczące statusu poznawczego teorii naukowych. Zwolennicy instrumentalizmu, zgodnie z którym teorie są jedynie narzędziem (rachunkiem) umożliwiającym porządkowanie danych doświadczenia oraz dedukowanie przewidywań, ograniczają rolę teorii w nauce. Z realistycznego punktu widzenia w naukach empirycznych zmierza się do sformułowania teorii wyjaśniających (w miarę możliwości prawdziwych), opisujących pewne strukturalne własności świata i umożliwiających wydedukowanie zjawisk, które mamy wyjaśnić [Popper, 1977, s. 55].

W ramach teoretycystycznego paradygmatu współczesnej metodologii ukształtowało się „ustalone podejście” nie tylko do teorii naukowej, lecz również do badania relacji między teorią a eksperymentem naukowym oraz teoretycystyczny opis

samej praktyki eksperymentalnej². Rola praktyki eksperymentalnej miała ograniczać się do sytuacji, w których dokonuje się wyboru pomiędzy konkurencyjnymi teoriami, lub do procedur uzasadniania teorii naukowych. Wskazywano również na silne uzależnienie eksperymentu od teorii. Eksperyment jest, jak twierdził Popper, „zaplanowanym działaniem, gdzie każdy krok kierowany jest przez teorię” [Popper, 1977, s. 224]. Teorie nie tylko wyznaczają cele eksperymentów i sposoby ich przeprowadzenia, lecz również na ich bazie budowana jest aparatura badawcza i wreszcie to one umożliwiają interpretację otrzymywanych wyników. W powyższym ujęciu nauk empirycznych eksperyment naukowy nie jest – poza kontekstem teorii, z których wyrasta i do których odnoszą się jego rezultaty – interesujący dla filozofów i metodologów nauki.

Teoretycyzm wprowadził zespół standardów, które wykorzystywano do oceny stopnia dojrzałości danej dyscypliny naukowej. Standardy te w najwyższym stopniu spełniała fizyka, stąd też odwoływano się właśnie do przykładów zaczerpniętych z fizyki, egzemplifikując rozważania prowadzone w filozoficznej i metodologicznej refleksji nad naukami empirycznymi. Fizyka buduje najbardziej ogólne i zmatematyzowane teorie, gdyż dotyczy najbardziej podstawowych właściwości świata fizycznego. Wiązało się z tym również przekonanie o możliwości sformułowania teorii ostatecznej, która unifikowałaby całą wiedzę fizykalną. Nauki empiryczne, które w niewielkim stopniu spełniały teoretycystyczne standardy, uznawano za dyscypliny znajdujące się w fazie rozwoju przedteoretycznego, co wyjaśniano, odwołując się do specyfiki ich przedmiotu badań. Powyższe okoliczności uzasadniały również próby redukcji tych nauk do fizyki. Należała do nich także chemia, której status metodologiczny widziany z perspektywy teoretycyzmu będzie przedmiotem rozważań w następnych paragrafach tego rozdziału.

2.2. O tym, co chemicy nazywają teorią chemiczną

Sądząc na podstawie literatury poświęconej historii chemii oraz podręczników z zakresu różnych działów chemii, należałoby dojść do przekonania, że chemia w swoich dziejach dopracowała się bardzo wielu teorii naukowych. Mówi się na przykład o: teorii flogistonowej, teorii tlenowej, teorii atomistycznej Daltona, teorii stereochemicznej, teorii rodników, teorii podstawień, teorii ligandów, teorii struktury chemicznej, teorii kwasów Lowry’ego i Brönsteda, elektronowej teorii wiązań Lewisa, teorii orbitali molekularnych, teorii wiązań walencyjnych i wielu innych teoriach³. Teoretyczny charakter nadaje się również prawu okresowości

² Na temat teoretycystycznego paradygmatu w filozofii nauki zobacz [Zeidler, 1994, s. 87-108].

³ W indeksie rzeczowym obszernej pracy W. Bergandy, poświęconej historii chemii, termin teoria z dookreśleniem wskazującym na to, że mamy do czynienia z teorią chemiczną, występuje 30 razy [1997, s. 467-468].

Mendelejewa. Można by więc przypuszczać, że chemia jest w pełni rozwiniętą pod względem teoretycznym dyscypliną naukową, a budowanie teorii jest – jak twierdziło wielu wybitnych chemików – jej ostatecznym celem⁴. Z drugiej strony liczni metodolodzy i filozofowie nauki poddają w wątpliwość występowanie w chemii teorii rozumianych jako systemy dedukcyjne, sformułowane w języku zmatematyzowanym, których podstawowe twierdzenia byłyby prawami ściśle ogólnymi. W najwyższym stopniu takie pojęcie teorii spełniałyby teorie molekularnej mechaniki kwantowej. Zauważmy jednak, że z powodów, które będziemy rozważali w następnym paragrafie, bardzo często mówi się nie tyle o teoriach molekularnej mechaniki kwantowej, co o jej metodach, np. metodzie wiązań walencyjnych lub metodzie orbitali molekularnych⁵. Istotne znaczenie ma także fakt, że większość metod kwantowych, opracowanych w celu rozwiązywania problemów chemicznych, to metody semiempiryczne.

Oczywiście, nawet w praktyce badawczej fizyki teorie nie są przedstawiane jako sformalizowane i aksjomatyzowane systemy dedukcyjne. Jednakże większość z nich może być, przynajmniej w zasadzie, zrekonstruowana w taki sposób. Czy to samo dotyczy teorii chemii? Dzięki przyjęciu określonych założeń idealizacyjnych klasyczna teoria struktury chemicznej mogła być poddana formalizacji i aksjomatyzacji, a następnie mogły zostać określone reguły generowania modeli dla poszczególnych cząsteczek⁶. Jednakże założenia idealizacyjne sprawiają, że wiele struktur, które można wydedukować z przyjętych aksjomatów, nie posiada swoich rzeczywistych odpowiedników i odwrotnie; istnieje bardzo duża liczba cząsteczek związków chemicznych, których struktury nie mogą zostać wydedukowane z przyjętych aksjomatów. Zrekonstruowana postać teorii struktury chemicznej posiada tak liczne ograniczenia, że w niewielkim stopniu reprezentuje zespół koncepcji teoretycznych, które konstytuowały klasyczną teorię struktury chemicznej.

Wydaje się, iż jednym z podstawowych powodów nieuznawania chemii za naukę teoretyczną jest ciągle rozpowszechnione przekonanie o niewielkim stopniu zmatematyzowania języka chemii. Cięży niewątpliwie na chemii opinia Kanta, który wychodził z założenia, że „w każdej poszczególnej nauce przyrodniczej jest tylko tyle nauki ścisłej, ile jest w niej zawartej matematyki”, i twierdził, że „jeżeli jej podstawy i zasady jak np. w chemii są ostatecznie tylko empiryczne i prawa tłumaczące drogą rozumową dane fakty są tylko prawami empirycznymi, to nie świadczą o swojej konieczności (nie są apodyktycznie pewne) i w sumie nie zasługują na miano nauki i dlatego chemia w ścisłym tego słowa znaczeniu nazywać

⁴ Zobacz na ten temat [Rodny, 1977, s. 70 i n.].

⁵ Zobacz np. [Atkins, 1974, s. 268-278].

⁶ Aksjomatyzację i formalizację w języku pierwszego rzędu klasycznej teorii struktury chemicznej przedstawił J. J. Mulckhuyse [1961, s. 133-151].

się powinna raczej usystematyzowaną sztuką niż nauką”⁷. Z punktu widzenia dwudziestowiecznej chemii przekonanie to nie wydaje się słuszne, gdyż można wskazać chociażby na chemię kwantową, żeby wykazać jak bardzo zaawansowany aparat matematyki jest stosowany w chemii. Lecz współcześni zwolennicy opinii Kanta mogą argumentować, że o naturze chemii jako nauki decyduje praktyka eksperymentalna, dostarczająca istotnej części wiedzy chemicznej, która nie jest sformułowana w języku matematyki. W trzeciej części tego artykułu będziemy starali się wykazać, że jeśli chemicy eksperymentatorzy nie wykorzystywaliby na szeroką skalę matematyki, to nie byłoby w stanie uprawiać swojej nauki. Należy zgodzić się z J. Schummerem, że „szeroko rozpowszechniona opinia, jakoby chemia była nauką jakościową, jest błędna. Przeciwnie, wszystkie typy zachowań chemicznych ujmowane w kategoriach jakościowych można równie dobrze wyrazić w kategoriach ilościowych” [Schummer, 1999, s. 178].

Inną przyczyną niewielkiej liczby teorii chemii, którym można by nadać postać sformalizowanego i aksjomatyzowanego systemu dedukcyjnego, jest mała liczba praw chemii, które byłyby rzeczywiście prawami ściśle ogólnymi. Obok praw molekularnej mechaniki kwantowej, których status metodologiczny wymaga osobnego zbadania, oraz prawa zachowania masy i energii w reakcjach chemicznych, za prawa o wysokim stopniu ogólności uznaje się także prawo okresowości Mendelejewa i prawa stechiometryczne⁸, choć te ostatnie mają już wyraźnie charakter idealizacyjny. Jednakże w zdecydowanej liczbie przypadków zakres obowiązywania praw chemii jest bardzo ograniczony. Szczególną rolę pełnią prawa, które kodyfikują pewne obserwowalne tendencje, lecz dokładne określenie zakresu ich obowiązywania nie jest możliwe. Tego typu prawa rekonstruuje się pod postacią tzw. formuł nomologicznych⁹. Formuły nomologiczne mogą być użyte w eksplanansie wyjaśniania naukowego, np. w chemii organicznej, w której – zdaniem wielu metodologów – trudno jest stosować model wyjaśniania Hempla-Oppenheima ze względu na, wspomnianą wyżej, bardzo niewielką liczbę ściśle ogólnych praw chemii. Z tego powodu D. W. Theobald twierdzi, iż „rodzaje wyjaśnień stosowanych przez chemików są często swobodniejsze i mniej analityczne aniżeli pełny

⁷ Opinię taką zawarł Kant w przedmowie do *Metaphysische Anfangsgründe der Naturwissenschaft* (Ryga 1786). Cytat za: [Fierz-David, 1958, s. 14].

⁸ Na temat praw chemii zobacz [Sobczyńska, 1996, s. 181-185]. Autorka rozwija koncepcję gradualizmu nomologicznego, wskazując na to, że większość praw chemii nie jest ściśle ogólna i tym samym teorie konstytuowane przez prawa posiadają także jedynie ramowy charakter. Ten stan rzecz Sobczyńska zdaje się uznawać za przejściowy i postuluje „ciągły wysiłek w kierunku doskonalenia praw i teorii chemicznych” po to, by chemia stała się pod względem teoretycznym podobna do fizyki [Sobczyńska, 1996, s. 184-185].

⁹ Szczegółową analizę zastosowania pojęcia formuły nomologicznej, wprowadzonego przez Jerzego Kmitę, do wyjaśnień stosowanych w chemii organicznej można znaleźć w pracy E. Zielonackiej-Lis [1981, s. 93-114].

hemplowski model wyjaśniania, stosowany w niektórych działach fizyki” [Theobald, 1977, s. 147]. Jego zdaniem, w chemii wyjaśnianie teoretyczne powinno być zastąpione wyjaśnieniem racjonalnym, które nie musi odwoływać się do praw o wysokim stopniu ogólności, lecz powinno polegać na poszukiwaniu przyczyn zajścia danego zjawiska. Teorie w chemii są bowiem na ogół „racjonalizującymi konstrukcjami obejmującymi olbrzymie zestawy danych eksperymentalnych aniżeli ścisłymi matematycznymi sformułowaniami, zagrożonymi pojedynczymi ilościowymi niepowodzeniami” [Theobald, 1977, s. 153].

Do opisu teoretycznej praktyki badawczej chemii można wykorzystać koncepcję praw nauki sformułowaną przez N. Cartwright w książce *How the Laws of Physics Lie* [1983]. Autorka dzieli prawa nauki dychotomicznie: na prawa fundamentalne (teoretyczne) i fenomenologiczne. Powyższy podział nie wprowadza neopozytywistycznego rozróżnienia czy to na prawa sformułowane w języku teoretycznym i prawa sformułowane w języku obserwacyjnym, czy też na prawa dotyczące tego, co nieobserwowalne, i tego, co obserwowalne. Cartwright przyjmuje, że wszystkie prawa współczesnych nauk fizykalnych mają charakter teoretyczny. Różnica między nimi polega na tym, iż prawa fundamentalne pełnią w nauce funkcję wyjaśniającą i posiadają charakter idealizacyjny. Będąc formułami typu *ceteris paribus*, nie mogą opisywać szerokich dziedzin zastosowań, do których wyjaśnienia są formułowane. Prawa te są więc fałszywe, a wyjaśnienia teoretyczne formułowane przy ich użyciu są spełnione wyłącznie w modelach, które opisują sytuacje wyidealizowane¹⁰. Natomiast prawa fenomenologiczne są budowane w celu opisu konkretnego zjawiska lub grupy zjawisk z danej dziedziny i są ustalane na podstawie badań eksperymentalnych lub – przynajmniej – testowane przez bezpośrednie pomiary. Ponieważ badania eksperymentalne są we współczesnych naukach empirycznych teoretycznie uwikłane, to prawa fenomenologiczne nie są prawami obserwacyjnymi w neopozytywistycznym rozumieniu tego terminu.

Wydaje się, iż prawa fundamentalne są w chemii niezwykle rzadkie. Można do nich zaliczyć na przykład zrekonstruowane przez J. Mulckhuysse’a prawa struktury chemicznej, które są spełnione w dziedzinie wyidealizowanych modeli cząsteczek związków chemicznych lub wymienione wyżej prawa o wysokim stopniu ogólności, jak np. prawa stechiometryczne. W chemii dominują prawa fenomenologiczne, które opisują na ogół wąskie dziedziny zjawisk badanych przez chemików eksperymentatorów. Przykładem takich praw mogą być proste empiryczne równania szybkości reakcji. Okazuje się, iż ogólnie biorąc, nie można wyprowadzić funkcji szybkości reakcji, która jest funkcją stężenia jednego lub większej liczby składników reagującego układu, na podstawie stechiometrycznego równania

¹⁰ W literaturze przedmiotu wskazywano na to, iż N. Cartwright w sposób dwuznaczny posługuje się pojęciem prawdy. Jeśli prawa fundamentalne są spełnione w modelu, to można powiedzieć, iż w sensie teorii prawdy Tarskiego są prawdziwe.

reakcji¹¹. Trudności te wynikają między innymi z faktu, że równania stechiometryczne nie uwzględniają możliwości różnych mechanizmów reakcji, które przebiegają zgodnie z podobnymi równaniami stechiometrycznymi. Wyznaczenie szybkości reakcji staje się więc problemem analitycznym, a do pomiarów wybiera się takie wielkości fizyczne, które w sposób charakterystyczny zmieniają się w czasie przebiegu reakcji. Ponieważ badania kinetyczne są doskonałym przykładem ścisłego połączenia rozważań teoretycznych z badaniami eksperymentalnymi i ukazują rolę, jaką kalkulacja matematyczna odgrywa w badaniach eksperymentalnych, więc dalsze omówienie tego przykładu zostanie przeniesione do trzeciej części artykułu, w której podejmę również kwestię możliwości stosowania w praktyce eksperymentalnej chemii koncepcji wyjaśniania przyczynowego N. Cartwright.

Jeśli więc chemicy nie budują teorii, których podstawowe prawa byłyby prawami fundamentalnymi i które stanowiłyby system dedukcyjny, to w jakim znaczeniu używają terminu teoria naukowa? Wydaje się, że używają go w odniesieniu do koncepcji, których analiza pozwala ujawnić cztery podstawowe elementy składowe¹². Są to: centralne, a zarazem charakterystyczne założenia teorii, które można określić również mianem tzw. założeń kierujących, motywacje leżące u podstawy jej sformułowania, sposób rozwijania teorii oraz dyskusja dotycząca jej sprawdzania. Łatwo zauważyć, że w przypadku teorii chemii trzy ostatnie elementy wiążą się ściśle z praktyką eksperymentalną. Ocena podstawowych postulatów teorii dotyczy możliwości ich stosowania do rozwiązywania problemów o charakterze konceptualnym, które powstają w trakcie pracy eksperymentalnej. Zatem do analizy konkretnych teorii chemii, bardziej od koncepcji teorii naukowych sformułowanych w teorii nauki, nadają się koncepcje wypracowane w ramach historycznego nurtu badań nad nauką, a w szczególności metodologia naukowych programów badawczych I. Lakatos'a i koncepcje racjonalizacji wiedzy naukowej i jej zmiany zaproponowane przez L. Laudana¹³. Niekiedy podstawową rolę w koncepcjach nazywanych przez chemików teoriami odgrywają definicje kluczowych pojęć, stanowiące następnie podstawę odpowiednich klasyfikacji, które odgrywają olbrzymią rolę w praktyce eksperymentalnej. Na przykład w teorii Brönsteda oraz w teorii Lewisa zasadnicze znaczenie mają definicje kwasów i zasad, które umożliwiają klasyfikację związków organicznych ze względu na rolę, jaką odgrywają one w reakcjach chemicznych. Uzyskane klasyfikacje ułatwiają planowanie reakcji i wyjaśnianie ich przebiegu. Teoretycznym funkcjom klasyfikacji w kontekście praktyki eksperymentalnej chemii poświęćmy więcej uwagi w trzeciej części artykułu.

¹¹ Zobacz [Schwetlick, 1975, s. 27-86].

¹² Elementy te scharakteryzował P. Achinstein [1968, s. 138-148].

¹³ Przykłady dociekań nad niektórymi teoriami chemii w aparacie pojęciowym koncepcji L. Laudana można znaleźć w zbiorze artykułów pt. *Scrutinizing Science*. Zobacz np. [Bechtel, 1992, s. 163-180], [Diamond Jr., 1992, s. 181-198] lub [Rocke, 1992, s. 145-162].

3. Teoretyczność chemii w świetle „nowego eksperymentalizmu”

3.1. Główne wyznaczniki podejścia I. Hackinga do teoretycznej działalności uczonych w naukach eksperymentalnych

„Nowy eksperymentalizm” jest, jak zauważył I. Hacking, terminem, który powinien odnosić się do szerokiego zakresu badań historycznych, filozoficznych i socjologicznych nad praktyką eksperymentalną nauk empirycznych, zainicjowanych na początku lat osiemdziesiątych XX wieku, i nie należy go wiązać z żadną konkretną filozoficzną ideologią, np. realistyczną bądź antyrealistyczną [Hacking, 1995/1996, s. 538]. Kontynuując tę myśl Hackinga, należy stwierdzić, że „nowi eksperymentalisci” nie wypracowali również spójnej koncepcji praktyki teoretycznej oraz związków między tą praktyką a eksperymentem naukowym. Rozważania niektórych przedstawicieli tego kierunku nad powyższymi zagadnieniami, np. A. Franklina i P. Galisona, były prowadzone raczej w „teoretycystycznym” duchu. Wydaje się, że istotnie nowatorskie, w interesującym nas względzie, były poglądy sformułowane przez I. Hackinga w jego książce *Representing and Intervening* [1983, s. 210-219]¹⁴. Proponuje on zastąpienie badań nad zrekonstruowanymi teoriami naukowymi analizami czynności badawczych posiadających teoretyczny charakter. Nauka jest dla niego aktywnością, polegającą na rozwiązywaniu problemów, które powstają przede wszystkim w trakcie praktyki eksperymentalnej nauk empirycznych, choć bardzo często mają teoretyczny charakter. Dlatego do ich rozwiązania niezbędna jest teoretyczna aktywność uczonych, choć – zdaniem Hackinga – w nauce wykonywane są również eksperymenty, które nie posiadają teoretycznego charakteru¹⁵.

Hacking uważa, że prosty dychotomiczny podział aktywności badawczej na teoretyczną i eksperymentalną należy zastąpić podziałem trójczłonowym na: spekulowanie, kalkulowanie i eksperymentowanie. Teoretyzowanie nie jest jakąś jednorodną formą pracy naukowej, ale ulega rozbiciu na szereg fragmentarycznych działań, które można zaliczyć do dwóch podstawowych kategorii: spekulowania i kalkulowania. Ze względu na bardzo ważną rolę pełnioną w praktyce badawczej

¹⁴ Przedstawiając poglądy Hackinga na aktywność teoretyczną uczonych, wykorzystuję ustalenia poczynione w: [Zeidler, 1994, s. 96-103]. Zobacz również [Hacking, 1991].

¹⁵ Hacking polemizuje z rozpowszechnionym wśród zwolenników teoretycyzmu przekonaniem, zgodnie z którym każdy eksperyment jest „obciążony” teoretycznie. Jeśli mieć na uwadze tzw. mocne pojęcie teoretyczności, które zakłada określoną teorię naukową, to w nauce są wykonywane eksperymenty nieteoretyczne. Oczywiście, jeśli pod pojęciem teoretyczności eksperymentu rozumieć aparat pojęciowy niezbędny do jego przeprowadzenia i przedstawienia jego wyników, to wszystkie eksperymenty naukowe są teoretyczne – por. [Hacking, 1983, s. 132-141]. Zobacz również [Sobczyńska, 1993, s. 23-26].

Hacking wyróżnia także modelowanie teoretyczne, które zasadniczo jest rodzajem spekulowania. Istotna w tym kontekście wydaje się uwaga Hackinga, sformułowana w trakcie dyskusji nad realnością elektronów, że „istnieje wiele teorii, modeli przybliżeń, sposobów przedstawiania, formalizmów, metod itd., dotyczących elektronów, lecz nie ma powodu sądzić, że częścią wspólną tych przekonań jest jakakolwiek teoria” [1983, s. 264]. Zauważmy, iż zakres wyróżnionych kategorii nie jest wyraźnie zdefiniowany, a intuicje za nimi stojące autor *Representing and Intervening* przybliża, omawiając teoretyczne rozważania, które były prowadzone nad efektem Faradaya i doprowadziły do jego teoretycznego opisu w aparacie pojęciowym teorii Maxwella oraz fizykalnego wyjaśnienia w ramach teorii elektrodynamicznej Lorentza. Łącznie wyróżnił Hacking sześć poziomów „teorii”, stwierdzając, iż „nie są to jedynie poziomy wielkiej ogólności lub mocy dedukcyjnej, ale raczej różne rodzaje spekulacji” [1983, s. 212]. Spekulacja jest wstępnym etapem działalności teoretycznej, umożliwiającym zrozumienie rozpatrywanych zjawisk w kategoriach jakościowych. Polega ona na wypracowaniu podstawowych pojęć pozwalających na dokonanie opisu danego zjawiska oraz na poszukiwaniu jego modeli. Modelami mogą być zarówno matematyczne reprezentacje zjawiska, jak i różnego typu modele fizyczne. Ostatni poziom spekulacji stanowią próby jego wyjaśnienia na gruncie odpowiednio ogólnej teorii.

Drugim typem aktywności o charakterze teoretycznym jest kalkulacja. Polega ona nie tylko na dokonywaniu obliczeń, ale przede wszystkim na poszukiwaniu rachunku matematycznego, za pomocą którego można jednoznacznie eksplikować wielkości empiryczne, a w konsekwencji obliczać ich wartości. Kalkulacje umożliwiają dopasowanie spekulacji do wyników przeprowadzonych badań eksperymentalnych. „Budują semantyczny pomost pomiędzy teorią a obserwacją” [Hacking, 1983, s. 215]. Zdaniem Hackinga artykulacja badań naukowych, o której mówił T. Kuhn, to w przeważającej mierze kalkulacja obejmująca zarówno artykulację działalności teoretycznej, jak i eksperymentalnej. Natomiast matematyka jest dla niego narzędziem umożliwiającym budowanie modeli badanych zjawisk, eksplikację wielkości pomiarowych i dokonywanie stosownych obliczeń. Zdarza się niekiedy, że uczeni, chcąc rozwiązać jakiś problem, tworzą nowy aparat matematyczny, który w danym momencie może nie posiadać niesprzecznej interpretacji w ramach samej matematyki.

Hacking zauważa, iż w klasycznych rozważaniach prowadzonych w filozofii nauki wyróżnia się teorie, modele i zjawiska. Modele pełnią funkcję pośrednią; są modelami dla zjawisk i dla teorii. Stanowią z jednej strony przybliżoną reprezentację zjawisk, a z drugiej – są konstrukcjami zbudowanymi na bazie matematyki i posiadają na ogół postać matematyczną. Modele teoretyczne umożliwiają ustalenie relacji między teorią a rzeczywistością. Należy dodać, że bardzo często praktyka eksperymentalna nie byłaby możliwa bez posłużenia się modelami teoretycznymi w celu planowania eksperymentów i interpretacji ich rezultatów.

Wprowadzone przez Hackinga kategorie nabierają odmiennych, do pewnego stopnia, konotacji, jeśli zostają użyte do analizy praktyki teoretycznej chemii. Wydaje się nawet, że opis tej praktyki – uzyskany za ich pomocą – jest bardziej przekonujący niż opis praktyki teoretycznej fizyki. Ich zastosowanie wymaga jednakże innego rozłożenia akcentów i wprowadzenia odpowiednich uzupełnień. Ponieważ w chemii na ogół nie można liczyć na objęcie danego zjawiska ogólną teorią wyjaśniającą, dlatego należy poszukiwać dla niego wyjaśnienia przyczynowego. Niezwykle ważną rolę w chemii odgrywa budowanie modeli struktur cząsteczek związków chemicznych, bez których nie można sobie wyobrazić praktyki eksperymentalnej tej dziedziny, a także klasyfikowanie pierwiastków i związków chemicznych, które w istotny sposób wpływa na przewidywalną moc chemii. Dlatego poświęcimy im osobne paragrafy.

3.2. Spekulacja, kalkulacja i wyjaśnianie przyczynowe w chemii

Jedna z szerszych definicji chemii podaje, że jest to nauka, która bada strukturę i skład materii¹⁶. W rozważaniach nad przedmiotem chemii jedni uczeni kładą nacisk na badanie struktury i składu materii, inni – i ci są chyba w większości – na badanie przemian, mając zapewne na uwadze fakt, że głównym praktycznym celem chemii jest uzyskanie nowych związków chemicznych o określonych właściwościach. Praktyka eksperymentalna chemii wiąże się ściśle z obiema dziedzinami, choć badanie składu i struktury substancji chemicznych następuje na ogół po przeprowadzeniu ich analizy bądź syntezy. Działalność eksperymentalna w obu zakresach jest ściśle powiązana z rozważaniami teoretycznymi, bez których właściwie nie mogłaby mieć miejsca. Scharakteryzujemy niektóre elementy tej działalności, odwołując się do pojęć wprowadzonych przez Hackinga, na przykładzie praktyki eksperymentalnej chemika organika, dążącego do syntezy związku chemicznego, który będzie wykazywał określone właściwości chemiczne, a w konsekwencji również i biologiczne, np. określoną aktywność przeciwwirusową.

Gdy chemik organik planuje syntezę jakiegoś związku chemicznego mającego określone właściwości, musi odwołać się do literatury przedmiotu i sprawdzić, jakiego typu struktury chemiczne wykazywały podobne właściwości i w jaki sposób były one uzyskiwane. Wykorzystuje w tym celu specyficzne cechy klasyfikacji związków chemicznych, które będą dokładniej omówione w paragrafie 3.4. Dzięki rozległej wiedzy teoretycznej chemik może przeprowadzić spekulacje zakończone planem syntezy związku docelowego, a następnie – po jej przeprowadzeniu – może zidentyfikować uzyskane produkty i wyjaśnić przebieg reakcji – podać jej mechanizm. Chcąc stwierdzić, jaka wiedza teoretyczna jest w tym celu niezbędna,

¹⁶ Niektóre spotykane w literaturze przedmiotu definicje chemii podają J. van Brakel i H. Vermeeren [1981, s. 1416-1418].

wystarczy sięgnąć po jakiś, odpowiednio obszerny, podręcznik chemii organicznej, np. J. Marcha *Chemia organiczna. Reakcje, mechanizmy, budowa* [1975] lub P. Tomasika *Mechanizmy reakcji organicznych* [1998]. W podręczniku Marcha wiedza ta jest wyłożona w pierwszej jego części i obejmuje: podstawowe informacje o wiązaniach chemicznych sformułowane zarówno na gruncie elektronowej teorii wiązań, jak i molekularnej mechaniki kwantowej, podstawowe wiadomości z zakresu stereochemii, instrumentalne metody określania budowy cząsteczek organicznych, podstawowe typy mechanizmów reakcji i metody ich ustalania, podstawowe wiadomości o kwasach i zasadach Brönsteda oraz Lewisa, wpływ budowy cząsteczek na reaktywność i podstawowe wiadomości o cząsteczkach organicznych, w których wartościowość atomu węgla wynosi tylko dwa lub trzy. Zdaniem autora jest ona niezbędna do tego, aby analizować szczegółowo różnorodne mechanizmy reakcji chemicznych, którym jest poświęcona druga część książki. Należy zauważyć, że wiedza ta nie stanowi żadnej spójnej teorii reaktywności chemicznej. Jest to raczej zbiór podstawowych informacji, z których pewne są – w odpowiedni sposób uproszczonymi – różnymi teoriami chemicznymi (np. koncepcje wiązań chemicznych, teorie kwasów i zasad), inne są uogólnieniami empirycznymi (np. wpływ budowy cząsteczek na reaktywność) albo stanowią opis metod eksperymentalnych (np. instrumentalne metody określania budowy cząsteczek). Wszystkie one mają być pomocne w planowaniu i wykonywaniu eksperymentu oraz interpretowaniu jego rezultatów, a wiele z nich można zapisać jako odpowiednie reguły sterujące praktyką eksperymentalną (np. reguła wiązania reagującego, reguła solwatacji itp.). Jeszcze bardziej praktyczne nastawienie posiada pierwszy rozdział podręcznika P. Tomasika zatytułowany „Ogólne teorie chemii organicznej”. Zawiera on przede wszystkim omówienie podstawowych czynników wpływających na reaktywność chemiczną i to zarówno w ujęciu jakościowym, jak i ilościowym, wraz z tabelami podającymi konkretne wartości liczbowe, np. długości wiązań C-C i C-H w węglowodorach, stałe Hammetta czy wybrane stałe Tafta. W rozdziale tym można również znaleźć, ważne z eksperymentalnego punktu widzenia, klasyfikacje, np. twardych i miękkich kwasów i zasad według Pearsona.

Wprowadzenia teoretyczne obu podręczników nie zawierają więc teorii chemii jako takich, lecz dostarczają eksperymentatorowi aparatu pojęciowego potrzebnego do artykulacji problemu badawczego, umożliwiają „konceptualną” kontrolę przeprowadzanego eksperymentu i interpretację jego rezultatów, a także wprowadzają podstawowy aparat matematyczny potrzebny do kalkulacji. Pełnią one jeszcze jedną ważną rolę. Uczą semiotyki chemicznej, tzn. umiejętności czytania wzorów strukturalnych, kojarzenia struktur określonych cząsteczek z ich właściwościami makroskopowymi oraz ogólnych zasad pisania mechanizmów reakcji, które stanowią podstawowy przedmiot obydwu książek.

Chemicy posługują się dwoma językami: symbolicznym i obrazkowym (ikonicznym). W pisaniu mechanizmów reakcji chemicznych niezwykle ważną rolę

odgrywa język obrazkowy. Mechanizmy z semiotycznego punktu widzenia mogą być potraktowane jako możliwe sposoby przekształcania elementów języka obrazkowego (wzorów strukturalnych). Interpretacja semantyczna języka obrazkowego jest inna niż języka symbolicznego, która może być opisana regułami dobrze znanymi z semantyki logicznej. Wzory strukturalne – elementy języka obrazkowego odnoszą się wprost do swoich przedmiotów, które należy ujmować jako całości, lecz nigdy nie obrazują ich w sposób wyczerpujący¹⁷. Choć wzory strukturalne odnoszą się do przedmiotów mikroświata – reprezentują cząsteczki o określonej strukturze – to wraz z językiem symbolicznym umożliwiają wyciąganie wniosków dotyczących makroskopowych właściwości związków chemicznych. Język obrazkowy pełni więc istotną rolę we wnioskowaniach chemicznych. Natomiast, „aby sprawdzić trafność przewidywań, należy po prostu przełożyć reguły semiotyczne na reguły laboratoryjne” [Schummer, 1999, s. 196].

W ustaleniu mechanizmu reakcji mogą pomóc odpowiednie kalkulacje dokonywane na przykład w kontekście badania kinetyki reakcji. Polegają one na znalezieniu równania szybkości reakcji na podstawie wyników uzyskanych z pomiarów, a następnie na ustaleniu rzędu reakcji względem związków biorących w niej udział i wyznaczeniu stałej szybkości reakcji [Schwetlick, 1975, s. 34]. W obu przypadkach chemik musi zastosować złożone metody rachunkowe. Dokonuje również obliczeń dotyczących termodynamiki przeprowadzonej reakcji, na podstawie których może na przykład wnioskować o trwałości uzyskanych produktów. Przy wyznaczaniu dróg reakcji może także wykorzystać metody chemii kwantowej, obliczając na przykład zmiany energii potencjalnej w trakcie reakcji według założonego schematu. „Uzyskane profile zmian energii potencjalnej pozwalają wybrać jako najbardziej prawdopodobną tę ścieżkę reakcji, w której zmiany energii potencjalnej są najmniejsze” [Tomasik, 1998, s. 75].

Jednakże mechanizmu reakcji nie można nigdy wydedukować z danych empirycznych. Jak zaznaczają autorzy artykułu *Brzytwa Ockhama i chemia*, „mechanizm reakcji jest konstrukcją logiczną opartą z konieczności na ograniczonym zestawie faktów eksperymentalnych, które następnie ludzie interpretują w ramach aktualnych, modnych i efemerycznych modeli teoretycznych” [Hoffmann, Minkin, Carpenter, 1999, s. 24-25]. Na wybór właściwego mechanizmu danej reakcji, jeśli istnieje kilka mechanizmów alternatywnych, mogą wpływać przeświadczenia o charakterze metodologicznym, takie jak np. zasada najmniejszej zmiany, będąca wersją brzytwy Ockhama zastosowaną do analizy mechanizmów reakcji¹⁸.

¹⁷ Powyższe, skrótkowo przedstawione ujęcie semiotyki chemicznej zawiera praca E. Groszholz i R. Hoffmanna [2000, s. 230-247].

¹⁸ Zagadnienie to jest przedmiotem rozważań R. Hoffmanna, V. I. Minkina i B. K. Carpentera [1999, s. 13-44].

Niewątpliwa jest eksplanacyjna i przewidywczą rolę postulowanych mechanizmów reakcji chemicznych. Natomiast przypisanie mechanizmom także funkcji opisowej przesądza o ich realistycznym ujęciu. Zauważyć należy, że doświadczalne badania mechanizmów reakcji pozwalają stwierdzić, czy są one adekwatne empirycznie. Lecz czy z faktu adekwatności empirycznej danego mechanizmu chemik wyciągnie wnioski, że reprezentuje on rzeczywisty przebieg reakcji chemicznej, to już zależy od jego odwagi poznawczej albo od stopnia sceptycyzmu. Jednakże kwestia statusu poznawczego mechanizmów jest zagadnieniem bardzo złożonym i wymaga odrębnej dyskusji¹⁹.

Śledząc praktykę badawczą chemii można łatwo zauważyć, iż znaczącą rolę odgrywają w niej wyjaśnienia przyczynowe. Polegają one na wyjaśnieniu jakiegoś faktu przez odwołanie się do występowania bądź niewystępowania jakiegoś czynnika (warunku), a nie przez odwołanie się do praw ogólnych występujących w teorii. W metodologii i filozofii nauk empirycznych można je analizować na kilka sposobów²⁰. W kontekście eksperymentalnej praktyki badawczej chemii spróbujemy – jak już sygnalizowaliśmy – zastosować ujęcie wyjaśnienia przyczynowego zaproponowane przez N. Cartwright, które współgra z koncepcją przedmiotów teoretycznych I. Hackinga. Jak wiadomo, w ujęciu Hackinga przedmioty teoretyka mogą stać się przedmiotami eksperymentatora jeśli – odwołując się do ich przyczynowych właściwości – będziemy mogli za ich pomocą interweniować w świat, wywołując nowe zjawiska. Cartwright przeciwstawia wyjaśnienie przyczynowe, wcześniej przez nas omówionemu, wyjaśnieniu teoretycznemu. W przypadku wyjaśnienia przyczynowego dąży się do ustalenia właściwej przyczyny lub właściwych przyczyn danego zjawiska. Wyjaśnienia przyczynowe w nauce ze sobą konkurują, tylko jedno jest właściwe. Można wykazać które, przeprowadzając odpowiednie badania eksperymentalne. Cartwright przyjmuje słabsze kryterium istnienia przedmiotów teoretycznych niż Hacking. Wystarczy, jej zdaniem, wykazać, odwołując się do przyczynowych właściwości przedmiotów teoretycznych, że są one odpowiedzialne za zajście danego zjawiska. Żeby jednak posiadać dobrze uzasadnione przekonanie, że dana przyczyna jest właściwa, należy przeprowadzić eksperymenty w kontrolowanych warunkach. Świetnym przykładem takich eksperymentów w chemii są reakcje stereospecyficzne, np. reakcje Dielsa-Aldera. Uzyskanie w wyniku takich reakcji produktów o określonej strukturze stanowi w wielu wypadkach rozstrzygający argument na rzecz tezy, że w reakcji, której mechanizm się ustala, powstaje jako produkt pośredni związek o strukturze, która jest przyczynowo odpowiedzialna za powstawanie produktów końcowych.

¹⁹ Zagadnienie statusu poznawczego mechanizmów reakcji chemicznych w chemii organicznej było przedmiotem rozważań E. Zielonackiej-Lis [1994, s. 483-498].

²⁰ W artykule E. Zielonackiej-Lis [1999, s. 75-88] rozważa się szczegółowo możliwość zastosowania do wyjaśniania w chemii modelu przyczynowo-mechanistycznego W. Salmona.

Wyjaśnianie przyczynowe odgrywa szczególnie ważną rolę wtedy, gdy reakcja nie doprowadziła do przewidywanych produktów. Chemik szuka wówczas przyczyn mogących spowodować zmianę mechanizmu reakcji. Odpowiednio manipulując warunkami reakcji, jest w stanie, choć nie zawsze, znaleźć te przyczyny i zaproponować zupełnie nowy bądź zmodyfikowany mechanizm wyjaśnianej reakcji.

Wydaje się, że nietrafne jest twierdzenie, będące konsekwencją przyjęcia w chemii manipulacyjnego kryterium istnienia I. Hackinga, że tylko reakcje chemiczne, a więc eksperymenty „z” cząsteczkami chemicznymi, stanowią rozstrzygające kryterium ich istnienia. Można wykazać, iż zazwyczaj eksperymenty prowadzone „na” związkach chemicznych są wystarczającą podstawą stwierdzenia istnienia cząsteczek o określonym składzie i strukturze²¹. Znanych jest bowiem wiele metod instrumentalnego określania budowy cząsteczek związków nieorganicznych i organicznych²². Oczywiście, identyfikacja związku na podstawie danych uzyskanych na przykład z pomiarów widma wymaga ich interpretacji, która będzie wiązała odpowiednie pasma widma danego związku z – mówiąc ogólnie – określonym składem i strukturą jego cząsteczek. Znaczenie danych uzyskanych z pomiarów spektroskopowych polega przede wszystkim na tym, że weryfikują one modele teoretyczne struktur cząsteczek związków chemicznych, które odgrywają w spekulacjach chemików rolę trudną do przecenienia.

3.3. Modelowanie teoretyczne w chemii i jego powiązanie z praktyką eksperymentalną

Wydaje się, że jednym z podstawowych typów działalności teoretycznej chemików, którego rezultaty odgrywają bardzo ważną rolę w praktyce eksperymentalnej, jest budowanie modeli. Modele w chemii są konstruowane zazwyczaj na gruncie wielu koncepcji teoretycznych i mają charakter aspektowy. W przypadku modeli struktur związków chemicznych wyjaśniają one własności chemiczne, fizyczne i biologiczne substancji chemicznych oraz umożliwiają planowanie syntez chemicznych, prowadzących do otrzymania nowych związków. To chemicy eksperymentatorzy operują – albo w wyobraźni, albo posługując się komputerem – tymi modelami, gdy rozpatrują możliwe przebiegi reakcji chemicznych. Porównanie

²¹ Do takiego wniosku dochodzą P. Zeidler i D. Sobczyńska [1995/1996, s. 523-525], którzy odwołują się do wprowadzonego przez McKinneya podziału na eksperymentowanie „z” i eksperymentowanie „na”. Eksperymentowanie „z” odpowiada używanemu przez Hackinga „manipulowaniu”, a eksperymentowanie „na” to w chemii wszelkie eksperymenty o charakterze pomiarowym, których celem jest określenie właściwości badanego związku chemicznego. Zobacz także: [McKinney, 1991, s. 295-296].

²² Metody te omawia np. March [1975, s. 149-176].

i analiza przeprowadzonych symulacji wpływa na sposób, w jaki dana synteza została zrealizowana.

Jednakże od co najmniej dwudziestu lat kwestionuje się w chemii teoretycznej postępowanie, polegające na przypisywaniu cząsteczkom związków chemicznych określonej, niezmiennej struktury jako ich immanentnej własności²³. Kluczową rolę w krytyce klasycznych modeli struktur cząsteczek związków chemicznych i w zastąpieniu ich nowymi modelami odegrała skokowa zmiana w metodach eksperymentowania, a mianowicie zastosowanie bardzo czułych metod pomiaru widm spektroskopowych. Mając na uwadze podstawowy cel tej pracy, przedstawię postulaty wyznaczające sposób budowania „sztywnych” modeli struktur cząsteczek chemicznych i podstawowe przyczyny załamania się tego paradygmatu²⁴.

Chemicy w celu określenia kształtu cząsteczki podają na ogół trzy parametry: odległości pomiędzy atomami, kąty pomiędzy wiązaniami i kierunki wiązań, czyli kierunki gradientów gęstości chmur elektronowych wiązania. Dwa pierwsze elementy determinują symetrię szkieletu cząsteczki, natomiast trzeci określa jej własności elektryczne i magnetyczne [Konarski, 1984, s. 622]. Powszechnie akceptowanym, a co najważniejsze – stosowanym modelem budowy cząsteczki jest model sztywny lub semisztywny. Model ten ukonstytuował się na gruncie trzech koncepcji teoretycznych: teorii struktury przestrzennej cząsteczek Butlerowa, Kekulégo i van't Hoffa, elektronowej teorii wiązań chemicznych Lewisa i teorii molekularnej mechaniki falowej. Jednakże reprezentowanie struktury cząsteczek związków chemicznych było już możliwe na gruncie samej teorii przestrzennej budowy cząsteczek, zapoczątkowanej przez Butlerowa i Kekulégo w połowie XIX wieku, a rozwiniętej później przez van't Hoffa. Zgodnie z opinią tego ostatniego teoria struktury związków chemicznych zajmuje się określaniem pozycji poszczególnych atomów w cząsteczce względem siebie w przestrzeni bez uwzględnienia charakteru wiążących je sił²⁵. Teoria ta posiadała więc wyłącznie geometryczny charakter i nie była w stanie opisać na przykład struktur jonowych. Stało się to możliwe dopiero wtedy, gdy powstała teoria wiązań elektronowych Lewisa. Te dwie teorie stanowiły rdzeń klasycznej koncepcji struktury chemicznej, zgodnie z którą struktura jest atrybutem cząsteczki związku chemicznego. Jak już wiemy, klasyczna teoria struktury chemicznej została ujęta w postać systemu dedukcyjnego, na bazie którego można było generować modele dla poszczególnych cząsteczek. Modele te były abstrakcyjnymi strukturami spełniającymi aksjomaty rozważanej teorii, a tym samym mogły być uznane za jej modele semantyczne. Reguły generowania

²³ Jak się wydaje, dyskusję nad tym zagadnieniem zapoczątkował na szeroką skalę artykuł R. G. Woolleya *Must a Molecule Have a Shape?* [1978].

²⁴ Przedstawiając problemy związane z budową modeli struktur cząsteczek związków chemicznych, opieram się na pracach R. Woolleya [1978] i J. Konarskiego [1984, 1994] oraz wykorzystuję ustalenia poczynione w pracy [Zeidler, 1997, s. 61-67].

²⁵ Zobacz [Mulckhuysse 1961, s. 134].

były więc *de facto* regułami dostarczającymi uniwersalnej interpretacji semantycznej dla terminów pierwotnych klasycznej teorii struktury chemicznej. Jednakże reguły te nie wyznaczały w sposób jednoznaczny klasy modeli semantycznych dla tej teorii i umożliwiały konstruowanie modeli pozbawionych sensu empirycznego. Sens empiryczny mają bowiem tylko te modele, które posiadają reprezentację geometryczną. Reguły reprezentacji geometrycznej wprowadzono, posiłkując się odpowiednio rozszerzoną dwuwymiarową geometrią Tarskiego [Mulckhuysse, 1961, s. 142-151]. Za ich pomocą otrzymywano modele struktury przestrzennej cząsteczek konkretnych związków, które posiadały proceduralne interpretacje, określone przez metody eksperymentalnego wyznaczania kształtu cząsteczki. Modele te posiadały również przedmiotowe (wizualne) reprezentacje, zwane modelami Stuarta. Jednakże klasyczna teoria struktury chemicznej uniemożliwiała przypisywanie jednego modelu związkom organicznym, np. benzenowi. Próbowano rozwiązać ten problem, przypisując związkom organicznym kilka struktur, tzw. struktur rezonansowych, lecz już sam ich twórca – Kekulé – traktował struktury rezonansowe czysto instrumentalnie²⁶. Również rozwój metod eksperymentalnych sprawił, że proceduralne reguły wyznaczania kształtu cząsteczek w ramach klasycznej teorii struktury chemicznej nie przypisywały cząsteczkom wielu związków chemicznych jednego modelu. Konieczne stało się przeformułowanie niektórych elementów modelu klasycznego w aparacie pojęciowym mechaniki kwantowej. W jego wyniku powstał model opierający się na kilku podstawowych założeniach (postulatach) teoretycznych. Stany elektronowe cząsteczki są odseparowane od ich stanów rotacyjnych i wibracyjnych. Wszystkie zmiany energetyczne związane z tymi trzema rodzajami stanów są niezależne od siebie i mogą być rozpatrywane oddzielnie. Dla kształtu cząsteczki w tym modelu decydujące znaczenie ma fakt, że niezależnie mierzy się widma rotacyjne od wibracyjnych. Tym samym kształt cząsteczki (długości wiązań, kąty walencyjne, wykonywane drgania) jest stały i niezależny od stopnia pobudzenia rotacyjnego czy wibracyjnego [Konarski, 1994, s. 708-709]. Stany elektronowe cząsteczki „liczy” się w tym modelu, stosując czasowo-niezależne równanie Schrödingera dla indywidualnej cząsteczki o określonej strukturze. W tym ujęciu elektrony są opisywane w pełni na sposób kwantowy, natomiast jądra ujmowane są na sposób *quasi*-klasyczny. Zakłada się konfraktycznie, że są one w spoczynku, i rozwiązuje elektronowe równanie Schrödingera dla ustalonej konfiguracji jąder. Jest to treść, centralnego dla „klasycznej” molekularnej mechaniki kwantowej, przybliżenia Borna-Oppenheimera. Następnie można uwzględnić modyfikacje będące konsekwencją ruchu wykonywanego przez jądra atomów tworzących cząsteczkę²⁷.

²⁶ Zobacz np. [Vermeeren, 1986, s. 273-290].

²⁷ Zobacz np. [Woolley, 1978, s. 1075].

Powyżej zarysowany „klasyczno-kwantowy” model teoretyczny budowy cząsteczki jest testowany za pomocą eksperymentalnych metod określania kształtu cząsteczki. Wśród nich szczególnie ważną rolę pełnią metody spektroskopowe. Należy jednakże zauważyć, iż wielkości uzyskiwane z pomiarów wykonywanych za pomocą tych metod są wielkościami makroskopowymi (np. odległości pomiędzy prążkami widma), a służą do określania wielkości mikroskopowych (np. odległości między atomami). Przy pomiarze wartości tych ostatnich wielkości obowiązuje zasada Heisenberga, która uniemożliwia jednocześnie zmierzenie położenia i skoniugowanego z nim pędu. Nie obowiązuje ona przy wyznaczaniu wartości wielkości makroskopowych. Przykład ten pokazuje, że interpretacja proceduralna modeli teoretycznych może być złożona i napotykać na poważne kłopoty interpretacyjne, gdyż „dane z przestrzeni, w której nie obowiązuje zasada Heisenberga, stosowane są do otrzymania informacji o przestrzeni, w której zasada ta obowiązuje” [Konarski, 1984, s. 623]. Rozważane kwestie stają się bardzo istotne wówczas, gdy rezultaty pomiarów przeprowadzanych w skali makro ingerują w wartości uzyskiwane z modelu teoretycznego. Chcąc wyznaczyć odległości pomiędzy atomami, wykorzystujemy dane otrzymane z widm rotacyjnych na podstawie pomiaru odległości pomiędzy prążkami widma. Jednakże to nie wystarcza, gdyż wyznaczając wartości własne energii poszczególnych stanów rotacyjnych cząsteczki, musimy eksperymentalnie wyznaczyć odległości atomów od osi lokalnego układu. W zależności od zastosowanej w tym celu metody eksperymentalnej uzyskujemy określone w odmienny sposób odległości między atomami. Tak więc jednoznaczna interpretacja tej wielkości za pomocą procedur pomiarowych nie jest możliwa, co sprawia, że kształt cząsteczki wyznaczony z modelu zależy od zastosowanej procedury pomiarowej, gdyż „każda metoda doświadczalna wprowadza swoją transformację danych z przestrzeni mikro do przestrzeni makro” [Konarski, 1984, s. 626]. Nadanie rozważanym modelom lokalnej interpretacji o charakterze proceduralnym, która byłaby interpretacją jednoznaczną, nie jest więc – z powodów zasadniczych – możliwe.

W procesie konstrukcji modeli teoretycznych istotne znaczenie posiada również dokładność dostępnych metod pomiarowych, za pomocą których model jest testowany. To właśnie bardzo dokładne metody pomiaru widm stały się przyczyną kwestionowania poprawności klasycznego modelu struktury cząsteczki związku chemicznego. Można powiedzieć, iż rewolucja dokonała się nie w obszarze teorii, lecz w dokładności rejestracji widm otrzymywanych w podczerwieni i innych zakresach długości fali. Istotne znaczenie miał także rozwój nowych technik związanych z eksperymentalnym określaniem kształtu cząsteczek, np. spektrometrów interferencyjnych. Dokonany skok jakościowy w zakresie badań eksperymentalnych doprowadził do odkrycia nowych faktów, które zmusiły chemików teoretyków do zrewidowania klasycznego modelu budowy cząsteczek i do postawienia kilku pytań o kluczowym znaczeniu dla całej

chemii²⁸. Czy struktura jest wewnętrzną własnością cząsteczki związku chemicznego? Czy model struktury cząsteczki nie jest zależny od problemu, do rozwiązania którego jest on stosowany? Czy wszystkie zjawiska chemiczne związane ze strukturą cząsteczek związku chemicznego można wyprowadzić z modelu teoretycznego tej struktury? Udzielenie negatywnej odpowiedzi na powyższe pytania stawia pod znakiem zapytania możliwość zbudowania modelu teoretycznego struktury cząsteczek związku chemicznego rozumianej jako jej atrybut.

Zanim więc przejdziemy do omówienia przełomu, który dokonuje się w podejściu chemików teoretyków do „sztywnego” modelu struktury chemicznej, zauważmy, że obie wersje (klasyczna i kwantowo-klasyczna) tego modelu spełniają zasadnicze wymagania nałożone na pojęcie modelu teoretycznego przez P. Achinstein [1968, s. 212-218]. Są one zbiorami postulatów opisujących strukturę pewnego typu obiektów (układów) fizycznych, posiadają charakter przybliżony i są zbudowane w aparacie pojęciowym ogólniejszych (podstawowych) teorii. Przy takim rozumieniu modelu teoretycznego można założyć, że modele struktury cząsteczek związków chemicznych obok funkcji wyjaśniającej, przewidzistej, heurystycznej i dydaktycznej pełnią również funkcję reprezentacyjną, gdyż podać model x -a, to podać sposób jego reprezentowania. Choć więc chemicy przyjmujący instrumentalistyczną interpretację modeli struktur cząsteczek związków chemicznych nie należeli do rzadkości, to ich realistyczna interpretacja mogła wydawać się czymś naturalnym. Jeśli jednak kwestionuje się istnienie struktury jako wewnętrznej własności cząsteczki, to podważa się równocześnie możliwość zbudowania modelu teoretycznego reprezentującego budowę cząsteczki o „sztywnej” strukturze.

Prace zmierzające do ukonstytuowania nowego modelu budowy cząsteczki opierają się na odrzuceniu podstawowego założenia modelu klasycznego, mówiącego o separacji stanów wibracyjnych od rotacyjnych, gdyż w wysokorozdzielczym widmie w podczerwieni mierzy się tylko przejścia rowibracyjne. Należy więc mówić o rowibracyjnych stanach cząsteczki, które – jeśli cząsteczka wykonuje drgania o dużej amplitudzie – określają jej kształt. Ruch jąder zależy w dużym stopniu, choć nie jedynie, od stanu elektronowego cząsteczki. Im wyższy poziom energetyczny cząsteczki, tym wyższy stan rowibracyjny, który jest przez nią obsadzany, a ten ostatni ma przecież decydujący wpływ na kształt cząsteczki. W dynamicznym modelu budowy cząsteczki kształt przestaje być jej własnością immanentną. Może się on zmieniać w zależności od stopnia jej energetycznego wzbudzenia. Tym samym struktura cząsteczki jest przynajmniej częściowo zależna od jej oddziaływania z otoczeniem (np. zderzeń z innymi cząsteczkami, wpływu pola elektromagnetycznego i grawitacyjnego). Cząsteczki, którym tradycyjnie

²⁸ Pytania te sformułował S. J. Weininger [1984, s. 939].

przypisywano stałą strukturę, w odpowiednio wysokiej temperaturze zmieniają swój kształt. Na poziomie kwantowo-mechanicznym oznacza to, że opisując sytuację energetyczną cząsteczki, należy zrezygnować z przybliżenia Borna-Oppenheimer'a i stosować czasowo-zależne równanie Schrödingera.

Dynamiczny model budowy cząsteczki jest modelem teoretycznym w innym sensie niż model klasyczny. Nie konstytuują go postulaty teoretyczne określające sposób wyznaczania kształtu cząsteczki, który jest rozumiany jako jej wewnętrzna – niezmienna właściwość. Dynamiczny model jest opracowywany w taki sposób, aby można było wyznaczyć kształt cząsteczki jako pochodny jej stanowi energetycznemu, który zmienia się w czasie i zależy od oddziaływania z otoczeniem. Tym samym pojęcie struktury cząsteczki, a przede wszystkim jej kształtu, traci swój pierwotny sens, stając się metaforą, która nie reprezentuje żadnej określonej i stałej właściwości cząsteczki.

Struktury cząsteczek w ramach modelu dynamicznego nie są więc określone przez zespół postulatów teoretycznych, które można poddać aksjomatyzacji i formalizacji. Reguły generowania ich modeli teoretycznych stają się niezwykle złożone, a mówienie o tych modelach jako o modelach semantycznych traci jakiegokolwiek sens. Dominuje także przekonanie, że nie mogą być one wywiedzione z podstawowych postulatów mechaniki kwantowej²⁹. Zauważmy również, iż posługiwanie się określonym modelem struktury cząsteczki związku chemicznego zależy od rodzaju eksperymentów, do opisu których model ten stosujemy. W odniesieniu do wielu typów eksperymentów chemicznych klasyczny („sztywny”) model struktury chemicznej nadal dobrze spełnia funkcje: eksplanacyjną, przewidywczą i heurystyczną. Natomiast wypełnianie przez ten model funkcji reprezentowania staje pod znakiem zapytania, gdyż struktura, z punktu widzenia modelu dynamicznego, jest własnością cząsteczki uzyskiwaną tylko przy przyjęciu bardzo wielu założeń idealizacyjnych. Wśród samych chemików zaczyna dominować instrumentalistyczno-pragmatyczne podejście do modeli teoretycznych struktury cząsteczek związków chemicznych. Struktura (kształt cząsteczki) „jest to cecha na tyle wygodna, że nie należy z niej zrezygnować, trzeba mieć jednak świadomość, że nie jest ona atrybutem cząsteczki i może ulec modyfikacji przy każdej zmianie stanu energetycznego” [Konarski, 1984, s. 632].

3.4. Klasyfikacja w chemii i jej funkcja przewidzyczna

Z punktu widzenia praktyki eksperymentalnej chemia jest bardziej dyscypliną klasyfikacyjno-opisową niż nomologiczno-wyjaśniającą. J. Schummer proponuje nawet określać chemię „jako klasyfikacyjną naukę o materiałach, posługującą się

²⁹ Problem redukcji teorii struktury chemicznej do chemii kwantowej jest obecnie szeroko dyskutowany; zobacz np. [Weininger, 1984], [Amann, 1992, 1993, 1996] i [Ramsey, 1997].

metodami eksperymentalnymi” [1999, s. 174]. Chemicy, jego zdaniem, dokonują najróżniejszych klasyfikacji, których podstawę stanowią warunki eksperymentalne. Mogą klasyfikować pierwiastki i związki chemiczne (materiały – w terminologii J. Schummera) ze względu na wykazywane przez nie – w określonych warunkach eksperymentalnych – właściwości. Są one wyrażane przez odpowiednie predykaty, które są operacyjnie definiowane przez opisy warunków eksperymentu. Oczywiście, klasyfikowanie jako działanie porządkujące i ewentualnie – w przypadku systematyzacji i typologii – hierarchizujące pewną dziedzinę przedmiotową jest działalnością teoretyczną³⁰. Lecz w przypadku chemii klasyfikacja nie byłaby możliwa bez eksperymentowania, a eksperymentowanie bardzo utrudnione bez klasyfikacji.

Najbardziej znaną klasyfikacją w chemii, której poświęcono wiele analiz metodologicznych, jest układ okresowy pierwiastków, u podstaw którego leży prawo okresowości Mendelejewa. Analizy metodologiczne tego prawa zmierzają do wykazania, że jest ono *sensu stricto* chemiczne, a układ okresowy nie może być zredukowany do „teorii atomowej”, jak twierdzą niektórzy fizycy i metodolodzy³¹. Okresowość w chemii tym odróżnia się od okresowości w fizyce, że posiada charakter aproksymacyjny. Do tej samej klasy podziału (grupy) należą pierwiastki podobne, lecz nie identyczne pod względem właściwości stanowiących podstawę ich wyróżnienia. Jednakże najistotniejszą z metodologicznego punktu widzenia cechą klasyfikacji występujących w chemii jest ich znaczna moc przewidywczą, która z punktu widzenia paradygmatu teoretyczystycznego powinna przysługiwać przede wszystkim teoriom ujętym w postać systemów dedukcyjnych. Jest to niewątpliwie jedna z najbardziej specyficznych metodologicznych właściwości chemii, niezwykle przydatna w praktyce eksperymentalnej. Jej empiryczne i teoretyczne podstawy oraz przykłady praktycznego stosowania klasyfikacji w celu predykcji zostały omówione przez J. Schummera [1999, s. 194-196]. Szczególnie istotne jest zwrócenie uwagi na fakt, że wykorzystanie różnych klasyfikacji w celu przewidywania nowych związków chemicznych jest możliwe dzięki wspomnianemu już chemicznemu systemowi semiotycznemu, który umożliwia zapisywanie wzorów strukturalnych i mechanizmów reakcji. Istotne jest również to, że można przełożyć reguły semiotyczne na reguły laboratoryjne [Schummer, 1999, s. 193]. Reguły te pozwalają chemikom przekonać się, czy przedmiot teoretyczny, którego istnienie przewiduje jakaś klasyfikacja, stanie się przedmiotem eksperymentatora; czy stosując

³⁰ Zdaniem D. Shapere’a najważniejsze są porządkujące właściwości układu okresowego pierwiastków [1977, s. 534-542].

³¹ Zagadnienie to analizują Scerri i McIntyre [1997, s. 223], wskazując zarazem, że nie wiadomo, co dokładnie należy rozumieć pod sformułowaniem „teoria atomistyczna”. Autorzy piszą: „Prawa okresowości nie można wyrazić za pomocą prostej zależności numerycznej, a regularności przez to prawo obejmowane nie mogą być wyrażone w formie nomologicznej za pomocą niechemicznych pojęć”.

manipulacyjne kryterium istnienia I. Hackinga w jego zmodyfikowanej na użytek chemii postaci, będziemy mogli stwierdzić, że przedmiot ten rzeczywiście istnieje³². Klasyfikowanie w chemii nie dotyczy zresztą wyłącznie związków chemicznych, lecz również reakcji chemicznych. Reguły semiotyczne pozwalają wyróżnić wiele typów mechanizmów, które reprezentują całe klasy reakcji. Dzięki tym klasyfikacjom można zarówno prognozować zajście określonych przemian chemicznych, jak i próbować wyjaśnić przemiany, które się już dokonały.

W konkluzji tej części artykułu można postawić tezę, iż chemicy, posługując się wiedzą teoretyczną, mogą w sposób racjonalny kierować swoją pracą w laboratorium, a wiedza ta może być ujęta jako zespół reguł sterujących ich eksperymentalną praktyką badawczą.

4. Zakończenie – chemia jako nauka o wyróżnionym statusie metodologicznym

W literaturze z zakresu filozofii i metodologii nauk wymienia się kilka właściwości, które mogą stanowić wyróżniki nauki empirycznej. Zalicza się do nich zazwyczaj: specyficzną klasę problemów badawczych, specyficzne procedury eksperymentalne, specyficzną klasę kluczowych pojęć³³. Jednakże rozważania tego artykułu nie zmierzały do przedstawienia tych właściwości chemii, które wyróżniają ją jako naukę empiryczną, lecz do wykazania, że właśnie ze względu na posiadanie tych właściwości chemia pod względem metodologicznym różni się w sposób zasadniczy od fizyki. Ze względu na wyraźne fiasko programu redukcjonistycznego oraz niespełnianie przez koncepcje teoretyczne chemii standardów teoretyczystycznego paradygmatu, trzeba zrezygnować z określenia chemii jako nauki fizycznej, którą charakteryzuje niższy niż fizykę stopień dedukcyjnego usystematyzowania i zmatematyzowania. Gdy spojrzeć na chemię od strony praktyki eksperymentalnej i uwzględni fakt, że jej podstawowym celem jest otrzymywanie nowych związków, to okaże się, że choć różnego rodzaju działania o charakterze teoretycznym odgrywają w chemii ważną rolę, to nie mogą one w sposób decydujący określać metodologicznej specyfiki chemii jako nauki³⁴. Wydaje się także, iż zbyt wąskie – a tym samym nieadekwatne – jest proponowane przez J. Schummera

³² Kwestia stosowania manipulacyjnego kryterium istnienia w chemii była szczegółowo dyskutowana przez P. Zeidlera i D. Sobczyńską [1995/1996, s. 517-535].

³³ Zobacz np. [Del Re, 1996, s. 14].

³⁴ Status chemii jako nauki był przedmiotem rozważań Stefana Zameckiego [1978, s. 150-161]. Autor opowiedział się przeciwko próbom zaliczania chemii bądź to do nauk praktycznych, bądź teoretycznych, wskazując, że oba elementy – eksperymentalny i teoretyczny konstituują praktykę badawczą chemii.

określenie chemii jako klasyfikacyjnej nauki o materiałach, stosującej metody eksperymentalne, gdyż niewystarczająco uwypukla ono aktywną stronę praktyki badawczej chemii, która polega przede wszystkim na interweniowaniu w świat, a dopiero w drugiej kolejności na jego reprezentowaniu. Dlatego metodologiczna analiza chemii powinna być przede wszystkim analizą czynności badawczych, a nie ich wytworów. Takie „czynnościowe” podejście do nauki, polegające na odtwarzaniu reguł metodologicznych sterujących praktyką eksperymentalną, jest jednak znacznie trudniejsze i nie doprowadziło do tej pory do koncepcji, które można by określić mianem paradygmatycznych. Niewątpliwie znaczący krok w tym kierunku został uczyniony przez „nowych eksperymentalistów”. Dalsze prace nad zastosowaniem proponowanego przez nich aparatu pojęciowego do opisu praktyki eksperymentalnej chemii mogą wzmocnić przekonanie o wyróżnionym statusie metodologicznym chemii jako nauki eksperymentalnej.

V

O redukcji chemii do fizyki, czyli o pewnym przesądzie filozoficznej refleksji nad nauką

1. Wstęp

Przekonanie o możliwości redukcji chemii do fizyki jest tak silnie ugruntowane w tradycji nauk fizykalnych i rozpropagowane przez neopozytywistyczną filozofię nauki, że nawet filozofowie krytycznie nastawieni do obiegowych opinii nie podawali go zazwyczaj w wątpliwość. K Popper twierdził, iż „mamy tu [w przypadku redukcji chemii do fizyki – P.Z.] autentyczny paradygmatyczny przypadek ‘redukcji’. Przez redukcję mam na myśli oczywiście to, że wszystkie wyniki chemii można w pełni wyjaśnić za pomocą zasad fizyki (to znaczy z nich wydedukować)” [Popper, 1992, s. 370]. Możliwość dokonania takiej redukcji posiada uzasadnienie ontologiczne, gdyż, zdaniem Poppera, „nie zachodzi wielka różnica w rodzajach rzeczy, o których mówią” [Popper, 1992, s. 370]. Dla autora *Wiedzy obiektywnej* proces redukcji miał również walor dydaktyczny, gdyż próbując jej dokonać, uczymy się rozumieć i wyjaśniać teorię redukowaną (chemię) oraz lepiej poznajemy moc wyjaśniającą teorii redukującej (fizyki)¹.

¹ Zobacz [Popper, 1992, s. 375]. Należy jednak zaznaczyć, że cytowany autor zachował w rozważanej kwestii pewną dozę ostrożności, stwierdzając, iż „jest do pomyślenia, choć nie jest całkiem pewne, że redukcja chemii do fizyki zakończy się całkowitym sukcesem” [Popper, 1992, s. 375]. We wcześniejszych swoich pracach Popper był jeszcze bardziej sceptyczny w tym względzie, stwierdzając, iż „zarówno kosmologia, jak i kosmogonia [dyscypliny te miały w ujęciu Poppera stanowić konieczny kontekst udanej redukcji chemii do fizyki – P.Z.], choć stanowią niezwykle fascynujące dziedziny fizyki i chociaż stają się coraz lepiej testowalne, nadal są jedynie przypadkami granicznymi nauki fizycznej i nie są dostatecznie dojrzałe, aby stanowić podstawę do redukcji chemii do fizyki. Jest to jedna z przyczyn, dla których tak zwaną redukcję chemii do fizyki uważam za niezupełną i nieco problematyczną, choć oczywiście zyczliwie spoglądam na wszystkie postawione przez nią problemy” [Popper, 1996, s. 175-176].

Terminologia, jaką posługiwał się Popper, wskazuje, że redukcja chemii do fizyki miała dotyczyć praw oraz teorii i polegać na wyprowadzeniu dedukcyjnym praw teorii redukowanej z praw teorii redukującej i pewnych założeń dodatkowych². Posiadała więc ona wymiar epistemologiczny, choć oczywiście Popper zakładał, że zachodzi również na poziomie ontologicznym. W „klasycznych” już rozważaniach nad redukcją, prowadzonych przez E. Nagla, P. Oppenheima i J. G. Kemeny’ego, poddawano szczegółowym analizom metodologicznym przede wszystkim jej epistemologiczne sformułowanie. Niewątpliwie wpłynęło na to ściśle powiązanie zagadnienia redukcji z nomologiczno-dedukcyjnym modelem wyjaśniania, a paradygmatyczny przykład w tym zakresie stanowiła redukcja termodynamiki fenomenologicznej do mechaniki statystycznej. Choć próby wykazania, że zachodzi epistemologiczna redukcja chemii do fizyki, napotykały na poważne trudności, to twierdzono, „że redukcja różnych działów chemii do kwantowej teorii budowy atomu czyni stałe, chociaż powolne postępy i tylko olbrzymie trudności matematycznej natury związane z przeprowadzeniem odpowiednich wnioskowań dedukcyjnych na podstawie postulatów teorii kwantowej stanowią – jak się zdaje – przeszkodę w posuwaniu się naprzód tej pracy” [Nagel, 1970, s. 318]. Jednakże trudności, o których wspomina Nagel, mają bardziej podstawowy charakter i sprawiają, że filozofowie nauki, którzy wnikliwie analizują zagadnienie redukcji chemii do fizyki rezygnują z jej sformułowania epistemologicznego na rzecz ujęcia ontologicznego. Jednakże redukcja ontologiczna jest definiowana w literaturze przedmiotu na wiele – na ogół nierównoważnych – sposobów. Zazwyczaj wiąże się ją z wyróżnianiem szeregu stopni złożoności materii i założeniem, że właściwości bytów występujących na poziomie wyższym można opisać za pomocą aparatu pojęciowego służącego do opisu bytów z niższego poziomu. Szczególnie ważna – z perspektywy chemii – jest mikroredukcja, która zakłada możliwość opisania własności układów złożonych (molekuł) w kategoriach pojęciowych stosowanych do opisu ich części składowych (atomów) przy założeniu zachodzenia pomiędzy nimi określonych relacji prowadzących do utworzenia struktury. Należy zauważyć, że mikroredukcjonizm może zostać sformułowany jako stanowisko epistemologiczne, jeśli założy się możliwość redukcji teorii opisującej układy złożone do teorii opisującej jej części oraz dodatkowych założeń, lecz wtedy staje się on stanowiskiem zbyt mocnym, które przynajmniej w odniesieniu do mikroredukcji układów chemicznych do atomów nie znajduje uzasadnienia. Stanowiskiem, które jest niewątpliwie, choć na ogół *implicite*, zakładane przez bardzo wielu chemików, jest słaby redukcjonizm ontologiczny, który należałoby raczej określić mianem fizykalizmu. Nie jest to jednak ten typ fizykalizmu, który wiązałby się z redukcją

² Ze względu na ograniczone ramy tego opracowania nie referuję różnych koncepcji redukcji. Zobacz na ten temat np. [Nagel, 1970, s. 294-343], [Krajewski, 1974, s. 7-35] lub [Strawiński, 1997, s. 107-203].

pojęciową chemii do fizyki, nawet przy założeniu, że podstawowym językiem opisu zjawisk chemicznych jest język mechaniki kwantowej. Chemicy i filozofowie chemii pozostają bowiem sceptyczni w kwestii możliwości sformułowania adekwatnych – przynajmniej z punktu widzenia praktyki eksperymentalnej chemii – definicji wielu kluczowych pojęć tej dyscypliny. Zagadnienia te zostaną rozważone bardziej szczegółowo w kolejnych paragrafach tego artykułu. Na zakończenie tych wstępnych uwag odnotujmy, iż redukcjonistyczna ideologia była niewątpliwie współodpowiedzialna za to, że do końca lat osiemdziesiątych XX wieku nie wykształciła się filozofia chemii jako osobny dział refleksji filozoficznej nad nauką.

2. O mechanicyzmie w chemii oraz o statusie metodologicznym chemii kwantowej

Jedną z tezę, którą zamierzam rozważyć w tym artykule, głosi, że nie można wskazać na żadną, w pełni udaną, egzemplifikację redukcji epistemologicznej teorii chemicznej do teorii fizycznej. Jest bowiem więcej niż wątpliwe, czy w chemii w ogóle buduje się teorie w takim samym sensie jak w fizyce i czy formułuje się w niej prawa ściśle ogólne. Niektórzy są nawet skłonni twierdzić, że jest mało prawdopodobne, aby redukcja epistemologiczna chemii do fizyki kiedykolwiek mogła się dokonać, gdyż status metodologiczny chemii jest zasadniczo odmienny od statusu metodologicznego fizyki³.

Jeśli zgodzić się z powyższą tezą, to należy stwierdzić, że możliwość redukcji epistemologicznej chemii do fizyki nie znajduje uzasadnienia, gdyż nie mogą zostać spełnione warunki, które nakłada się na ten rodzaj redukcji. Zauważmy również, że model redukcji epistemologicznej, opierający się na relacji wynikania logicznego, napotyka na wiele innych trudności, wynikających chociażby z idealizacyjnego charakteru licznych praw, które mogą należeć zarówno do teorii redukowanej, jak i do teorii redukującej. Trudności te występują nawet wtedy, gdy rozważa się teorie z tej samej dziedziny (np. fizyki), a potęgują się wtedy, gdy należą one do różnych dziedzin⁴.

Jednakże przyjęcie krytycznego stanowiska względem tezy o możliwości redukcji epistemologicznej chemii do fizyki wymaga dokładniejszej analizy najważniejszych prób dokonania takiej redukcji, a mianowicie redukcji do mechaniki klasycznej, a przede wszystkim redukcji do mechaniki kwantowej uznawanej

³ Powyższą tezę uzasadniłem szczegółowo w artykule *O teoretyczności chemii – studium metodologiczne* [Zeidler, 1999, s. 45-73] zamieszczonym również w niniejszym tomie.

⁴ Trudności tego typu, w odniesieniu do „implikacyjnej” postaci relacji korespondencji w fizyce, omówił szczegółowo J. Such [1974, s. 68-83].

dość powszechnie za podstawę teoretyczną współczesnej chemii. Rozważmy bliżej te dwie – jakoby udane – realizacje redukcji chemii do fizyki.

Program mechanicyzmu w chemii był szczegółowo analizowany przez A. Synowieckiego [1974, s. 91-143]. Autor ten wykazał, że wpływ doktryny mechanicyzmu na chemię był bardzo ograniczony, a predykat „...jest koncepcją mechanistyczną” w odniesieniu do chemii powinien być definiowany za pomocą definicji cząstkowej przez dwa predykaty. Jeden z nich określa typ postulowanej przez daną teorię ontologii i ma albo postać „...traktuje swoją dziedzinę jako agregat cząstek substancjalnych” (ontologia somatyzmu), albo „...traktuje tę dziedzinę jako zespół izolowanych zdarzeń” (ontologia ewentystyczna). Natomiast drugi predykat stwierdza, że dana koncepcja „...jest interpretowana w kategoriach mechaniki klasycznej” [Synowiecki, 1974, s. 97-98]. Mechanicyzm w chemii nie był więc redukcjonizmem typu epistemologicznego, gdyż nie polegał na wyprowadzaniu praw chemii z praw mechaniki, lecz raczej na nadawaniu interpretacji mechanicznej pewnym koncepcjom chemicznym lub fragmentom tych koncepcji. Dotyczyło to niektórych teorii strukturalnych, np. teorii wiązań oscylujących Kekulégo, teorii wiązań podwójnych w pierścieniu benzenu lub modelu drobin Loschmidta. W drugiej połowie XIX wieku próbowano również formułować mechanistyczne interpretacje kinetyki chemicznej. Badania te doprowadziły do sformułowania prawa działania mas oraz do wykorzystania na szeroką skalę mechaniki statystycznej⁵. Mechanicyzm w chemii był więc raczej typem redukcji pojęciowej, w której – po przyjęciu określonych rozstrzygnięć ontologicznych – dążyło się do zdefiniowania pojęć z zakresu chemii za pomocą pojęć znanych z mechaniki. Badacze tego zagadnienia wykazują, że tak pojęty mechanicyzm był w chemii doktryną wpływową jedynie w drugiej połowie XIX wieku, choć i wtedy jego sukces należy uznać za bardzo ograniczony. Program ten wyczerpał się ostatecznie na początku XX wieku wraz z powstaniem i dynamicznym rozwojem mechaniki kwantowej. Z metodologicznego punktu widzenia istotny jest jedynie fakt, że eksplikacja pewnych koncepcji chemii w aparacie pojęciowym mechaniki klasycznej umożliwiała przyczynowe wyjaśnianie niektórych zjawisk chemicznych.

Program redukcji chemii do fizyki został na nowo podjęty wraz z powstaniem mechaniki kwantowej. Zastosowanie aparatu mechaniki kwantowej do opisu molekuł było, w świetle ontologicznego powiązania fizyki atomowej i chemii, której rozważania odnoszą się do cząsteczek, czymś naturalnym. Przyjmowano bowiem, że właściwości systemu złożonego mogą być określone na podstawie właściwości jego elementów składowych lub zakładano, w słabszej wersji programu redukcji, że skoro mechanika kwantowa okazała się efektywnym narzędziem teoretycznego badania zjawisk z zakresu fizyki atomowej, to powinna być również takim narzędziem w odniesieniu do molekuł. U podstawy tego przekonania leżało założenie

⁵ Zobacz [Synowiecki, 1974, s. 91-143].

mówiące o zupełności mechaniki kwantowej. Na teorię fizyczną, która miałaby być uznana za zupełną, nakłada się na ogół dwa warunki: a) autonomiczności i b) uniwersalności [Hendry, 1999, s. 7]. Warunek autonomiczności oznacza, że prawa danej teorii oraz wyjaśniania dokonywane w jej ramach nie odwołują się do praw i kategorii pojęciowych innych teorii. Twierdzi się, że jedyną w pełni autonomiczną teorią fizyczną jest mechanika kwantowa, gdyż jej prawa są wolne od warunków *ceteris paribus*, które wyrażone są w języku innych teorii. Jak wykażemy w kolejnym paragrafie, właśnie molekularna mechanika kwantowa wykorzystywana w celu budowy modeli molekularnych napotyka w tym względzie na poważne trudności. Natomiast dana teoria jest uniwersalna wtedy, gdy jej prawa odnoszą się do wszystkich rzeczywistych przedmiotów i zjawisk, lecz nie determinują całej naszej wiedzy na ich temat [Hendry, 1999, s. 7]. Nie ulega wątpliwości, że części (w sensie mereologicznym) układów chemicznych (atomy, elektrony itp.) są badane przez fizykę, lecz nie znaczy to, że w układach chemicznych (przede wszystkim cząsteczkach) nie zmieniają one swoich właściwości i nie powinny być analizowane z chemicznego punktu widzenia.

Wiadomo również, iż stosowanie aparatu pojęciowego mechaniki kwantowej do rozwiązywania problemów molekularnych wymaga wprowadzenia szeregu przybliżeń, a dla dużych cząsteczek trzeba stosować metody semiempiryczne. W metodach tych, w celu uproszczenia obliczeń, wartości niektórych parametrów otrzymywane są na drodze eksperymentalnej. Wybór danej metody dyktowany jest względami praktycznymi. „Jeśli tylko wiadomo, że dana metoda odtwarza poprawnie i systematycznie dostatecznie dużo faktów doświadczalnych i ma pewne walory diagnostyczne, tzn. pozwala na przewidywanie określonych cech układu, celowe jest wówczas jej akceptowanie i posługiwanie się nią w badaniach” [Sadlej, 1977, s. 62].

Zauważmy również, iż dwie podstawowe teorie molekularnej mechaniki kwantowej: teoria wiązań walencyjnych oraz teoria orbitali molekularnych, były do pewnego stopnia teoriami konkurencyjnymi. Teorie te są często w literaturze przedmiotu nazywane metodami, gdyż są – opartymi na odmiennych zasadach – przybliżonymi sposobami rozwiązywania elektronowego równania falowego Schrödingera dla cząsteczek. W metodzie orbitali molekularnych cząsteczka jest rozpatrywana jako całość, dla której formułuje się równanie Schrödingera. Orbitale molekularne konstruowane w tej metodzie rozciągają się na całą cząsteczkę i różnią się tym od orbitali atomowych, że są wielocentrowe, tzn. że każdy z nich opisuje stan elektronu poruszającego się w polu wszystkich jąder, które wchodzi w skład cząsteczki [Kołos, 1975, s. 106]. Natomiast metoda wiązań walencyjnych opiera się na założeniu, że zakres stosowalności funkcji falowych, opisujących rozdzielone atomy, może zostać rozszerzony na obszar molekularny [Coulson, 1976, s. 41]. W metodzie tej funkcję falową zapisuje się dla każdej z możliwych struktur elektronowych cząsteczki, a sumaryczną funkcję otrzymuje się przez dodanie funkcji

przypisanych poszczególnym strukturom kanonicznym wraz ze współczynnikami wagowymi. Te odmienne metody konstruowania funkcji falowych dla cząsteczek prowadzą często do różnych wyników, gdy stosuje się je do rozwiązywania tych samych problemów⁶.

Podstawowa trudność, związana z użyciem metod molekularnej mechaniki kwantowej, polega jednakże na tym, że nie dają one jednoznacznej kwantowo-mechanicznej reprezentacji podstawowych pojęć chemii takich jak np. pojęcie wiązania chemicznego. Można, jak proponują Scerri i McIntyre, wyróżnić dwa rodzaje redukcji: „ilościową” i „konceptualną” [1997, s. 218 i n.]. Dla prostych cząsteczek zachodzi daleko idąca zgodność między wynikami uzyskanymi z obliczeń a wynikami uzyskanymi z pomiarów, lecz te obliczenia nie konstytuują żadnego pojęcia wiązania chemicznego. Scerri i McIntyre dochodzą do przekonania, że na najbardziej podstawowym kwantowo-mechanicznym poziomie orbitale elektronowe są ontologicznie redundantne i pozostają jedynie eksplanacyjnie użytecznymi fikcjami [1997, s. 220]. Zdaniem tych autorów redukcja konceptualna nie jest możliwa, gdyż pojęcie wiązania może być sformułowane jedynie na poziomie chemicznym i odnosi się do właściwości specyficznie chemicznych, które nie mogą być scharakteryzowane za pomocą właściwości fizycznych. Próbuje się wprawdzie definiować na gruncie molekularnej mechaniki kwantowej na przykład pojęcie wiązania kowalencyjnego, lecz nawet w oparciu o metodę wiązań walencyjnych można podać dwie jego odmienne definicje, nie wspominając już o tym, że odmienną definicję formułuje się na gruncie metody orbitali molekularnych. Podobnego zdania, co Scerri i McIntyre jest wielu chemików praktyków. Takie pojęcia, jak: aromatyczność, kwasowość, zasadowość, pojęcie grupy funkcyjnej, efekt podstawnika nie mogą zostać zmatematyzowane ani jednoznacznie zdefiniowane [Hoffmann, 1995]. Ich sens, z perspektywy praktyki badawczej chemii, nie może zostać oddany ani w ramach redukcji epistemologicznej, ani nawet redukcji konceptualnej. Konstytuuje go bowiem sama laboratoryjna praktyka badawcza. Ten aspekt tworzenia się sensów pojęć używanych w chemii nie jest uwzględniany – i chyba nie sposób go uwzględnić – w trakcie formalno-logicznych rozważań prowadzonych nad zagadnieniem redukcji.

Za J. Weiningerem [1984, s. 942-943] można wyróżnić trzy grupy chemików w zależności od odpowiedzi, jakiej skłonni byliby udzielić na pytanie: „Czy klasyczna chemia może być zredukowana do mechaniki kwantowej (chemii kwantowej)?”. Oczywiście, jest to podział chemików ze względu na ich przekonania, a nie ze względu na stan faktyczny.

Pierwszą grupę stanowią ci chemicy, którzy uważają, że mechanika kwantowa może w zadowalający sposób opisać „klasyczne” właściwości cząsteczek, choć

⁶ Obie metody molekularnej mechaniki kwantowej porównałem szerzej w: [Zeidler, 1995, s. 181-186].

często różnią się oni opinią, który ze znanych formalizmów jest w tym celu najlepszy. Do drugiej grupy należą ci, którzy zaprzeczają, iż struktura cząsteczki może być, w zasadzie, wyprowadzona z mechaniki kwantowej. Wreszcie do grupy trzeciej należą – zdaniem Weiningera – chemicy, którzy podstawowy problem widzą w niezupełności mechaniki kwantowej. Sądzą oni, że zasadnicze przekształcenie mechaniki kwantowej, do którego dojdzie w wyniku wprowadzenia parametrów ukrytych, rozwiąże problemy związane z wyprowadzeniem pojęć chemii klasycznej z mechaniki kwantowej. Po piętnastu latach, jakie upłynęły od chwili opublikowania artykułu Weiningera, można stwierdzić, że coraz więcej chemików zalicza się do grupy drugiej. Dla antyredukcjonisty świadczy to o tym, że przynajmniej wśród chemików zanika redukcjonistyczny przesąd.

Trudności, na jakie napotyka zwolennik redukcji epistemologicznej w przypadku próby opisanie struktury (kształtu) cząsteczek w aparacie pojęciowym mechaniki kwantowej, będą przedmiotem bardziej szczegółowych rozważań zawartych w kolejnych dwóch paragrafach.

3. O mikroredukcji chemii do fizyki na przykładzie budowania modeli struktur cząsteczek związków chemicznych

Twierdzi się, że jednym z najlepszych przykładów mikroredukcji jest redukcja teorii molekuł do teorii atomów. Teoria molekuł, czyli teoria budowy cząsteczek, jest teorią redukowaną (teorią całości – T_2), a teoria atomów jest teorią redukującą (teorią części – T_1). Z perspektywy ontologicznej redukcja ta dotyczy sąsiadujących ze sobą poziomów redukcyjnych. W literaturze przedmiotu wyróżnia się dwa podejścia do zagadnienia mikroredukcji [Strawiński, 1997, s. 154]. W jednym „dodatkowe, strukturalne i pomostowe założenia redukcji wprowadzone są niezależne od tych teorii [teorii redukowanej i redukującej – P.Z.]”, a w drugim „założenia strukturalne – dotyczące sposobów, w jakie elementy uniwersum teorii T_1 [teorii redukującej – P.Z.] wiążą się ze sobą, tworząc pewne całości – wchodzą w skład teorii T_1 ” [Strawiński, 1997, s. 154]⁷. Niewątpliwie, w przypadku prób mikroredukcji struktury molekularnej do teorii atomów mamy do czynienia z podejściem pierwszego rodzaju. Założenia strukturalne o charakterze geometrycznym nie należą do teorii atomów. Nie należy do niej również założenie ustalające rodzaje wiązań pomiędzy atomami w cząsteczce. W tym świetle wypowiedź Michała Tempczyka, przytoczona przez W. Strawińskiego, który stwierdził, że „struktura molekuł S należy do konsekwencji logicznych teorii atomów T_1 ”, jest trudna do

⁷ Próba mikroredukcji praw dotyczących makroskopowych reakcji chemicznych do mikroskopowej teorii atomów i molekuł została podjęta przez R. Causeya [1977].

zaakceptowania [Strawiński, 1997, s. 154]. Powyższe twierdzenie, wyrażające przekonanie, że istotny fragment chemii został zredukowany do fizyki i to w sensie epistemologicznym, napotyka również na wiele innych trudności

Teza powyższa jest zdecydowanie zbyt mocna, nawet jeśli się ją odniesie do stanu badań w zakresie molekularnej mechaniki kwantowej w latach sześćdziesiątych i siedemdziesiątych XX wieku. Natomiast od co najmniej dwudziestu lat jest ona wprost kwestionowana w rozważaniach teoretycznych z zakresu chemii kwantowej⁸. Podważenie możliwości dokonania mikroredukcji struktury chemicznej do teorii atomów było bardzo ważne dla praktyki badawczej chemii z dwóch powodów, wiązało się bowiem z odrzuceniem jednego z dogmatów chemii, który mówił, że struktura jest immanentną właściwością cząsteczki związku chemicznego, a także ukazało istotne ograniczenia molekularnej mechaniki kwantowej. Powyższa kwestia była przedmiotem wielu szczegółowych analiz⁹. Dlatego wskażemy jedynie na konkluzje płynące z tych analiz dla zagadnienia redukcji kształtu cząsteczek.

J. L. Ramsey wyróżnił cztery możliwości interpretowania pojęcia redukcji w odniesieniu do kształtu cząsteczki¹⁰. Redukowalność może oznaczać możliwość opisu kształtu cząsteczki w języku fizyki i w tym sensie, zdaniem Ramseya, kształt cząsteczki nie jest pojęciem redukowalnym do fizyki. Jeśli redukowalność interpretuje się jako możliwość wyjaśnienia za pomocą praw fizyki, to kształt cząsteczki nie jest redukowalny przy założeniu jakiegokolwiek sensu terminu „wyjaśnienie”. Jeśli kształt cząsteczki jest rozpatrywany jako właściwość z innego poziomu rzeczywistości, który jest odseparowany od poziomu fizykalnego, to jest on nieredukowalny przy prawie każdym sposobie rozumienia terminu „redukcja”. I wreszcie jeśli kształt jest rozpatrywany jako właściwość systemu fizykalnego, która nie istnieje niezależnie od pomiarów oraz przyjętej skali czasowej, wówczas przyjmowane jest rozumienie terminu „redukcja”, zgodnie z którym kształt jest aproksymacyjnie, ontologicznie redukowalny [Ramsey, 1997, s. 243]. Odrzucenie redukcjonizmu epistemologicznego i conceptualnego (trzy pierwsze tezy) wiąże się z przekonaniem, że struktura molekularna jest pojęciem z poziomu chemicznego, wyraźnie odseparowanego od poziomu fizycznego, a kształt interpretowany jako „ikona” jest nieredukowalny do mechaniki kwantowej.

Jak wykazał R. G. Woolley [1978] i inni badacze, w niektórych przypadkach – zależnych od warunków, w jakich znajdują się cząsteczki – nie sposób przypisać im jakiegokolwiek struktury przynajmniej tak długo, jak długo kształt cząsteczki

⁸ Kluczowe znaczenie posiada w tym względzie artykuł Woolleya *Must a Molecule Have a Shape?* [1978]. Na ten temat pisali również: [Weininger, 1984] oraz [Amann, 1992, 1993, 1996].

⁹ Zagadnienie to było przedmiotem licznych analiz. Zobacz np. [Woolley, 1978], [Ramsey, 1997], [Konarski, 1984, 1995], [Zeidler, 2000].

¹⁰ Kształt cząsteczki utożsamiamy w tych rozważaniach z jej strukturą molekularną.

uznaje się za jej atrybut. Dlatego sztywny model struktury cząsteczki próbuje się zastąpić modelem dynamicznym [Konarski, 1994, s. 705-717]. Prace zmierzające do ukonstytuowania nowego modelu budowy cząsteczki opierają się na odrzuceniu podstawowego założenia modelu klasycznego, mówiącego o separacji stanów wibracyjnych od rotacyjnych, gdyż w wysokorozdzielczym widmie w podczerwieni mierzy się tylko przejścia rowibracyjne. Należy więc mówić o rowibracyjnych stanach cząsteczki, które – jeśli cząsteczka wykonuje drgania o dużej amplitudzie – określają jej kształt. Ruch jąder zależy w dużym stopniu, choć nie jedynie, od stanu elektronowego cząsteczki. Im wyższy poziom energetyczny cząsteczki, tym wyższy stan rowibracyjny, który jest przez nią obsadzany, a ten ostatni ma przecież decydujący wpływ na kształt cząsteczki. W dynamicznym modelu budowy cząsteczki kształt przestaje być jej własnością immanentną. Może się on zmieniać w zależności od stopnia jej energetycznego wzbudzenia. Tym samym struktura cząsteczki jest przynajmniej częściowo zależna od jej oddziaływania z otoczeniem (np. zderzeń z innymi cząsteczkami, wpływu pola elektromagnetycznego i grawitacyjnego). Cząsteczki, którym tradycyjnie przypisywano stałą strukturę, w odpowiednio wysokiej temperaturze zmieniają swój kształt. Na poziomie kwantowo-mechanicznym oznacza to, że opisując sytuację energetyczną cząsteczki, należy zrezygnować z przybliżenia Borna-Oppenheimera.

Dynamiczny model budowy cząsteczki jest modelem teoretycznym w innym sensie niż model klasyczny. Nie konstytuują go postulaty teoretyczne określające sposób wyznaczania kształtu cząsteczki, który jest rozumiany jako jej wewnętrzna – niezmienna – właściwość. Dynamiczny model jest opracowywany w taki sposób, aby można było wyznaczyć kształt cząsteczki jako pochodny jej stanowi energetycznemu, który zmienia się w czasie i zależy od oddziaływania z otoczeniem. Tym samym pojęcie struktury cząsteczki, a przede wszystkim jej kształtu, traci swój pierwotny sens, stając się metaforą, która nie reprezentuje żadnej określonej i stałej właściwości cząsteczki. Prace nad ukonstytuowaniem modelu dynamicznego wykazują również, że mechanika kwantowa nie jest teorią zupełną w znaczeniu, o którym była mowa w poprzednim paragrafie.

Ostatnia możliwość – wyróżniona przez Ramseya – dotycząca redukcji ontologicznej kształtu cząsteczki, nie budzi wątpliwości, a liczne analizy potwierdziły, że jest to pojęcie zależne od stosowanych technik pomiaru i czasu, w którym dokonuje się obserwacji¹¹. Zagadnienie redukcji ontologicznej chemii do fizyki, a właściwie pewnego typu fizykalizmu, będzie podjęte w skróconej formie w następnym paragrafie. Odwołamy się w tym celu do pojęcia relacji superwencji.

¹¹ Na ten temat zobacz pozycje wyszczególnione w przypisie 9.

4. O relacji superwencji w chemii

Twierdzi się, że D. Davidson był pierwszym, który użył terminu *supervenience* jako nazwy dla relacji zachodzącej pomiędzy zjawiskami psychicznymi a zjawiskami fizycznymi¹². Relacja ta miała określać zależność pomiędzy właściwościami charakteryzującymi procesy psychiczne a właściwościami charakteryzującymi procesy fizyczne wtedy, gdy nie są znane żadne prawa łączące jedne procesy z drugimi i tym samym nie jest z zasady możliwe ustalenie relacji redukcji jednych właściwości do drugich. Miała więc ona wyrażać zależność między stanami fizycznymi a psychicznymi bez zakładania redukcji praw opisujących te drugie do praw charakteryzujących te pierwsze. „Superwencję można rozumieć tak oto, iż nie mogą istnieć dwa zdarzenia identyczne pod wszystkimi względami fizycznymi, ale różniące się pod pewnym względem mentalnym albo też tak, iż przedmiot nie może się zmieniać pod pewnym względem mentalnym, nie podlegając żadnej zmianie fizycznej. Tego rodzaju zależność czy też superwencja nie pociąga za sobą redukowalności przez prawo lub przez definicję” [Davidson, 1980, s. 214]¹³.

W odniesieniu do chemii relacja *superwencji* jest asymetryczną relacją, zgodnie z którą jeśli na przykład cząsteczki posiadają identyczną mikrostrukturę (mają te same właściwości mikroskopowe), to będą miały te same właściwości makroskopowe, lecz nie musi być odwrotnie. Scerri i McIntyre omawiają tę relację na przykładzie właściwości zwanej „zapachem”. Zgodnie z koncepcją relacji superwencji, jeśli dwa związki chemiczne są zbudowane z takich samych cząstek elementarnych w ten sam sposób (posiadają identyczną mikrostrukturę), to będą miały ten sam zapach (te same własności makroskopowe). Jeśli jednak dwa związki wykazują ten sam zapach, to nie znaczy to, że muszą posiadać taką samą strukturę mikroskopową. Tak więc własności z poziomu *makro* nie muszą być wywoływane przez te same struktury z poziomu *mikro*. Autorzy nie udzielają jednak jednoznacznej odpowiedzi na pytanie, czy rzeczywiście zachodzi związek superwencji między chemią i fizyką. Ich zdaniem na to pytanie nie można

¹² Zobacz [Beckermann, 1992, s. 94-117].

¹³ W polskim przekładzie tego artykułu [Davidson, 1992, s. 175] tłumacz oddaje termin angielski „supervenience” przez „pochodność”. Wydaje się jednak, że wprowadzenie nowego polskiego terminu na oznaczenie tej relacji jest zbędne, tym bardziej że w późniejszej literaturze przedmiotu relacja superwencji była wielokrotnie doprecyzowywana i szczególnie dyskutowana. Zobacz np. [Horgan, 1982], [Beckermann, 1992], [Merricks, 1998]. Należy również odnotować, że termin ang. *supervenience* w polskiej edycji *Oksfordzkiego słownika filozoficznego* został oddany za pomocą terminu *superwentyzm* [Blackburn, 1997, s. 382-383]. Sądzę jednakże, iż wprowadzając nową nazwę do języka polskiego i wzorując się na pisowni tej nazwy w języku, w którym po raz pierwszy została ona użyta (angielskim), należy być konsekwentnym w „procedurze” spolszczenia. Dlatego też posługuję się terminem *superwencja*.

odpowiedzieć w ramach ogólnych filozoficznych rozważań, lecz jedynie w oparciu o badanie konkretnych przypadków [Scerri, McIntyre, 1997, s. 224-226].

J. Konarski [1999, s. 143-148] charakteryzuje schematycznie pewną wersję tej relacji w sposób następujący. Na pewnym wyższym poziomie złożoności (nazwijmy go *makro*) badane zjawiska są superpozycją charakterystycznych procesów poziomu *niższego*, a nie ich niezależnym zbiorem ($p_j^{(1)} = \sum p_k^{(2)}$), gdzie $p_j^{(1)}$ jest j -tym procesem na poziomie wyższym, a $p_k^{(2)}$ jest k -tym procesem na poziomie niższym). Lecz poszczególne procesy z poziomu *niższego* mogą składać się na dany proces z poziomu *wyższego* w różnym stopniu, a więc trzeba je uwzględnić z różnymi wagami statystycznymi ($p_j^{(1)} = \sum a_k^{(2)} p_k^{(2)}$), gdzie $a_k^{(2)}$ jest k -tą amplitudą prawdopodobieństwa wystąpienia procesu $p_k^{(2)}$. „Tym samym – pisze Konarski – nie mamy już prostego składania podprocesów w pełne zjawisko, ale pojawiają się silniejsze i słabsze składowe, pojawiają się oddziaływania pomiędzy nimi, ze względu na różne prawdopodobieństwo ich występowania z różnym wpływem na końcowy rezultat” [Konarski, 1999, s. 145]. Takie ujęcie zakłada, że dany stan *makro* może być *realizowany* przez różne stany *mikro*, lecz dwa identyczne stany *mikro* generują tę samą właściwość na poziomie *makro*.

Jednakże wielu autorów wątpi, czy relacja *superwencji* w chemii rzeczywiście zachodzi. Dyskusja dotyczy sposobu rozumienia następującego stwierdzenie mikroredukcjonisty: „jeśli x składa się ze składników C_1, \dots, C_n powiązanych ze sobą relacją R , to znaczy jeśli x posiada mikrostrukturę $[C_1, \dots, C_n; R]$, to x posiada właściwość F ” [Beckermann, 1992, s. 110]. Jest to już jednak spór o samą mikroredukcję. Tak więc utrzymywanie, że zachodzi relacja superwencji pomiędzy mikrostrukturami (strukturami cząsteczek związków chemicznych) a ich makrowłaściwościami (*klasycznymi* właściwościami związków chemicznych), zakłada mikroredukcję tych drugich do tych pierwszych. Możliwość tej ostatniej – zarówno w świetle rozważań poprzedniego paragrafu, jak i bogatej literatury przedmiotu – jest bardzo dyskusyjna. Budowane w molekularnej mechanice kwantowej modele teoretyczne struktur cząsteczek są testowane za pomocą eksperymentalnych metod określania kształtu cząsteczek. Wśród nich szczególnie ważną rolę pełnią metody spektroskopowe. Należy jednakże zauważyć, iż wielkości uzyskiwane z pomiarów wykonywanych za pomocą tych metod są wielkościami makroskopowymi (np. odległości pomiędzy prążkami widma), a służą do określania wielkości mikroskopowych (np. odległości między atomami). Przy pomiarze wartości tych ostatnich wielkości obowiązuje zasada Heisenberga, która uniemożliwia jednoczesne zmierzenie położenia i skoniugowanego z nim pędu. Nie obowiązuje ona przy wyznaczaniu wartości wielkości makroskopowych. Przykład ten pokazuje, że interpretacja modeli struktur molekularnych może być złożona i napotykać na poważne kłopoty interpretacyjne, gdyż „dane z przestrzeni, w której nie obowiązuje zasada Heisenberga, stosowane są do otrzymania informacji o przestrzeni, w której zasada ta obowiązuje” [Konarski, 1984, s. 623]. Należy to mieć na uwadze

przede wszystkim wówczas, gdy rezultaty pomiarów przeprowadzanych w skali *makro* ingerują w wartości uzyskiwane z modelu teoretycznego. Chcąc wyznaczyć odległości pomiędzy atomami, wykorzystujemy dane otrzymane z widm rotacyjnych na podstawie pomiaru odległości pomiędzy prążkami widma. Jednakże to nie wystarcza, gdyż wyznaczając wartości własne energii poszczególnych stanów rotacyjnych cząsteczki, musimy eksperymentalnie wyznaczyć odległości atomów od osi lokalnego układu. W zależności od zastosowanej w tym celu metody eksperymentalnej uzyskujemy określone w odmienny sposób odległości między atomami. Tak więc kształt cząsteczki wyznaczony z modelu zależy od zastosowanej procedury pomiarowej, gdyż „każda metoda doświadczalna wprowadza swoją transformację danych z przestrzeni mikro do przestrzeni makro” [Konarski, 1984, s. 626]. Nadanie rozważanym modelom jednoznacznej interpretacji nie jest więc – z powodów zasadniczych – możliwe. Kształt (struktura) cząsteczki zależy bowiem nie tylko od tworzących ją składników (atomów) i sposobu ich powiązania, lecz również od otoczenia i warunków, w których cząsteczka się znajduje, oraz od wybranej metody pomiaru. Tym samym, choć nie poddaje się w wątpliwość tego, że właściwości atomów w pewnej mierze „determinują” strukturę cząsteczki z nich złożonej, to należy wątpić, czy kiedykolwiek tę determinację będzie można w sposób precyzyjny eksplikować.

5. Wnioski

Wielu współczesnych filozofów chemii dostrzega, że nie tylko redukcja epistemologiczna chemii do fizyki, lecz także ścisły „hierarchiczny” redukcjonizm ontologiczny nie posiada wystarczająco przekonującego uzasadnienia. Chcąc go stosować, trzeba posiadać dokładnie zdefiniowany wyższy poziom złożoności i pełną wiedzę o mechanizmach oddziaływania na *niższym* poziomie. Niewątpliwie najlepsze perspektywy w tym zakresie stwarza mikroredukcja w jej wersji związanej z pojęciem relacji superwencji. Jeśli jednak powrócimy do rozważań relacji zachodzących między wielkościami z poziomu makro (ciśnienie, temperatura itp.) a wielkościami opisującymi poziom mikro (atomy lub cząsteczki), to, jak wiadomo, można powiązać odpowiednie zbiory danych za pomocą średniej statystycznej. W tego typu rozważaniach istotną rolę odgrywa hipoteza ergodyczna, zgodnie z którą średnia po zbiorze i średnia po czasie są sobie równe. Przy założeniu tej hipotezy można przyjąć zasadę redukcjonizmu rozumianą jako zasadę wiążącą zjawiska z poziomów sąsiadujących ze sobą. Jednakże wiele wskazuje na to, że zasada ta nie obowiązuje w licznych procesach dynamicznych, w których „czas *explicite* gra istotną rolę, a więc w zjawiskach chaosu czy procesach zwanych procesami życiowymi” [Konarski, 1999, s. 147]. W takich przypadkach zjawiska na poziomie *wyższym* nie mogą być już powiązane ze zjawiskami zachodzącymi

na poziomie *niższym* ani za pomocą przyporządkowania jedno-jednoznacznego, ani jedno-wieloznacznego¹⁴. Tym samym również teza redukcjonizmu epistemologicznego, która głosi, że wiedza o *wyższych* poziomach może być uzyskana z wiedzy o poziomach *niższych*, jest – w powyższych przypadkach – trudna do obrony. Nie jest na przykład możliwa mikroredukcja takiej dynamicznej właściwości chemicznej, jak reaktywność chemiczna, przez odwołanie się do ustalonej mikrostruktury reagentów bez uwzględnienia oddziaływań elektromagnetycznych [Schummer, 1999, s. 180]. Rzecz jasna żaden chemik nie zaprzeczy, iż przebieg zjawisk z poziomu *wyższego* (molekularnego) jest uwarunkowany przez stan rzeczy na poziomie niższym (atomowym) i w jakimś sensie ograniczony prawami ogólnymi odnoszącymi się do tego poziomu. Jest również faktem bezspornym, że buduje się w chemii bardzo wiele modeli zjawisk z poziomu *wyższego* (makro) w aparacie pojęciowym teorii odnoszących się do poziomu *niższego* (mikro). Lecz sens wielu podstawowych pojęć chemii konstytuuje laboratoryjna praktyka badawcza. Jest to sens specyficznie chemiczny, który nie może być oddany za pomocą definicji sformułowanych w aparacie pojęciowym fizyki. Dlatego też należy zgodzić się z E. R. Scerriem i L. McIntyre’em, którzy twierdzą, że właśnie z tego powodu należy unikać redukcji epistemologicznej chemii do fizyki, choć nie wzbudza ich wątpliwości ontologiczna zależność faktów chemicznych od faktów fizycznych [Scerri, McIntyre, 1997, s. 219-220]. Stanowisko to pozostaje w konflikcie z przekonaniem Poppera, który głosił, że choć realizacja różnych programów redukcjonistycznych napotyka na poważne kłopoty i być może żaden z nich nie zakończy się pełnym sukcesem, to należy popierać redukcjonistyczną metodologię w nauce. Próby dokonania redukcji są bowiem próbami wyjaśnienia tego, co nieznanne, za pomocą tego, co znane, i wpływają korzystnie na rozwój nauki [Popper, 1996, s. 163]. Jednakże również i to przekonanie – podobnie jak przekonanie o rzekomo udanej redukcji chemii do fizyki – należy uznać za przesąd pokutujący już zbyt długo w filozofii nauki. Wyjaśnienie faktów chemicznych w kategoriach pojęciowych dyscypliny bardziej podstawowej (fizyki) wcale nie musi prowadzić do lepszego zrozumienia tych pierwszych. „Czysto” fizykalne eksplikacje wielu pojęć chemii zatracają ich specyficznie chemiczny sens i są nieprzydatne, gdy podejmuje się próby zrozumienia chemicznych procesów. Posługiwanie się nimi mogłoby wpłynąć hamująco na rozwój eksperymentalnej praktyki badawczej chemii.

Przytoczę na zakończenie słowa D. W. Theobalda, który stwierdził: „Obie te nauki [chemia i fizyka – P.Z.] zajmują się właściwościami materii, ale [...] różnice między nimi wystarczają, aby wchłonięcie chemii przez fizykę uczynić simpliciter błędem filozoficznym, który działa na szkodę praktyki chemicznej” [Theobald, 1977, s. 142].

¹⁴ Zagadnienie to omawia między innymi Konarski [1999, s. 146-147].

VI

Homo experimentator a spór o realizm laboratoryjny

1. Wstęp

Nowa faza „starego” sporu realistów z antyrealistami, trwająca od początku lat osiemdziesiątych XX wieku i zapoczątkowana książkami Basa C. van Fraassena [1980], Iana Hackinga [1983] i Nancy Cartwright [1983], znacznie rozszerzyła wachlarz stanowisk zajmowanych w tym sporze. Niektóre z nich są jedynie inaczej sformułowanymi wersjami od dawna znanych stanowisk. Inne posiadają istotnie nowatorski charakter. Do tych ostatnich należą niewątpliwie stanowiska, których opracowanie stało się możliwe wtedy, gdy w sposób zasadniczy zmieniono perspektywę, z której analizuje się naukę. Ich twórcy zastąpili dominujące spojrzenie na naukę z perspektywy jej praktyki teoretycznej – spojrzeniem dokonany z punktu widzenia jej praktyki eksperymentalnej. Zmiana perspektywy miała i ma istotny wpływ na sposób prowadzenia sporu o realizm. Semantyczna płaszczyzna sporu, która odgrywa zasadniczą rolę wtedy, gdy omawiana kontrowersja dotyczy statusu poznawczego wiedzy naukowej, przesuwa się niejako na drugi plan. Z punktu widzenia laboratoryjnej praktyki badawczej istotne stają się rozważania, dotyczące istnienia tych postulowanych przedmiotów teoretycznych, które odgrywają istotną rolę w praktyce eksperymentalnej, oraz rozważania dotyczące statusu poznawczego tych konceptualnych narzędzi poznania naukowego, które umożliwiają eksperymentowanie.

Ian Hacking, czołowy przedstawiciel „nowego eksperymentalizmu”, bo tak nazywa się kierunek, którego reprezentanci nawiązali do tradycji Francisa Bacona, przyjął dualistyczne stanowisko w sporze o realizm. Hacking argumentował, że w odniesieniu do przedmiotów eksperymentatora, którymi mogą być również teoretyczne byty postulowane przez naukę, należy przyjąć postawę realistyczną, o ile

tylko stanowią one skuteczne narzędzie interweniowania w świat. Natomiast teorie naukowe oraz prawa nauki o wysokim stopniu ogólności powinny być interpretowane instrumentalistycznie, gdyż nie pełnią funkcji reprezentowania obiektywnej istniejącej rzeczywistości.

Stanowisko „nowych eksperymentalistów” w sporze o realizm nie było jednak jednolite. Jeden z jego wybitnych przedstawicieli – Allan Franklin – sformułował w swoich wcześniejszych książkach pogląd o wyraźnie antyrealistycznym zabarwieniu, który uzasadniał, odwołując się do założeń metodologii Bayesowskiej. Jednakże w swojej ostatniej książce *Can that Be Right? Essays on Experiment, Evidence, and Science* zmienił stanowisko, przeistaczając się w „całościowego” realistę laboratoryjnego, a więc realistę również w odniesieniu do teorii wykorzystywanych w praktyce eksperymentalnej. Pogląd wyrażony w tej książce wydaje się trudny do obrony w świetle najnowszych dociekań N. Cartwright, M. Morrison i M. S. Morgan nad „narzędziami konceptualnymi” stosowanymi w praktyce badawczej. Ich analiza, a przede wszystkim analiza funkcji, jakie pełnią modele stosowane w praktyce eksperymentalnej, sprawia, że „całościowy” realizm laboratoryjny jest trudny do utrzymania, choć niektóre jego wersje, jak np. realizm R. Gierego, stanowią poważne wyzwanie dla zwolenników opcji dualistycznej. Ci ostatni, nie tylko I. Hacking, ale również N. Cartwright, napotykają między innymi na problem związany z przyjmowanym przez nich niejednorodnym sposobem interpretacji języka nauki. Jest on inny dla języka podstawowych teorii i praw fundamentalnych, a inny dla języka, w którym opisujemy eksperymenty i wyrażamy tzw. prawa fenomenologiczne.

Celem, który przed sobą stawiam, jest nie tylko zaprezentowanie i ocena istotnych argumentów, jakie były wysuwane w sporze o realizm z pozycji badacza eksperymentatora, ale również – ściśle związana z zagadnieniem realizmu – dyskusja problemu interpretacji języka nauki. Będę zmierzał do uzasadnienia przekonania, że eksperymentatorzy muszą dokonywać uprzedmiotowienia pojęć, którymi się posługują, gdyż tylko wtedy „narzędzia konceptualne” przez nich stosowane, np. modele teoretyczne, będą efektywne z punktu widzenia ich praktyki laboratoryjnej. Uprzedmiotowienie, o którym mowa, może być – i często jest – niezależne od interpretacji pojęć występujących w teoriach naukowych i nie musi pociągać za sobą przekonania o ‘realności’ uzyskanych w ten sposób odniesień przedmiotowych. Co więcej, sądzę, że eksperymentatorzy mogą sobie uświadamiać – i często tak się dzieje – że uprzedmiotowienie jest zabiegiem, który prowadzi do wytworzenia rzeczywistości postulowanej. Postawa ta jest więc całkowicie odmienna od mocnego realistycznego przekonania, które jest im zazwyczaj przypisywane, choć rozstrzygnięcie kwestii dotyczących przekonań eksperymentatorów jest przedmiotem badań empirycznych¹.

¹ W niniejszym artykule tytułowy *Homo experimentator* został utożsamiony z badaczem eksperymentatorem.

2. Między skrajnym realizmem naukowym a empirycznym antyrealizmem – stanowisko I. Hackinga i N. Cartwright

Skrajny realizm naukowy wyraża się w twierdzeniu, że możliwym do osiągnięcia celem badań naukowych jest budowanie prawdziwych teorii, a realizacja tego celu uzasadnia przekonanie o istnieniu bytów postulowanych przez te teorie. We współczesnych wersjach powyższego stanowiska zastępuje się możliwość osiągnięcia prawdy dążeniem do prawdy, wyrażanym albo za pomocą różnie definiowanej prawdy aproksymacyjnej, albo wzrastającym podobieństwem do prawdy, podczas gdy składnik ontologiczny tej doktryny nie ulega zmianie. Natomiast stanowisko przeciwstawne, nazywane empirycznym antyrealizmem, zakłada, że teorie są pozbawionymi wartości logicznej narzędziami, służącymi do dedukowania zdań o tym, co obserwowalne. Zwolennicy tego stanowiska zakładają, iż adekwatność empiryczna teorii nie musi pociągać za sobą przekonania o istnieniu przedmiotów nieobserwowalnych postulowanych przez te teorie. Najbardziej znaną współczesną wersją tego poglądu jest empiryzm konstruktywny B. C. van Fraassena. Oba skrajne stanowiska, a także ich liczne osłabione wersje, powstały w rezultacie analizy statusu poznawczego teorii naukowych, które powszechnie uważano za podstawowy przedmiot zainteresowań filozofów nauki. Zmiana perspektywy, której wyrazem jest przekonanie, że badanie nauki powinno się zaczynać od analizy jej praktyki eksperymentalnej, dopomogła w sformułowaniu nowego stanowiska w sporze realizm-antyrealizm, zwanego „realizmem w odniesieniu do przedmiotów nieobserwowalnych”. Użycie cudzysłowu oznacza, że mam na myśli konkretne stanowisko reprezentowane przez Hackinga i Cartwright, a nie jedynie przekonanie o realności przedmiotów, którymi eksperymetatorzy mogą się „posługiwać” w trakcie praktyki laboratoryjnej – przekonanie wyrażane przez wielu filozofów nauki i zdecydowaną większość samych badaczy.

Dualistyczne stanowisko Hackinga i Cartwright w sporze o realizm trudno uznać za reprezentatywne dla przedstawicieli „nowego eksperymentalizmu”, wśród których wiodącą postacią jest pierwszy z wymienionych filozofów nauki². Jest ono jednakże istotne o tyle, że do jego sformułowania przyczyniła się niewątpliwie, wspomniana powyżej, zmiana perspektywy spojrzenia na naukę. Choć wymienieni autorzy różnią się wyraźnie w zakresie aparatury pojęciowej stosowanej przez nich do opisu praktyki badawczej, to można mówić o jednym stanowisku, gdyż podstawowe założenia ich poglądów są wspólne. Ponieważ są one już dość dobrze znane polskim filozofom nauki, więc ograniczę się do omówienia tylko tych elementów ich koncepcji, które są istotne dla prezentacji dalszych etapów dyskusji nad realizmem laboratoryjnym.

² Nancy Cartwright na ogół nie jest zaliczana do przedstawicieli „nowego eksperymentalizmu”.

Dualistyczne stanowisko Hackinga i Cartwright wyraża się w poglądzie, że uzasadnione jest przekonanie o istnieniu przedmiotów, wliczając w to przedmioty nieobserwowalne, które badamy i którymi posługujemy się w praktyce eksperymentalnej, przy równoczesnym odrzuceniu przekonania o prawdziwości podstawowych praw i teorii, opisujących te przedmioty. Odrzucając realistyczną interpretację tych ostatnich, wymienieni autorzy przyjmują, że realistycznej interpretacji wymagają prawa empiryczne „niskiego poziomu”, które Cartwright nazwała prawami fenomenologicznymi i które nie są, jej zdaniem, wprost wyprowadzalne z teorii podstawowych. Z punktu widzenia praktyki eksperymentalnej zasadnicze znacznie odgrywają właśnie te prawa, które wyrażają związki przyczynowe, zachodzące pomiędzy obserwowalnymi, jak i nieobserwowalnymi przedmiotami i wielkościami. Umożliwiają one skuteczne manipulowanie i wytwarzanie nowych zjawisk, a więc umożliwiają praktykę nie tylko laboratoryjną, ale również technologiczną, a ich skuteczność uzasadnia słuszność realistycznego podejścia do *przedmiotów nauki*. Jednakże stosowania argumentu z *sukcesu nauki* nie należy, zdaniem Hackinga i Cartwright, rozciągać na teorie naukowe; tak więc uważają oni, że sukces nauki nie pociąga za sobą konieczności uznania za prawdziwe teorii, które mówią o tych przedmiotach. Nie wymaga również akceptacji zasada *wnioskowania do najlepszego wyjaśnienia*, która jest przyjmowana przez większość zwolenników realizmu. Zgodnie z tą zasadą hipotezę, która dostarcza aktualnie najlepszego wyjaśnienia danych zjawisk, należy uznać za przypuszczalnie prawdziwą. Krytykę tej zasady z pozycji antyrealistycznych przeprowadził van Fraassen³. Nancy Cartwright, odrzucając realistyczną interpretację podstawowych teorii i praw fundamentalnych, odrzuca także i tę zasadę w jej podstawowym sformułowaniu. Dla Cartwright prawa fundamentalne są spełnione jedynie w modelach, a wyjaśnianie teoretyczne odnosi się do stanów rzeczy w nich zachodzących, a nie w rzeczywistości dostępnej w badaniach empirycznych. Dlatego prawa fundamentalne „kłamią”, jeśli przyjąć, że odnoszą się do tej ostatniej. Próbuąc wyprowadzić prawa „niskiego poziomu” z praw fundamentalnych, musimy odwołać się do wielu, przyjmowanych często arbitralnie, założeń. Z tego powodu nie jesteśmy w stanie ustalić jednoznacznego związku pomiędzy prawami dwóch różnych poziomów. Jednakże, ze względu na rolę, jaką prawa przyczynowe „niskiego poziomu” odgrywają w praktyce eksperymentalnej, Cartwright przyjmuje zasadę *wnioskowania do najbardziej prawdopodobnej przyczyny* [Cartwright, 1983, s. 92]. Przyjęcie tej zasady znacznie osłabia całościową krytykę zasady *wnioskowania do najlepszego wyjaśnienia*

³ Nawiązująca do van Fraassena, lecz konkurencyjna propozycja ujęcia *zasady wnioskowania prowadzącego do najlepszego wyjaśnienia* została przedstawiona przez Liptona [1991], który uważa, że moc wyjaśniająca hipotezy wpływa na jej wartość poznawczą. Ścisłe sformułowanie zasady *wnioskowania do najlepszego wyjaśnienia*, oddające intuicje Liptona, podał A. Grobler [2000, s. 109-127].

sformułowaną przez van Fraassena. Zdaniem Cartwright, a także Hackinga, van Fraassen posuwa się za daleko w swojej krytyce tej zasady, gdyż nie dostrzega szczególnej roli, jaką wyjaśnienia przyczynowe odgrywają w nauce, a zwłaszcza w laboratoryjnej praktyce badawczej. Eksperymentatorzy są bowiem skłonni uznawać za prawdziwe prawa przyczynowe, które są weryfikowane bezpośrednio na drodze doświadczalnej, choć mogą być one sformułowane również za pomocą terminów, uznawanych powszechnie za terminy teoretyczne. Są skłonni tak czynić, gdyż stosowanie tych praw umożliwia im skuteczne interweniowanie w otaczający nas świat. To właśnie wyniesione z praktyki laboratoryjnej przekonanie, że możemy ustalić, jaki przedmiot lub zjawisko stanowiło – w konkretnym przypadku – przyczynę zajścia innego zjawiska, sprawia, iż powinniśmy wnioskować do najbardziej prawdopodobnej przyczyny.

I. Hacking uważa, że manipulowanie i kreowanie nowych zjawisk jest jedynie najmocniejszym argumentem na rzecz istnienia odpowiednich przedmiotów teoretycznych i „przekształca” je w przedmioty eksperymentatora⁴. Siła argumentów, które można sformułować, na rzecz odpowiednich sądów egzystencjalnych przyjmowanych w nauce, jest stopniowalna. Najslabszym argumentem w tym zakresie jest postulowanie pewnych przedmiotów przez teorie naukowe, które wyjaśniają zjawiska z danego zakresu i są – w odpowiednio wysokim stopniu – potwierdzone empirycznie. Słabość tego argumentu wynika chociażby z faktu, że mogą się pojawić konkurencyjne teorie naukowe równie dobrze potwierdzone empirycznie, które nie będą postulowały istnienia tych przedmiotów.

Mocniejszym argumentem jest możliwość obserwowania przedmiotów w szerokim sensie. Oznacza to także możliwość dokonywania pomiarów właściwości tych przedmiotów. Są to badania ‘na’ przedmiotach, które w praktyce badawczej są bardzo często uznawane przez eksperymentatorów za podstawowy argument na rzecz istnienia określonych przedmiotów⁵. Zdaniem Hackinga siła argumentu z szeroko rozumianej obserwacji jest jednak przeceniana, gdyż można podać wiele przykładów obserwacji błędnych. Dlatego możliwość manipulowania przedmiotami teoretycznymi, a zwłaszcza kreowania nowych zjawisk, posiada wartość argumentu przesądzającego o ich istnieniu.

⁴ Hacking protestuje przeciwko zbyt mocnemu interpretowaniu jego argumentu z manipulowania i kreowania nowych zjawisk jako jedyne kryterium istnienia przedmiotów teoretycznych. Zobacz na ten temat: [Hacking, 1995/1996, s. 537-542]. Sądzę obecnie, że zasadniczo trafna jest propozycja P. Giza wyróżnienia trojakiemu typowi argumentów na rzecz istnienia przedmiotów teoretycznych, które pojawiają się w pracach Hackinga [Giza, 1990, s. 83-85].

⁵ Autorzy artykułu [Zeidler, Sobczyńska, 1995/1996, s. 517-535] starali się wykazać, że w praktyce laboratoryjnej chemii te eksperymenty ‘na’, czyli badania pomiarowe, są uznawane bardzo często za wystarczające argumenty na rzecz istnienia cząsteczek związków chemicznych o określonym składzie i strukturze.

3. „Nie ma żadnych antyrealistów w laboratorium” – całościowy realizm laboratoryjny Allana Franklina

Allan Franklin, jeden z czołowych przedstawicieli „nowego eksperymentalizmu”, rozwijał, w swoich wcześniejszych książkach [Franklin, 1986, 1990], Bayesowskie ujęcie strategii, które należy stosować prowadząc badania eksperymentalne. W odniesieniu do sporu o realizm stanowisko to zasadniczo odbiegało od koncepcji głoszonej przez Hackinga i Cartwright. Analizy jego poglądów z tego okresu skłaniają filozofów nauki do lokowania ich w tradycji epistemologii pozytywistycznej i pragmatycznego nurtu badań nad nauką⁶. Jednakże w swojej książce z roku 1999 pt. *Can that Be Right?* Franklin zadeklarował się jako realista i to realista „całościowy”. Swoje stanowisko formułuje w opozycji do konstruktywnego empiryzmu van Fraassena. Deklaruje, że zaadaptuje i będzie bronił stanowiska realistycznego w postaci scharakteryzowanej przez van Fraassena. Zgodnie z tą charakterystyką „nauka zmierza do formułowania teorii, które dostarczają literalnie prawdziwej opowieści o świecie, a akceptacja teorii zakłada przeświadczenie o jej prawdziwości” [van Fraassen, 1980, s. 8]. Jednakże Franklin nie tylko akceptuje przekonanie, np. Sellarsa, że przesłanki świadczące na rzecz uznawania jakiejś teorii za prawdziwą są zarazem przesłankami na rzecz tezy o istnieniu przedmiotów postulowanych przez tę teorię, lecz jest skłonny zgodzić się także z Hackingiem i Cartwright, że uczeni mogą uzasadnić tezę o istnieniu określonych przedmiotów teoretycznych bez uciekania się do stwierdzania prawdziwości teorii, mówiących o tych przedmiotach. O istnieniu odpowiednich przedmiotów rozstrzyga praktyka laboratoryjna, a jej przebieg może wpłynąć na stopień uzasadnienia sądów egzystencjalnych, przyjmowanych przez uczonych. Lecz w przeciwieństwie do wymienionych filozofów nauki uważa on, że uczeni mają wystarczająco mocne przesłanki, by uznawać za prawdziwe prawa i teorie opisujące zachowanie się tych przedmiotów.

Franklin uzasadnia swoje stanowisko, odwołując się do badań z zakresu fizyki cząstek elementarnych, a dokładniej do badań mezonów K [Franklin, 1999, s. 150-154]. Badania te są prowadzone przy założeniu istnienia innych cząstek, np. elektronów, protonów czy pionów. W przeciwieństwie do Hackinga, którego analizy koncentrują się na manipulowaniu przedmiotami teoretycznymi, Franklin bada warunki i założenia, które umożliwiają dokonywanie pomiarów właściwości mezonów K. Przeprowadzane pomiary wymagają zastosowania szeregu praw i to praw fundamentalnych, które nie odnoszą się wyłącznie do mezonów K, ale do wszystkich cząstek posiadających ładunek. Franklin argumentuje, że jeśli stosowane prawa nie byłyby wiarygodne, to trudno byłoby nie tylko zaakceptować

⁶ Zobacz np. [Czarnocka, 1994, s. 116-122].

wyniki tych pomiarów, ale nawet wyobrazić sobie, jak były one możliwe. Jednakże, jak już stwierdziliśmy, uważa on, że uznanie tych praw za prawdziwe nie stanowi jedyne uzasadnienie wiarygodności przekonania, że istnieją mezony K, lecz jeśli by nie było mezonów K, to nie wiadomo byłoby, jak wyjaśnić wyniki tych pomiarów.

Realizm laboratoryjny Franklina nazwałem „całościowym”, gdyż odnosi się on nie tylko do przedmiotów eksperymentatora, lecz również do praw i teorii zakładanych w badaniach eksperymentalnych. Te ostatnie umożliwiają przeprowadzanie pomiarów wielkości, które charakteryzują te przedmioty. Są to więc eksperymenty przeprowadzane na tych przedmiotach. Ich pozytywne wyniki są, zdaniem Franklina, uważane przez eksperymentatorów za mocne argumenty na rzecz istnienia tych przedmiotów oraz prawdziwości praw i teorii, które umożliwiają przeprowadzenie pomiarów. Franklina nie zadowala stanowisko van Fraasena, który proponuje ograniczać się jedynie do stwierdzania empirycznej adekwatności teorii, czyli jej prawdziwości, w odniesieniu do tego, co jest bezpośrednio obserwowalne. Uważa, że jeśli by uczone interesowała wyłącznie empiryczna adekwatność, to nie można by wyjaśnić, dlaczego tyle wysiłku poświęcają rozwikłaniu niezgodności, które występują między dwiema sprzecznymi, lecz empirycznie adekwatnymi teoriami, odnoszącymi się do tego samego zakresu zjawisk [Franklin, 1999, s. 157]. Nie rozumie on także, dlaczego dane świadczące na rzecz adekwatności empirycznej teorii, odnoszącej się również do mezonów K, nie mogą być uznane za ewidencję tezy, mówiącej o istnieniu mezonów K [Franklin, 1999, s. 155].

Realizm laboratoryjny Allana Franklina nie jest realizmem skrajnym, gdyż autor twierdzi jedynie, że to badacz eksperymentator posiada uzasadnione racje, zarówno aby sądzić, iż odpowiednie prawa nauki są prawdziwe, jak i być przekonanym, że istnieją przedmioty teoretyczne, za pomocą których i na których eksperymentuje. Franklina interesuje więc uzasadnienie epistemicznych i egzystencjalnych sądów, które formułują eksperymentatorzy. W zakończeniu rozdziału zatytułowanego *There Are no Antirealists in the Laboratory* podkreśla, iż nie twierdzi, że prawa nauki mogą być prawdziwe w sensie absolutnym, a przedmioty teoretyczne „rzeczywiście” istnieją [Franklin, 1999, s. 160].

4. Argumentacja Ronalda Gierego na rzecz realizmu laboratoryjnego

Ronald Giere jest znany przede wszystkim jako autor stanowiska nazywanego konstruktywnym realizmem strukturalnym, które sformułował w rezultacie krytycznej analizy konstruktywnego empiryzmu B. C. van Fraasena. Jednakże w swojej najbardziej znanej książce *Explaining Science. A Cognitive Approach* [Giere,

1988] sformułował również argumentację na rzecz realizmu laboratoryjnego⁷. W rozdziale pt. „Realism in the Laboratory” podjął polemikę nie tylko z konstruktywnym empiryzmem, lecz również z mikrosocjologią wiedzy reprezentowaną przez B. Latoura i S. Woolgara, a także przez K. Knorr Cetinę. Uważał bowiem, że badania tych ostatnich dostarczają mikrosocjologicznej podstawy dla całościowego ujęcia nauki z perspektywy konstruktywnego empiryzmu van Fraassena. Giere polemizował zatem z konstruktywizmem zorientowanym antyrealistycznie⁸. Jego przedstawiciele przyznają, że uczeni często mówią w taki sposób, jakby byli realistami, a nawet realistami modalnymi, lecz wyrażanie przez nich takiego przekonania nie świadczy bynajmniej o tym, iż mogą je oni uzasadnić, odwołując się do swojej praktyki laboratoryjnej. Van Fraassen uważa, że ten sposób mówienia wyraża jedynie pragmatyczne aspekty języka naukowego, podczas gdy uczeni dążą do budowania teorii lub modeli adekwatnych empirycznie. Natomiast socjologowie wiedzy sądzą, iż przygodność badań naukowych oraz procesy negocjacyjne, które mają miejsce w codziennej praktyce badawczej, prowadzą do wytworzenia wyników badań, a w konsekwencji do kreacji rzeczywistości badanej przez naukę. Dla zwolennika empiryzmu cząstki elementarne są jedynie „teoretycznymi” lub „skonstruowanymi” przedmiotami. Socjologowie wiedzy dodają, że są one „społecznymi konstruktami”. Jednakże – w opinii Gierego – badacze, którzy posługują się przedmiotami teoretycznymi w podobny sposób, jak posługują się innymi narzędziami badawczymi, nie tylko mówią o nich, jakby były realnie istniejącymi przedmiotami, lecz ich przekonanie o istnieniu tych przedmiotów posiada mocne pozawerbalne uzasadnienie.

Ronald Giere, formułując stanowisko realizmu eksperymentalnego, postępuje podobnie jak socjologowie wiedzy – odwołuje się do obserwacji codziennej praktyki eksperymentalnej. Jednakże opisując i analizując tę praktykę, przyjmuje odmienną od socjologów wiedzy perspektywę badawczą, która prowadzi w konsekwencji do odmiennych wniosków. Śledząc prace laboratoryjne nad wytwarzaniem wiązek protonów, za pomocą których bombarduje się atomy niektórych pierwiastków, co w odpowiednich warunkach prowadzi do reakcji jądrowych, np. reakcji typu proton–neutron, która umożliwia np. przejście od C^{14} do N^{14} , stwierdza, że uczeni uznają protony za realnie istniejące. Co więcej, uważa, że wytwarzanie wiązek protonów i manipulowanie nimi w celu wywoływania określonych efektów w pełni uzasadnia to przekonanie. Zauważa także, iż uczeni często posiadają uzasadnione wątpliwości co do prawdziwości, a nawet adekwatności empirycznej modeli opisujących przedmioty teoretyczne, np. strukturę protonów⁹. Giere nie

⁷ Zobacz [Giere, 1988], a także [Giere, 1985].

⁸ Ronald Giere jest również konstruktywistą w tym znaczeniu tego terminu, zgodnie z którym wytwory poznania naukowego są konstruowane przez badaczy, a nie odkrywane.

⁹ Ronald Giere zamiast o teoriach mówi o modelach, gdyż dla niego teorie to zbiory modeli.

wątpi, że przygodność i procesy negocjacyjne posiadają znaczący wpływ zarówno na przebieg badań laboratoryjnych, jak i na prezentowane w publikacjach naukowych wyniki badań. Nie zmienia to jednak – jego zdaniem – faktu, że posługiwanie się przedmiotami teoretycznymi w podobny sposób, jak posługujemy się „klasycznymi” narzędziami badania naukowego, uzasadnia przekonanie o ich istnieniu. Ewentualne odkrycie innych niż przewidywane przez istniejące modele właściwości tych przedmiotów spowodowałoby, że uczeni uznaliby, iż modele te nie są poprawne lub – co jest znacznie mniej prawdopodobne – że przedmioty te nie są tymi, za które je brano, np. protonami. Jednakże, w obu przypadkach, nie zostaje podważone ich przekonanie, że manipulują realnie istniejącymi przedmiotami.

Argumentów na rzecz realizmu nie powinna – zdaniem Gierego – dostarczać jedynie analiza języka, w którym uczeni formułują swoje przekonania, lecz przede wszystkim ich praca laboratoryjna, wzajemne oddziaływanie badaczy i świata. Jest to niewątpliwie nawiązanie do tradycji pragmatyzmu, gdyż „dla Peirce’a i Deweya badanie to oddziaływanie ze środowiskiem współpracujących ze sobą ludzi, a oba jego aspekty, czynna interwencja, czynne manipulowanie otoczeniem, oraz współpraca z innymi, są istotne” [Putnam, 1999, s. 106]. Manipulacja protonami i wytwarzanie za ich pomocą innych przedmiotów i zjawisk jest argumentem rozstrzygającym na rzecz przyjęcia tezy o istnieniu protonów. Przedmioty teoretyczne stają się narzędziami badawczymi, które odgrywają olbrzymią rolę w rozwoju technologii. W tym zakresie poglądy Gierego nie odbiegają w sposób zasadniczy od poglądów Hackinga, lecz Giere, w przeciwieństwie do Hackinga, jest przekonany, że modele teoretyczne – pod pewnymi względami i w pewnym stopniu – mogą reprezentować badane zjawiska¹⁰. Jednakże najważniejsza – i to nie tylko w kontekście sporu o realizm – jest wiedza ucieleśniona w technologii. Posługiwanie się przedmiotami, które posiadają podstawowe właściwości przypisywane protonom, rozstrzyga na rzecz tezy mówiącej o istnieniu protonów, a także o poprawności – przynajmniej aspektowej – niektórych modeli reprezentujących budowę i zachowanie protonów. Realistyczne stanowisko Gierego jest więc zbliżone do „całościowego” realizmu laboratoryjnego Franklina. Różni te stanowiska, pomijając pewne odmienności w stosowanej argumentacji, przede wszystkim sposób realistycznego ujęcia podstawowej jednostki wiedzy, którą dla Franklina jest teoria naukowa, a dla Gierego model teoretyczny.

¹⁰O problemie obrazowania świata przez wytwory pracy badawczej uczonych w kontekście praktyki badawczej chemii piszę szczegółowo w artykule *Czy wytwory pracy uczonych obrazują świat? Wątpliwości antyrealisty* [Zeidler, 2005(b)].

5. „Skrzynka narzędziowa nauki” – Nancy Cartwright o konceptualnych narzędziach nauki

Od lat osiemdziesiątych XX wieku Nancy Cartwright należy do nowej orientacji w filozofii nauki, która zdjęła z metodologicznego piedestału teorie naukowe. Teorie przestały być podstawowym, a stały się jednym z wielu konceptualnych narzędzi nauki. Tym samym Cartwright, znana z książki *How the Laws of Physics Lie* [1983] jako orędowniczka antyrealistycznego podejścia do teorii naukowych, o którym wspomnieliśmy w paragrafie drugim, opowiedziała się za redefinicją instrumentalizmu wywodzącego się z tradycji neopozytywistycznej. Zdaniem Cartwright rozumienie naukowe oraz korespondujący z nim obraz świata są zakodowane w aparaturze naukowej, matematycznych technikach, metodach aproksymacji, naszych laboratoriach badawczych i stosowanej technologii w nie mniejszym stopniu niż w teoriach naukowych [Cartwright, Shomar, Suarez, 1995, s. 138]. Autorka uważa, że powyżej wymienione „jednostki” rozumienia nie powinny być rozpatrywane jako elementy twierdzeń o naturze lub strukturze rzeczywistości, którym można by przypisać wartość logiczną. Należy je raczej uznać za narzędzia wchodzące w skład „zwykłej” skrzynki narzędziowej nauki [Cartwright, Shomar, Suarez, 1995, s. 138]. Narzędzia znajdujące się w tej skrzynce umożliwiają interweniowanie, manipulowanie i zmianę naturalnego porządku w przyrodzie, umożliwiają więc eksperymentowanie. W artykule *The Tool Box of Science* Cartwright zakłada, że to modele teoretyczne są uważane przez uczonych za jednostki wiedzy, pełniące funkcję reprezentowania badanych układów empirycznych [Cartwright, Shomar, Suarez, 1995, s. 139]. Autorkę interesuje przede wszystkim związek pomiędzy teorią, pełniącą jedynie funkcję instrumentalną, a realistycznie interpretowanymi modelami. Modele nie są dedukowane z teorii, tak jak nie są z niej dedukowane dane empiryczne. Cartwright twierdzi – i jest to istotna zmiana w porównaniu z jej poglądami, które głosiła w książce *How the Laws of Physics Lie* – że zwroty „literalne rozumienie (czytanie) teorii” oraz „dane (zjawiska) implikowane przez teorię” nie posiadają żadnego sensu. Reprezentacje danych (zjawisk) są konstruowane, a teorie są jednymi z wielu narzędzi służących temu celowi [Cartwright, Shomar, Suarez, 1995, s. 139]. Zdaniem Cartwright, można mówić jedynie o realnych przedmiotach i realnych sposobach przejawiania się tych przedmiotów. Są one reprezentowane przez modele, które są konstruowane przy użyciu różnych narzędzi konceptualnych, do których należą również teorie naukowe. Modele reprezentujące realne przedmioty i zjawiska posiadają więc charakter fenomenologiczny. W omawianym artykule pozostali jego współautorzy egzemplifikują rozważania Cartwright analizami różnych przykładów wziętych z fizyki.

Realistyczne stanowisko Cartwright w odniesieniu do modeli teoretycznych ma wyrażać przekonania samych uczonych – zwłaszcza tych pracujących w laboratoriach.

Trudno jednakże oprzeć się wrażeniu, iż modele mogą być uznawane przez nich jedynie za dogodne narzędzia konceptualne, ułatwiające przeprowadzanie eksperymentów, a niekiedy wyjaśniające ich przebieg. Przekonanie to potwierdza analiza wyjaśniania przyczynowego stosowanego w praktyce eksplanacyjnej chemii organicznej¹¹.

6. Margaret Morrison i Mary Morgan o funkcjach modeli w praktyce badawczej

To, że modele są dogodnymi instrumentami, pozwalającymi uczonym lepiej poznawać zarówno teorie naukowe, jak i świat, nie jest – zdaniem Margaret Morrison i Mary Morgan – przez nikogo kwestionowane [Morrison, Morgan, 1999, s. 10]¹². Autorki uważają jednakże, iż do tej pory brakowało w literaturze przedmiotu jednolitego, systematycznego ujęcia funkcji pełnionych przez modele. Mówiąc o modelach, mają na myśli modele, które występują w szeroko rozumianej praktyce badawczej nauk empirycznych. Charakterystykę tak rozumianych modeli przez postulatory podał P. Achinstein [1968, s. 203-205]. W ujęciu autorek modele są autonomicznymi instrumentami badania naukowego, gdyż nie są ani całkowicie wyprowadzane z teorii, ani konstruowane wyłącznie z dostępnych danych empirycznych. Ponieważ są autonomiczne, mogą stanowić instrumenty służące zarówno do badania teorii, jak i świata, choć w pewnym stopniu zależą od obu¹³. Wyjściowe założenie przyjmowane przez autorki jest na wskroś realistyczne. Modele, choć są podstawowymi narzędziami stosowanymi w nauce, są budowane po to, by na różne sposoby reprezentować zarówno świat, jak i teorie naukowe. Dzięki temu można za ich pomocą interweniować w świat i modyfikować teorie, a także uczyć się i teorii, i świata [Morrison, Morgan, 1999, s. 11-24]. Jednakże, w przeciwieństwie do Gierego, uważają, że modele nie stanowią podstawy do formułowania prawdziwych twierdzeń o świecie.

Nie jest moim zamierzeniem ani egzegeza, bardzo nieprecyzyjnie sformułowanego, stanowiska Morrison i Morgan odnośnie do statusu poznawczego modeli teoretycznych, ani polemika z tym stanowiskiem. Skoncentruję się natomiast na

¹¹ Zobacz na ten temat [Zeidler, 2004(b), s. 182-195].

¹² Pod wieloma względami poglądy Morrison i Morgan są zbieżne z poglądami Cartwright, która jest zresztą autorką jednego z artykułów zamieszczonych w tomie przez nie zredagowanym. Zobacz [Cartwright, 1999, s. 241-281].

¹³ Morrison i Morgan, odwołując się do przykładów analizowanych przez autorów artykułów zawartych w ich książce, wykazują, iż autonomiczność modeli wynika z faktu, że proces ich konstrukcji nie jest zdeterminowany jednoznacznie ani przez teorie, ani przez dane empiryczne [Morrison, Morgan, 1999, s. 12-17].

przedstawieniu tych, wymienionych przez autorki, funkcji modeli, które są ważne z punktu widzenia eksperymentalnej praktyki badawczej. Zdaniem autorek modele mogą pełnić te funkcje, gdyż w pewnym stopniu i pod pewnymi względami reprezentują świat. Jednakże dobrze znane kłopoty z teorią reprezentacji skłaniają do przyjęcia założenia, iż modele są jedynie narzędziami wchodzącymi w skład „skrzynki narzędziowej nauki”, bez rozstrzygnięcia problemu ich statusu poznawczego¹⁴.

Modele pełnią istotną, jeśli nie centralną, rolę w konstrukcji ogólnej teorii opisującej szeroką klasę zjawisk, a także w projektowaniu działań prowadzących do wytworzenia tych zjawisk [Morrison, Morgan, 1999, s. 18-19]. Bardzo dobrym przykładem jest wykorzystanie wzorów i równań chemicznych zarówno w celu wprowadzenia szeregu podstawowych pojęć chemicznych, które umożliwiły sformułowanie wielu praw i reguł chemicznych, jak i do projektowania przemian chemicznych, które doprowadziły do wyprodukowania nowych związków¹⁵. Niekiedy zadanie modeli jest skromniejsze. Umożliwiają poprawienie pewnych elementów teorii lub mogą zachęcać do szczegółowych badań nad niektórymi aspektami teorii, i tym samym umożliwić ich rozwój. Modele pełniące takie funkcje względem teorii są zazwyczaj empirycznie testowane lub wykorzystywane w trakcie projektowania eksperymentów. Egzemplifikacji w tym względzie dostarczają nie tylko przykłady z fizyki, lecz również z ekonomii¹⁶. Ważną konstatacją autorek jest stwierdzenie, że teoria nie dostarcza jednoznacznych reguł budowania modeli. Owa, wspomniana już, autonomia modeli sprawia, że mogą być wartościowymi narzędziami do badania tych procesów, których nie można opisać za pomocą istniejących teorii. Mogą również być stosowane bezpośrednio w procesie eksperymentowania, np. przy obliczaniu ilości substratów, które powinny być użyte w projektowanej syntezie chemicznej, a także być przedmiotem eksperymentu, jak np. mechaniczny model eteru Lorda Kelvina i Fitzgeralda [Morrison, Morgan, 1999, s. 20]. Inna ważna rola modeli jest związana z dokonywaniem pomiarów. Modele mogą niekiedy pełnić funkcję przyrządów pomiarowych [Morrison, Morgan, 1999, s. 21-23].

Szczególnie ważna jest konstatacja autorek, że modele są narzędziami projektowania i wytwarzania nie dlatego, że są replikami układów modelowanych, lecz dlatego, że dostarczają informacji o tych układach, które umożliwiają interweniowanie

¹⁴ Odnotowaliśmy już w paragrafie piątym, iż Cartwright „nie włożyła” modeli do „skrzynki narzędziowej nauki”. Modele, rozumiane przez nią realistycznie, były konstruowane za pomocą narzędzi znajdujących się w tej skrzynce.

¹⁵ Morrison i Morgan powołują się w tym zakresie na analizy zawarte w artykule U. Klein, który wchodzi w skład zredagowanego przez nie tomu [Klein, 1999, s. 146-167], choć w literaturze z zakresu filozofii chemii można znaleźć wiele przykładów na poparcie tez głoszonych przez Klein.

¹⁶ Zobacz artykuły M. Suareza [1999, s. 168-195] i G. Reutena [1999, s. 196-240].

w świat [Morrison, Morgan, 1999, s. 23]¹⁷. Nawiązując do poglądów Hackinga i Cartwright, można powiedzieć, że dostarczają informacji, które umożliwiają ustalanie związków przyczynowo-skutkowych niezbędnych do takiej interwencji. Modele pełniące funkcję informacyjną umożliwiają również symulowanie przebiegu różnych zjawisk. Symulowanie zjawisk, obecnie głównie za pomocą komputerów, nie tylko ułatwia, a czasem zastępuje eksperymentowanie, lecz także – zdaniem autorek – prowadzi do wytwarzania nowej wiedzy [Morrison, Morgan, 1999, s. 28-30]. Ostateczna konkluzja Morrison i Morgan, wypływająca z analizy różnych funkcji pełnionych przez modele, brzmi: „Modele mogą być obiektami fizycznymi, matematycznymi strukturami, diagramami, programami komputerowymi lub czymkolwiek innym, lecz wszystkie one działają jak instrumenty do badania świata, naszych teorii, a nawet innych modeli” [Morrison, Morgan, 1999, s. 32].

Jednakże gdy Cartwright, Morrison i Morgan rozważają różne funkcje, jakie modele mogą pełnić w praktyce badawczej, i uznają je za podstawowe jednostki „rozumienia naukowego”, to nie analizują semantycznych funkcji słów bądź innych znaków, z których są one konstruowane. Nie wyjaśniają więc, jak modele mogą reprezentować układy empiryczne, jeśli w ogóle mogą to czynić, i w jaki sposób mogą być skutecznym narzędziem interweniowania w świat. Kwestie te będą przedmiotem rozważań zawartych w kolejnym paragrafie.

7. O uprzedmiotawianiu pojęć teoretycznych w praktyce laboratoryjnej nauki

Konsekwencją odrzucenia przez Donalda Davidsona trzeciego dogmatu empiryzmu, zakładającego dualizm schematu pojęciowego i świata (treści), jest rezygnacja z dwóch centralnych pojęć, za pomocą których opisuje się praktykę badawczą nauki, a w jej ramach praktykę laboratoryjną: „doświadczenia” i „odniesienia przedmiotowego”. Dla zagadnień rozważanych w tym artykule istotne jest przede wszystkim to drugie pojęcie, którego – zdaniem Davidsona – nie można wyeksplikować, posługując się terminami pozalingwistycznymi [Davidson, 1984, s. 220]. Davidson, a także zwolennicy jego stanowiska w tym zakresie, np. R. Rorty, postulują, by w badaniach nad językiem oprzeć się: „na semantyce ‘dyskwotacyjnie’ pojętej prawdy, semantyce rezygnującej z pojęcia odniesienia przedmiotowego” [Kmita, 1997, s. 93]. Jednakże opis funkcji, jakie język pełni w praktyce laboratoryjnej, wydaje się trudny do przedstawienia w aparacie pojęciowym wprowadzonym przez D. Davidsona. Co ważniejsze, odbiegałby on w sposób zasadniczy od intuicji, jakie wiąże się z warunkami, które powinien spełniać język stosowany

¹⁷ Informacje mogą być przekazywane za pomocą różnych, często ze sobą niezgodnych, modeli.

w praktyce laboratoryjnej, aby stanowić jej efektywne narzędzie. Mówiąc o roli i funkcjach języka w praktyce laboratoryjnej, mam na myśli przede wszystkim językowe wytwory pracy uczonych, wykorzystywane przy projektowaniu, opisywaniu i wyjaśnianiu eksperymentów. Bardziej przydatne w tym zakresie jest stanowisko Quine'a, opowiadającego się za: „językiem ekstensjonalnym, który stanowi dla niego istotny wyróżnik nauki – niezbędny przy definiującym ją formułowaniu przewidywań technologicznie efektywnych” [Kmita, 1997, s. 98]. Ten sam postulat dotyczy oczywiście efektywności działań laboratoryjnych. Jednakże, jak powszechnie wiadomo, choć Quine posługuje się pojęciem odniesienia przedmiotowego, to obiekty wykorzystywane do konstrukcji tych odniesień posiadają – jego zdaniem – jedynie charakter bytów postulowanych¹⁸. Lecz konieczność podejścia instrumentalistycznego ujawnia się – zgodnie z koncepcją Quine'a – dopiero wtedy, gdy dochodzi do zmiany języka. Natomiast z punktu widzenia eksperymentatora, posługującego się określonym językiem, jego interpretacja może być realistyczna, a przynajmniej obiektywistyczna. W tym zakresie stanowisko Quine'a jest zbliżone do poglądu van Fraassena. Ten ostatni uważa, iż można przyjąć, że eksperymentator zanurzony w obraz świata postulowany przez stosowany przez niego aparat pojęciowy nie wątpi, że obiekty, własności i relacje tworzące ten obraz istnieją obiektywnie. Dlatego też powinien realistycznie interpretować język, którym się posługuje. Nie oznacza to jednakże, iż eksperymentator przyjmuje lub powinien przyjmować, iż odpowiednie byty istnieją „rzeczywiście”, tzn. poza naukowym obrazem świata¹⁹. Choć van Fraassen zakłada literalne rozumienie języka nauki i klasyczne pojęcie prawdy, a więc można go uznać za realistę semantycznego, jego stanowisko, odniesione do metafizycznej postawy eksperymentatorów, jest niewątpliwie antyrealistyczne.

Z poglądami zarówno Quine'a, jak i van Fraassena nie zgadza się Hacking, dla którego możliwość skutecznego manipulowania „bytami postulowanymi”, świadczy na rzecz ich realności. Jego realizm eksperymentalny wyraża się bowiem – jak pisałem o tym w paragrafie drugim – w przekształcaniu przedmiotów teoretyki w przedmioty eksperymentatora. Zdaniem Hackinga z punktu widzenia eksperymentatora dopiero możliwość manipulowania przedmiotami i kreowania nowych zjawisk dostarcza mocnych argumentów na rzecz tezy o istnieniu określonych przedmiotów. Jednakże stanowisko Hackinga nie prowadzi do spójnej koncepcji semantyki dla języka wykorzystywanego w praktyce laboratoryjnej²⁰.

¹⁸W tym kontekście nie biorę pod uwagę tezy Quine'a o niedookreśleniu odniesienia przedmiotowego.

¹⁹Do takiej interpretacji poglądów van Fraassena w odniesieniu do postawy eksperymentatora upoważniają jego rozważania zawarte w: [van Fraassen, 1981, s. 80-83].

²⁰Hacking sugerował wykorzystanie w tym celu sztywnej teorii oznaczania, lecz pomijając najróżniejsze problemy natury filozoficznej, jakie rodzi ta propozycja, nie dostarcza ona spójnej interpretacji semantycznej całego języka nauki.

Na podobne kłopoty, jak już sygnalizowaliśmy w paragrafie drugim, napotyka stanowisko Cartwright. Zdaniem tej autorki, jak pamiętamy, terminy występujące w teoriach naukowych odnoszą się jedynie do fikcyjnych przedmiotów występujących w modelach semantycznych, podczas gdy terminy występujące w pracach fenomenologicznych są interpretowane realistycznie. Jednakże trudno na przykład odpowiedzieć jednoznacznie na pytanie, jaki jest, z punktu widzenia Hackinga i Cartwright, status ontologiczny, np. orbitali atomowych lub molekularnych. Odgrywają one olbrzymią rolę w projektowaniu i przyczynowym wyjaśnianiu przemian chemicznych. Chemicy posługują się nimi przy ustalaniu reguł, które często posiadają wąski zakres stosowalności. Powinny więc być interpretowane realistycznie, lecz są to pojęcia konstruowane w ramach wysoce teoretycznych rozważań i są reprezentowane przez odpowiednie funkcje falowe, będące funkcjami prawdopodobieństwa.

Przedstawione powyżej, w sposób skrótowy, poglądy na temat interpretacji semantycznej języka stosowanego w praktyce laboratoryjnej skłaniają do zarysowania konkurencyjnej propozycji w tym zakresie. Chcąc wyjaśnić efektywność praktyki laboratoryjnej, wystarczy, jak sądzę, odwołać się do zabiegu uprzedmiotowienia pojęć stosowanych przez eksperymentatorów bez rozstrzygania kwestii, czy uzyskanym w ten sposób odniesieniom przedmiotowym przysługuje status 'realności'. Powyższe rozwiązanie jest więc neutralne w sporze o realizm laboratoryjny, nakładając jedynie warunek minimalny na sposób interpretowania języka przez eksperymentatorów. Natomiast ustalenie, jakie są w tym względzie faktyczne przekonania uczonych, może być przedmiotem badań empirycznych, które jednakże zależą od metodyki ich przeprowadzania i dlatego ich konkluzywność jest bardzo wątpliwa.

W celu nakreślenia koncepcji uprzedmiotowienia pojęć stosowanych przez eksperymentatorów odwołam się do ustaleń poczynionych przez A. Pałubicką²¹. Wskazuje ona na dwie podstawowe perspektywy, z których ujmowane jest doświadczenie oraz procesy percepcyjne. Jedna z nich to perspektywa teoretyczno-refleksyjna, druga jest związana z działaniem praktycznym. Perspektywy te prowadzą do wytworzenia dwóch typów podmiotu: podmiotu reflektującego i podmiotu działającego. Każdy z nich operuje odmiennym pojęciem przedmiotu. Przedmiot podmiotu reflektującego to przedmiot, któremu przypisuje się status „rzeczy w sobie”, a przedmiot podmiotu działającego to przedmiot, który istnieje tylko jako zjawisko [Pałubicka, 1999, s. 104-105]. Istotne jest także to, że podmiot reflektujący jest neutralny w sensie aksjologicznie-instrumentalnym w przeciwieństwie do podmiotu działającego. Właśnie zaangażowanie w kontekst aksjologicznie-instrumentalny sprawia, że podmiot działający nie może się pogodzić ze zredukowaniem przedmiotu do zjawiska, gdyż „nikt tak gorąco nie wierzy w 'rzeczywistość

²¹ Zobacz [Pałubicka, 1999, s. 97-126].

obiektywną', jak właśnie człowiek działający" [Pałubicka, 1999, s. 106]. Przyjmuje się, że „osiąganie skuteczności praktycznej przez określony fragment wiedzy wymaga pojawienia się pewnych jej własności. Zaliczyłabym do nich – a jest to warunek wstępny – uprzedmiotowienie jej, czyli nadanie objętym przez nią pojęciom i sądom określonej treści przedmiotowej, takiej, że da się ona ująć w formie przedmiotów i stanów rzeczy egzystujących oraz funkcjonujących jako odniesienia przedmiotowe odnośnych pojęć i sądów. [...] niektóre przynajmniej z owych odniesień przedmiotowych tworzą to, co nazwałam tu wcześniej wyobrażeniem stanowiącym praktyczny kontekst kulturowy jakiegoś działania lub zbioru działań” [Pałubicka, 1999, s. 112]. Autorka cytowanego fragmentu zastanawia się, czy „pomiędzy strukturami refleksyjno-teoretycznymi a uzasadnianymi *implicite* przez nie praktycznymi kontekstami kulturowymi zachodzi jakieś możliwe do precyzyjniejszego opisu powiązanie formalne”, i dochodzi do wniosku, „iż kontekst praktyczny, wyobrażeniowy daje się uzasadnić – jeśli jest efektywny – przez zdaniowy opis określonego kontekstu refleksyjnego” [Pałubicka, 1999, s. 113].

W odniesieniu do rozważań nad praktyką laboratoryjną struktury refleksyjno-teoretyczne to nic innego jak teorie naukowe lub – szerzej – narzędzia konceptualne wchodzące w skład „skrzynki narzędziowej nauki” N. Cartwright. Natomiast praktyczny kontekst kulturowy to regulowana również kulturowo, gdyż zgodnie z określonym zespołem reguł, praktyka laboratoryjna. Jak na to wskazuje dokonany powyżej przegląd stanowisk, w filozoficznej refleksji nad praktyką badawczą przyjmuje się różne rozwiązania problemu zależności zachodzących między tymi kontekstami. Niewątpliwie większość terminów, a przede wszystkim terminy teoretyczne, które występują w języku eksperymentatorów, pochodzi z języka, w którym uprawia się refleksję teoretyczną. Jednakże zależności zachodzące pomiędzy interpretacjami tych terminów są ujmowane często na odmienne sposoby. Niektórzy autorzy zakładają, że terminy stosowane w praktyce laboratoryjnej „dziedziczą” interpretację uzyskiwaną w ramach refleksji teoretycznej. Inni, jak np. Hacking i Cartwright, przyjmują, iż język, wykorzystywany przez eksperymentatorów do budowania praw i reguł sterujących praktyką laboratoryjną, uzyskuje interpretację niezależnie od refleksji teoretycznej. Gdy określoną funkcję falową, reprezentującą dany orbital, a dokładnie kwadrat bezwzględnej wartości funkcji falowej, interpretuje się – w ramach teorii – jako gęstość prawdopodobieństwa znalezienia ładunku w danym fragmencie przestrzeni, to w praktyce laboratoryjnej, i nie tylko, wykorzystuje się graficzne reprezentacje odpowiednich funkcji, przedstawiające przestrzenny rozkład ładunku²². Eksperymentatorzy posługują się tymi diagramami (reprezentacjami) w taki sposób, jakby stanowiły one odniesienia przedmiotowe odpowiednich funkcji. W tym wypadku owe odniesienia stanowią ów wyobrażeniowy kontekst działań podejmowanych przez eksperymentatorów, dzięki któremu

²² Zobacz na ten temat [Woody, 2000, s. 612-627].

mogą oni na przykład projektować nowe syntezy. Zauważmy, że diagramy, o których mowa, mogą być uznane również za modele w sensie Cartwright, Morrison i Morgan, gdyż pełnią różne funkcje w praktyce laboratoryjnej chemii. To samo dotyczy uprzedmiotowionych pod postacią odpowiednich geometrycznych reprezentacji – modeli teoretycznych, reprezentujących struktury cząsteczek związków chemicznych. Operowanie na określonego typu reprezentacjach tych struktur umożliwia praktykę laboratoryjną. Reprezentacje te wykorzystywane są również w projektowaniu komputerowym, lecz uprzedmiotowienie odpowiednich modeli nie musi prowadzić do wniosku, że reprezentują one ‘realnie’ istniejące struktury. Gdyby zapytać eksperymentatorów, czy są skłonni uznać za ‘realne’ odpowiednie reprezentacje, np. orbitali, to zapewne większość z nich zawaha się przed udzieleniem odpowiedzi pozytywnej. Nie zmienia to faktu, że uznają je za obiektywne odniesienia przedmiotowe odpowiednich funkcji, gdyż są one konstruowane w sposób metodologicznie uregulowany. O ich obiektywności, która jest autonomiczna, w przyjętym rozumieniu, względem ‘realności’, świadczy również efektywność praktyki eksperymentalnej, która z kolei zależy od trafnie ustalanych związków przyczynowo-skutkowych. Nie zakładam, tak jak Hacking i Cartwright, że ustalenie tych związków wymaga realistycznego traktowania przyczyn i skutków, lecz przyjmuję, że wymaga co najmniej dokonania zabiegu ich uprzedmiotowienia. Podobnie rzecz się ma wtedy, gdy chemik operuje wzorami strukturalnymi cząsteczek związków chemicznych, które pełnią rozliczne funkcje w jego praktyce laboratoryjnej. Wzorom chemicznym przysługuje, jak starałem się wykazać w innym artykule [Zeidler, 2001, s. 119-140], status obiektywności zarówno ze względu na przyjęte reguły budowania wzorów sumarycznych i strukturalnych, jak i eksperymentalne konsekwencje praktyki laboratoryjnej, sterowanej regułami posługiwania się tymi wzorami w trakcie projektowania syntez chemicznych.

VII

Spór o status ontologiczny orbitali atomowych i molekularnych w kontekście zagadnienia autonomii chemii

1. Wstęp

Wśród współczesnych filozofów nauki narasta zniechęcenie do kontynuowania sporu o status poznawczy wiedzy naukowej oraz o istnienie bytów postulowanych przez naukę. Wielu z nich odnosi wrażenie, że spór realistów z antyrealistami, który był jedną z podstawowych kontrowersji dwudziestowiecznej filozofii nauki, wyczerpuje się w zakresie swojej argumentacyjnej podstawy. Ze sporu argumentacyjnego przekształca się, w coraz większym stopniu, w spór perswazyjny, a tym samym – jałowy. Są jednakże takie obszary filozoficznej refleksji nad nauką, w których jest on ciągle żywy i angażuje także samych uczonych. Dzieje się tak wtedy, gdy sama praktyka badawcza prowadzona w zakresie danej dziedziny nauki niejako narzuca pytania o status poznawczych jej wytworów czy o istnienie postulowanych przez nią bytów. Jedną z takich dyscyplin naukowych jest chemia, w której dyskusje dotyczące na przykład statusu poznawczego modeli struktury cząsteczek związków chemicznych albo problemu istnienia orbitali atomowych i molekularnych angażują znaczne grono chemików zainteresowanych filozoficznymi i metodologicznymi aspektami uprawianej przez nich dyscypliny¹. Swoje stanowisko w tych kwestiach formułują oni nie tylko w pracach poświęconych bezpośrednio filozofii chemii, lecz – nierzadko – także w artykułach naukowych ze swojej dziedziny, a nawet w podręcznikach. Podstawową przyczyną tego stanu

¹ Zagadnienie statusu poznawczego modeli struktur cząsteczek związków chemicznych poddałem analizie w artykule *The Epistemological Status of Theoretical Models of Molecular Structure* [Zeidler(b), 2000].

rzeczy jest, jak sadzę, ciągle otwarty problem statusu metodologicznego chemii, a zwłaszcza jej relacji do fizyki. Jest to problem ważny dla praktyki badawczej chemii. Stosunek chemików do zagadnienia redukcji chemii do fizyki ma istotny wpływ na zajmowane przez nich stanowisko w kwestii poznawczej interpretacji jej wytworów, a także na dokonywanie określonych rozstrzygnięć ontologicznych. Stosunek ten zależy w znacznym stopniu od tego, czy prowadzą oni rozważania teoretyczne, czy prace laboratoryjne.

Niniejszy artykuł jest głosem w dyskusji nad zagadnieniem istnienia orbitali atomowych i molekularnych, a dokładniej – nad koniecznością zakładania ich istnienia, jeśli chce się bronić autonomii chemii i wyjaśnić efektywność jej praktyki laboratoryjnej. Realizacja tego zamierzenia wymaga, chociażby skrótego, wprowadzenia w relewantne do omawianej kwestii zagadnienia molekularnej mechaniki kwantowej. W tym kontekście zrozumiałe staną się argumentacje formułowane na rzecz określonych stanowisk. Zarysowanie własnego poglądu w dyskutowanej kwestii poprzedzę krótką charakterystyką koncepcji, która umożliwi mi powiązanie efektywności praktyki laboratoryjnej chemii z realistyczną postawą eksperymentatorów. Ze względu na ograniczone ramy tego artykułu wiele istotnych kwestii zostanie jedynie zasygnalizowanych.

2. Orbitale atomowe i molekularne w świetle mechaniki kwantowej

Zgodnie z podręcznikowym określeniem orbital jest to funkcja falowa opisująca stan pojedynczego elektronu w atomie lub molekule, zależąca wyłącznie od jego współrzędnych przestrzennych². W zależności od tego, która z sytuacji zachodzi, mówimy odpowiednio o orbitalu atomowym lub orbitalu molekularnym³. Dokładne, analityczne rozwiązanie stacjonarnego elektronowego równania Schrödingera można uzyskać jedynie dla atomu wodoru, a więc układu składającego się z dwóch cząstek – protonu i elektronu. Funkcje falowe dla stanu podstawowego i poszczególnych stanów wzbudzonych atomu wodoru mają jednoznaczną interpretację fizyczną. Kwadrat bezwzględnej wartości funkcji falowej jest interpretowany jako gęstość prawdopodobieństwa znalezienia elektronu w danym miejscu wokół jądra. Dla powszechnego zastosowania orbitali w praktyce badawczej

² Wykorzystałem w tym paragrafie informacje, które można znaleźć w każdym odpowiednio zaawansowanym podręczniku z zakresu molekularnej mechaniki kwantowej. Zobacz np. [Kołos, 1975], [McWeeny, 1987].

³ Pełen opis stanu elektronu uzyskamy wtedy, gdy do funkcji zależnej od współrzędnych przestrzennych dodamy funkcję spinową. Jednoelektronowa funkcja falowa zależna od obu czynników nazywa się spinorbitem.

chemii olbrzymie znaczenie ma ich pogładowa reprezentacja graficzna. Można wykreślić kontury kwadratów bezwzględnych wartości poszczególnych funkcji falowych lub kontury samych funkcji falowych i interpretować je jako rozkłady ładunków wokół jądra atomowego lub – w innym sformułowaniu – „chmury elektronowe” o określonych gęstościach. Uzyskane wykresy mogą stanowić podstawę do budowania modeli materialnych orbitali atomowych, które odgrywają istotną rolę zwłaszcza w dydaktyce chemii.

Jednakże gdy od atomu wodoru przechodzimy do atomów wieloelektronowych i cząsteczek, to pojawiają się problemy obliczeniowe. Nie można bowiem rozwiązać analitycznie w sposób dokładny równania Schrödingera dla układu zawierającego więcej niż dwie cząstki. Chcąc „uratować” pojęcie orbitalu dla atomów wieloelektronowych i dla molekuł, przyjmuje się przybliżenie jednoelektronowe, które umożliwia przypisanie każdemu elektronowi w atomie lub cząsteczce oddzielnej jednoelektronowej funkcji falowej. W przypadku atomów wieloelektronowych zaniehbuje się w hamiltonianie oddziaływania między elektronami i zakłada się, że jest on sumą hamiltonianów jednoelektronowych, a każdy elektron porusza się wokół nieskończenie ciężkiego jądra, w uśrednionym polu wszystkich pozostałych elektronów. Przybliżoną energię stanu podstawowego i funkcję falową można obliczyć, posługując się metodą wariacyjną, opracowaną przez Hartree oraz przez Focka. Jest ona zwana metodą pola samouzgodnionego. Jest to metoda *ab initio*, czyli metoda, w której obliczamy wszystko od początku, nie wprowadzając żadnych parametrów pochodzących z doświadczenia, z wyjątkiem tzw. stałych uniwersalnych, np. ładunku i masy elektronu. W metodzie tej, mówiąc w uproszczeniu, podstawia się funkcję falową o założonej postaci do wyrażenia na energię, a następnie tak długo się ją modyfikuje, aż uzyska się minimum energii stanu podstawowego rozpatrywanego atomu. Jednakże elektrony oddziałują na siebie siłami odpychania kulombowskiego i stan każdego z nich zależy od konfiguracji pozostałych elektronów w atomie. Im więcej elektronów zawiera atom, tym bardziej wartość energii stanu podstawowego, wyznaczona przy założeniu przybliżenia jednoelektronowego, odbiega od wartości wyznaczonej eksperymentalnie. Rezygnacja z przybliżenia jednoelektronowego prowadzi do znacznie dokładniejszych wyników obliczeń różnych wielkości, lecz oznacza zarazem rezygnację z posługiwania się pojęciem orbitalu atomowego, gdyż stan pojedynczego elektronu w atomie nie może być wówczas opisany przez odrębną funkcję falową.

Z jeszcze bardziej skomplikowaną sytuacją mamy do czynienia wtedy, gdy rozpatrujemy stan elektronów w cząsteczkach. Standardowe podejście do tego zagadnienia polega na rozwiązaniu elektronowego równania Schrödingera przy założeniu przybliżenia adiabatycznego, które odseparowuje ruch elektronów od ruchu jąder, oraz przybliżenia Borna-Oppenheimera, które zakłada statyczność jąder, co umożliwia obliczenie energii stanu podstawowego cząsteczki dla określonego położenia jąder, czyli dla określonego kształtu cząsteczki. Przyjęcie powyższych

przybliżeń umożliwia zastosowanie metody orbitali molekularnych, która jest podobna do metody orbitali atomowych, gdyż opiera się na przybliżeniu jednoelektronowym. W celu obliczenia wartości energii stanu podstawowego cząsteczki i wyznaczenia postaci funkcji falowej może być zastosowana metoda pola samouzgodnionego Hartree-Focka. Jedną z kilku metod konstruowania molekularnej funkcji falowej polega na założeniu orbitalu molekularnego w postaci liniowej kombinacji orbitali atomowych. Jest to metoda LCAO (Linear Combination of Atomic Orbitals). W przeciwieństwie do orbitali atomowych, które są jednocentrowe, orbitale molekularne są wielocentrowe, a więc opisują stan elektronu w całej cząsteczce. Przybliżenie jednoelektronowe sprawia, że im „większe” cząsteczki, tym większe są rozbieżności między wynikami uzyskanymi metodami numerycznymi a wynikami uzyskanymi z doświadczenia. Okazuje się, że zastosowanie aproksymacji LCAO w obliczeniach *ab initio* metodą pola samouzgodnionego wymaga, w bardzo wielu przypadkach, mieszania określonych orbitali atomowych danego atomu, co prowadzi do powstania orbitali zhybrydizowanych. Na przykład dla chemii organicznej podstawowe znaczenie przy wyjaśnianiu reaktywności atomu węgla posiadają możliwe typy hybrydizacji jego orbitali atomowych. Lecz hybrydizacja orbitali, jak i sama metoda LCAO, jest tylko matematyczną techniką zastosowaną do obliczania funkcji falowych dla elektronów w cząsteczkach. Znane są inne metody konstrukcji orbitali molekularnych, w których orbitale zhybrydizowane się nie pojawiają. Jednakże pomimo niedokładności wyników wielu obliczeń przeprowadzanych metodą orbitali molekularnych przy użyciu aproksymacji LCAO jest ona bardzo szeroko stosowana. Decyduje o tym zwłaszcza jej pogładowość, gdy wyjaśnia się powstawanie wiązań chemicznych między atomami. W praktyce laboratoryjnej i dydaktyce chemii powszechnie stosowane są reprezentacje graficzne konturów orbitali molekularnych, które mogą być interpretowane jako rozkłady ładunku elektronowego w cząsteczce. Bardzo użyteczne są również diagramy przedstawiające rozkłady poziomów energetyczny w atomach i w cząsteczkach, a także symetrie orbitali molekularnych, które umożliwiają przewidywanie reaktywności cząsteczek określonych związków chemicznych.

Odrzucenie przybliżenia jednoelektronowego sprawia, że niemożliwe staje się przypisanie poszczególnym elektronom określonych funkcji falowych, a tym samym pojęcie orbitalu molekularnego traci sens. Jeszcze większe komplikacje obliczeniowe i interpretacyjne mają miejsce w tych – niezbyt częstych, lecz teoretycznie ważnych – sytuacjach, w których jesteśmy zmuszeni do rezygnacji z przybliżenia Borna-Oppenheimera. Konsekwentne dążenie do adekwatnego reprezentowania sytuacji energetycznej w atomach i cząsteczkach wyraża się w odrzucaniu szeregu przybliżeń, co może skutkować lepszą zgodnością otrzymanych rezultatów z wynikami uzyskanymi w niezwykle dokładnych eksperymentach, lecz prowadzi do odrzucenia bardzo przydatnych i pogładowych metod i pojęć, które umożliwiają zrozumienie reaktywności atomów i cząsteczek, a w konsekwencji mają olbrzymi

wpływ na laboratoryjną praktykę badawczą chemików. Z tego względu nie dziwi spór o status ontologiczny orbitali atomowych i molekularnych, jaki toczy się nie tylko wśród filozofów chemii, lecz także wśród samych chemików.

3. Stanowiska w kwestii statusu ontologicznego orbitali w świetle *naturalnej postawy ontologicznej* Arthura Fine'a

W ramach dyskusji nad stanowiskiem konstruktywnego empiryzmu Basa van Fraassena sformułowano nie tylko wiele krytycznych uwag pod jego adresem, lecz także opracowano kilka koncepcji, proponujących nowe spojrzenie na zagadnienie realizmu naukowego. Twórcą jednej z nich jest Arthur Fine, który określił ją mianem „naturalnej postawy ontologicznej” [Fine, 1984]. Fine wyróżnił dwa sposoby prowadzenia sporu realizm–antyrealizm: globalny i lokalny. Filozofowie nauki formułujący argumenty za lub przeciw prawdziwości naszych teorii lub opowiadający się w określony sposób w kwestii statusu ontologicznego bytów postulowanych przez naukę uczestniczą w sporze globalnym⁴. Fine podważa sensowność jego prowadzenia, uznając, że tak jak filozof nie może uzasadnić skuteczności indukcji, tak nie może uzasadnić przekonania, że nasze teorie są bądź nie są prawdziwe albo że istnieją bądź nie istnieją postulowane przez nie przedmioty. W miejsce odrzuconego globalnego sporu o realizm proponuje przyjęcie *naturalnej postawy ontologicznej* (w skrócie: NOA – Natural Ontological Attitude). Postawa ta nakazuje akceptować postulaty ontologiczne nauki na równi z postulatami zdrowego rozsądku. Kwestia statusu ontologicznego bytów postulowanych przez nasze teorie może być rozstrzygana jedynie w odniesieniu do tych teorii, a więc nabiera charakteru lokalnego. To w ramach badań prowadzonych w danej dziedzinie nauki dokonuje się racjonalnych rozstrzygnięć ontologicznych, które – wraz z ewentualną zmianą naszej wiedzy – również mogą ulec zmianie. Z NOA wielką nadzieję wiązali ci wszyscy, którzy byli już mocno zniechęceni niekonkluzywnością filozoficznych debat, jakie realiści wiedli z antyrealistami⁵. Choć Fine uznał za niecelowe dalsze ich prowadzenie, realiści uważali, że lokalne rozstrzygnięcia ontologiczne, podejmowane w ramach NOA, prowadzą zazwyczaj do konkluzji zgodnych z intencjami ontologicznych realistów globalnych.

⁴ W globalnym sporze o realizm uczestniczył także Władysław Krajewski, opowiadając się za stanowiskiem realizmu krytycznego. Zobacz [Krajewski, 1995, s. 79-83]. Jednakże dla Krajewskiego zawsze kluczową rolę odgrywały rozstrzygnięcia poznawcze i ontologiczne, które były konsekwencją analizy praktyki badawczej uczonych. Dlatego sędzę, że *naturalna postawa ontologiczna* Fine'a była bliska jego poglądom.

⁵ Zobacz np. artykuł A. Musgrave'a pod znanym tytułem *Noa's Ark – Fine for Realism* [1989].

Krytyka koncepcji Fine'a wiązała się przede wszystkim z jej enigmatycznością, będącą konsekwencją wieloznaczności jej podstawowych pojęć oraz sformułowań. Dotyczyło to zwłaszcza sposobu rozumienia, kluczowego w tej koncepcji, pojęcia „naturalności”. Jednakże również podstawowa, w opinii zwolenników NOA, jej zaleta, za którą uchodzi przyjmowanie rozstrzygnięć ontologicznych w odniesieniu do konkretnych wytworów praktyki badawczej, prowadzi do poważnych trudności. Wskażę na niektóre z nich, odwołując się do przykładu orbitali⁶.

Rozstrzygnięcie sporu o status ontologiczny orbitali w ramach NOA jest uwiłkane w problem interpretacji mechaniki kwantowej, który ma, zgodnie z koncepcją Fine'a wymiar lokalny. Na przykład dla zwolenników interpretacji kopenhaskiej zarówno dokładne opisy stanów energetycznych atomów i cząsteczek, zgodne z zasadami mechaniki kwantowej, jak i ujęcia oparte na licznych przybliżeniach, np. w metodzie orbitali atomowych i molekularnych, są jedynie lepszymi bądź gorszymi, w sensie zgodności z wynikami eksperymentów, instrumentalnie interpretowanymi modelami. Jednakże według zwolennika jakiejś wersji realistycznej interpretacji mechaniki kwantowej modele te mogą reprezentować zjawiska zachodzące w mikroświecie. Tak więc rozstrzygnięcie problemów ontologicznych danej dziedziny nauki w ramach racjonalnej analizy jej praktyki badawczej nie zawsze jest konkluzywne, jak mniemał autor NOA.

Z punktu widzenia praktyki badawczej chemii kwestia przyjęcia określonej interpretacji mechaniki kwantowej jest często wiązana z problemem redukcji chemii do fizyki. Formułowana jest opinia, że instrumentalistyczna interpretacja, a tym samym instrumentalistyczna interpretacja szeregu pojęć chemii zdefiniowanych w aparacie pojęciowym molekularnej mechaniki kwantowej, sprzyja akceptacji tezy, zgodnie z którą jest ona redukowalna do mechaniki kwantowej. W zależności od sposobu rozumienia relacji redukcji teza ta występuje w różnych wariantach, których – ze względu na ograniczone ramy tego artykułu – nie możemy poddać szczegółowej analizie. Przeciwno powyższej argumentacji występują zwolennicy autonomii chemii, którzy zauważają, że wiele kluczowych pojęć chemii nie może być w sposób zadowalający zdefiniowanych na gruncie mechaniki kwantowej, a przecież ich stosowanie decyduje o eksplanacyjno-przewidywanych, a przede wszystkim laboratoryjnych sukcesach chemii. Odnosi się to również do takich pojęć, jak orbitale atomowe, orbitale molekularne czy orbitale zhybrydizowane⁷. Jeśli więc zastosować argument z sukcesu nauki i wykorzystać zasadę wnioskowania prowadzącego do najlepszego wyjaśnienia, to należy przyjąć ich realistyczną interpretację.

⁶ Niektóre problemy związane ze stosowaniem NOA wskazała Sharon Crasnow w artykule *How Natural Can Ontology Be?* [2000, s. 114-132]. Zwróciła ona również uwagę na to, że trudno zrozumieć, dlaczego Fine uznaje NOA za stanowisko filozoficzne.

⁷ Zestawienie różnych opinii w tej kwestii można znaleźć w: [van Brakel, 2000(a), s. 137].

Jeżeli jednak założymy się, jak to czyni wielu fizyków, a także chemików teoretyków, że modele budowane zgodnie z zasadami mechaniki kwantowej i potwierdzone przez bardzo dokładne wyniki eksperymentów są bardzo dobrymi aproksymacjami rzeczywistych sytuacji zachodzących w mikroświecie, to należy uznać, że orbitale, które na ogół nie spełniają tych warunków, nie powinny być interpretowane realistycznie. Do zwolenników powyższego stanowiska należy J. Ogilvie, który zdecydowanie opowiada się przeciwko realistycznej interpretacji orbitali. Jego zdaniem można sformułować co najmniej trzy poważne argumenty uzasadniające to stanowisko [Ogilvie, 1990, s. 280-289]. Mechanika kwantowa stwarza możliwości precyzyjnego obliczenia energii stanu podstawowego wielu cząsteczek bez zastosowania metody LCAO. Jeśli przyjmie się, że cząsteczki nie mogą być opisywane jako kolekcje powiązanych ze sobą atomów, gdyż są autonomicznymi bytami, to nie możemy konstruować funkcji falowej z oddziałujących ze sobą orbitali atomowych. Jak stwierdza autor jednego z kompetentnych opracowań molekularnej mechaniki kwantowej: „należy pamiętać, że poszczególne wyrazy przybliżenia LCAO nie odpowiadają obiektywnej rzeczywistości i są tylko wynikiem naszych prób skonstruowania funkcji falowych łatwych do przedstawienia poglądowego, lecz nie całkiem dokładnych” [McWeeny, 1987, s. 99]. Drugi argument jest wprost wymierzony w przybliżenie jednoelektronowe, gdyż poszczególne elektrony w atomie lub cząsteczce nie mogą być w żaden sposób wyróżnione. Na przykład w cząsteczce metanu wszystkie elektrony są „ze względów zasadniczych identyczne i nieodróżnialne” [Ogilvie, 1990, s. 283]. Będąca konsekwencją obliczeń dokonywanych w ramach metody orbitali molekularnych hybrydyzacja orbitali atomowych, np. orbitali atomu węgla w cząsteczce metanu, prowadzi do konstrukcji zwanych orbitalami zhybrydyzowanymi, których nie można interpretować realistycznie. Jak podkreśla autor innego podręcznika: „Hybrydyzacja jest również tylko pojęciem matematycznym. [...] Można jednak orbital molekularny przedstawić również jako kombinację liniową nie orbitali atomowych, lecz innych funkcji, i wtedy pojęcie hybrydyzacji albo zmieni sens, albo też nawet w ogóle nie wystąpi” [Kołos, 1975, s. 136-137].

Trzeci argument wymierzony w realistyczne interpretowanie orbitali wiąże się z obecnym już w argumencie pierwszym określonym ujęciem cząsteczki jako przedmiotu badań. Podejście do cząsteczki powinno być holistyczne, a jeśli już wyróżniać jakieś jej składniki, to powinny nimi być jądra i elektrony, a nie atomy i orbitale atomowe. Atomy nie są obecne w cząsteczce jako atomy. Nie ma sensu wyjaśniać zachowania się układu przez odwołanie do przedmiotów, które nie są jego częściami [Ogilvie, 1990, s. 287].

Ogilvie reprezentuje tę grupę chemików teoretyków, którzy uważają, że z wymienionych powyżej względów należy zrezygnować z posługiwania się metodą orbitali atomowych i molekularnych, gdyż nie do przyjęcia jest przede wszystkim przybliżenie jednoelektronowe. Drugą grupę reprezentują między innymi autorzy

cytowanych podręczników, którzy podkreślają, że postulowane w metodach orbitali atomowych i molekularnych byty są jedynie konstrukcjami matematycznymi, które nie pojawiają się w obliczeniach prowadzonych za pomocą innych metod. Nie sposób więc interpretować tych konstrukcji realistycznie, choć nie można zaprzeczyć ich bardzo dużej użyteczności praktycznej. Skoro orbitale nie mogą być „poprawnie” zdefiniowane na gruncie mechaniki kwantowej, to nie można mówić o ich redukcji do mechaniki kwantowej w ścisłym sensie. Chemia zachowuje zatem pojęciową autonomię, co jednakże nie oznacza, że orbitale muszą być interpretowane realistycznie.

Zgodnie z podejściem do zagadnień ontologii zaproponowanym w ramach NOA należy stwierdzić, że z punktu widzenia uczonych należących do wymienionych grup badaczy orbitale są jedynie konstruktami matematycznymi, które nie reprezentują żadnej „realności” mikroświata. Jednakże słabość metafizycznej propozycji Fine’a polega na tym, że w zależności od sposobu zaangażowania w praktykę badawczą danej dziedziny nauki, przyjęte rozstrzygnięcia ontologiczne mogą być odmienne. I tak, z punktu widzenia praktyki laboratoryjnej chemii oraz dydaktyki chemii na wszystkich poziomach jej zaawansowania racjonalne wydaje się przyjęcie względem orbitali postawy realistycznej⁸. Spróbuję naświetlić to zagadnienie w ostatnim paragrafie.

4. Czy założenie o istnieniu orbitali jest konieczne w celu wyjaśnienia efektywności praktyki laboratoryjnej chemii?

Próbując odpowiedzieć na tytułowe pytanie tego paragrafu, należy wybrać określoną koncepcję, w ramach której będzie ono analizowane⁹. Odwołam się do propozycji Anny Pałubickiej, która wyróżniła dwa odmienne sposoby myślenia prezentującego, a *de facto* – konstruującego świat: spontaniczno-praktyczne i metafizyczno-teoretyczne [Pałubicka, 2006, s. 45]¹⁰. To pierwsze konstytuuje się w trakcie „radzenia sobie” ze światem w procesie pierwotnej socjalizacji. Jest ono nakierowane na pożytek osoby działającej i ściśle wiąże się z działaniem w tym sensie, że „o wszystkim, co otacza, myśli się w sposób narzędziowy: do czego” [s. 46]. Jest więc ono *nacechowane* aksjologicznie. Myślenie spontaniczno-praktyczne,

⁸ Ze względu na wspomniany już kilkakrotnie brak miejsca nie uwzględniłem bardzo ważnych dla prowadzonej dyskusji artykułów: Jenkinsa [2003, s. 1052-1062], Hendry’ego [1995, s. 123-142] oraz Woody’ego [2000, s. 612-627].

⁹ Zagadnienia związane z podnoszonym w tym paragrafie problemem analizowałem także w artykule *Homo experimentator a spór o realizm laboratoryjny* [Zeidler, 2003, s. 122-128].

¹⁰ Wykorzystywany przeze mnie podział sposobów myślenia posiada, na gruncie koncepcji autorki, rozbudowane uzasadnienie filozoficzne. Zobacz [Pałubicka, 2006].

a ogólniej – praktyczne, jest tak mocno zniewolone przedmiotowością, „iż staje się źródłem żywionego potocznie w perspektywie praktycznej przekonania o istnieniu rzeczywistości obiektywnej samej w sobie” [s. 49]. Przekonanie to jest zwyczajowo nazywane realizmem naiwnym i powszechnie uważane za nierozłącznie związane ze zdroworozsądkowym nastawieniem do świata. Gwarantuje ono skuteczność myślenia praktycznego. Drugi typ myślenia – metafizyczno-teoretyczny – kształtuje się i wyodrębnia wraz z narodzinami filozofii. Jest to myślenie abstrakcyjne, czysto pojęciowe, aksjologicznie neutralne, charakterystyczne przede wszystkim dla różnych teoretycznych dziedzin nauki. Jeśli w ramach tego myślenia następuje uprzedmiotowienie, to nie musi się ono wiązać z postawą realizmu metafizycznego. Należy jednakże zauważyć, że myślenie metafizyczno-teoretyczne stanowi podstawę pewnego typu myślenia praktycznego, a mianowicie myślenia aplikacyjno-praktycznego [s. 49]. Na przykład wytwory myślenia teoretycznego fizyki i chemii stanowią podstawę myślenia sterującego praktyką laboratoryjną chemii. Aby to myślenie okazało się manipulacyjnie skuteczne, nie tylko wytwory myślenia teoretycznego muszą uzyskać postać wyobraźniową, lecz także związane z tym myśleniem uprzedmiotowienie stosowanego aparatu pojęciowego powinno nabrać charakteru realistycznego. Przyjęte rozróżnienia pojęciowe dobrze tłumaczą odnotowany już w tym artykule fakt, iż na gruncie rozważań teoretycznych z zakresu molekularnej mechaniki kwantowej tworzone pojęcia traktowane są albo instrumentalnie, albo ich odniesieniom przedmiotowym przypisuje się wyłącznie charakter bytów postulowanych. Natomiast gdy chemicy wykorzystują te pojęcia w pracy laboratoryjnej, to interpretują je realistycznie, choć – przynajmniej niektórzy z nich – mają świadomość, że na gruncie teorii taka interpretacja jest nieuprawniona.

Wydaje się, że zarysowana powyżej propozycja umożliwi analizę problemu statusu ontologicznego orbitali w nowym świetle. Orbitale wszystkich rozważanych typów są wytworami myślenia teoretycznego, uzyskanymi przy założeniu przybliżeń niezgodnych z niektórymi przynajmniej postulatami mechaniki kwantowej. Choć orbitale rozumiane jako odpowiednie funkcje falowe posiadają swoje reprezentacje graficzne, to przywołani w poprzednim paragrafie chemicy teoretycy upominają, że nie należy ich interpretować realistycznie, gdyż są one jedynie konstrukcjami matematycznymi. Dodatkowym uzasadnieniem tego przekonania jest to, że podstawowy – z punktu widzenia teorii – wynik, tzn. energia stanu podstawowego cząsteczki, może być uzyskany bez posługiwania się tym pojęciem, a co więcej, będzie to w wielu przypadkach wynik lepszy, gdyż bliższy temu, który został otrzymany w eksperymencie.

Wysuwane ze strony myślenia teoretycznego zastrzeżenia dotyczące metody orbitali atomowych i molekularnych są ignorowane przez chemików laboratoryjnych, dla których kluczowe znaczenie posiada olbrzymia moc przewidzyczna i wyjaśniająca diagramów będących wyobraźniową reprezentacją orbitali.

Zauważmy, że ze znaków symbolicznych, jakimi są orbitale rozumiane jako funkcje falowe, stają się one znakami ikonicznymi. Można skutecznie posługiwać się tymi diagramami, nie znając ich matematycznej podstawy. Są więc one skutecznymi, gdyż poręcznymi narzędziami myślenia aplikacyjno-praktycznego, do których stosowania wdraża się chemików od początku procesu dydaktycznego. Ich myślenie nabiera więc cech myślenia spontaniczno-praktycznego i nie może dziwić fakt, że nie tylko uprzedmiotawiają orbitale, lecz również są skłoni uznawać je za realnie istniejące byty. Co z tego, że w ramach myślenia teoretycznego znajduwane są metody dokładnego rozwiązania równania falowego Schrödingera, w których nie tylko rezygnuje się z przybliżenia jednoelektronowego, lecz także z przybliżeń: adiabaticznego i Borna-Oppenheimera, a nawet uwzględnia się poprawki relatywistyczne, skoro nie można z nimi związać żadnych wyobrażeń umożliwiających zrozumienie właściwości cząsteczek związków chemicznych.

Oczywiście „poręczność” reprezentacji wyobraźniowych orbitali atomowych i molekularnych nie wyjaśnia w pełni tego, że są one skutecznymi narzędziami działania w praktyce laboratoryjnej chemii. Uznając orbitale za pewnego typu modele teoretyczne, należy poddać analizie ich zawartość informacyjną, która umożliwia im pełnienie takiej właśnie roli w rozwiązywaniu konkretnych problemów laboratoryjnej praktyki badawczej. Jest to jednak zagadnienie wymagające omówienia w odrębnym artykule.

VIII

Czy można zaobserwować orbitale? O problemie obserwowalności i realności przedmiotów teoretycznych

1. Wstęp

2 września 1999 roku ukazał się 401. numer prestiżowego czasopisma naukowego „Nature”, zawierający doniesienie o dokonaniu ważnego odkrycia naukowego. O znaczeniu, jakie przypisali mu redaktorzy numeru, świadczyło zarówno umieszczenie na jego okładce zdjęcia, przedstawiającego wyraźnie widoczne kontury rozkładu gęstości ładunku bardzo podobne do podręcznikowych przedstawień orbitalu $3d_z^2$ dla atomu wodoru, a także wybity – powiększoną i wytłuszczoną czcionką – tytuł, który komunikował, iż orbitale zostały zaobserwowane. Niezależnie od artykułu naukowego, w którym opisano przeprowadzone eksperymenty¹, zamieszczony został odredakcyjny artykuł wstępny, którego autor twierdził, że „po raz pierwszy w dziejach nauki zaobserwowano, i to w sposób bezpośredni, orbitale atomowe”². Tym samym orbitale, które wcześniej uważano za nieobserwowalne konstrukty teoretyczne, stały się – w opinii autorów obu artykułów – przedmiotami obserwowalnymi, co definitywnie rozstrzygało problem ich fizycznej realności.

Można by zatem uznać, że pytanie postawione w tytule niniejszego artykułu jest retoryczne, skoro czasopismo „Nature”, cieszące się w środowisku naukowym bardzo dużą renomą i stosujące niezwykle wysokie wymagania w odniesieniu do publikowanych prac naukowych, nadało tak doniosłą rangę wynikom badań

¹ Artykuł J. M. Zuo i współpracowników nosi tytuł *Direct observation of d-orbital holes and Cu-Cu bonding in Cu₂O* [Zuo i in., 1999, s. 49-52].

² Artykuł C. Humphreysa ma wielce wymowny tytuł: *Elektrons seen in orbit* [Humphreys, 1999, s. 21-22].

eksperymentalnych, uzyskanym przez grupę badaczy pod kierunkiem J. M. Zuo. Jednakże Eric Scerri, redaktor naczelny czasopisma „Foundations of Chemistry”, przesłał do redakcji „Nature” list, w którym wyraził wątpliwości, czy rezultaty dokonanych obserwacji zostały prawidłowo zinterpretowane. Jego zdaniem sposób konstrukcji orbitali atomowych i molekularnych wyklucza, niejako z definicji, możliwość ich zaobserwowania, co sprawia, że obserwowane rozkłady ładunków nie mogą być utożsamiane z odpowiednimi orbitalami³. Redakcja czasopisma „Nature” nie zdecydowała się na publikację listu, co spowodowało, że Scerri przedstawił swoje zastrzeżenia w artykułach zamieszczonych na łamach innych czasopism⁴.

Moim zamierzeniem jest ustosunkowanie się do kontrowersji powstałej w związku z interpretacją wyników badań eksperymentalnych uzyskanych przez J. M. Zuo i jego współpracowników. W tym celu poddam analizie pojęcie obserwowalności, które jest przydatne z punktu widzenia praktyki doświadczalnej współczesnych nauk przyrodniczych, omówię rozróżnienie obserwacji na bezpośrednią i pośrednią oraz zagadnienie teoretycznego i informacyjnego obciążenia obu typów obserwacji. W świetle dokonanych ustaleń rozważę kwestię obserwowalności i realności różnego typu przedmiotów teoretycznych postulowanych w nauce.

W filozoficznej refleksji nad nauką pojęcie *obserwowalności* było już wielokrotnie analizowane, lecz termin „obserwacja”, a zwłaszcza „obserwacja bezpośrednia”, jest przez samych uczonych używany w sposób dość niefrasobliwy, co prowadzi do różnych nieporozumień. Doszło do nich w dyskutowanym przypadku *bezpośredniego zaobserwowania* orbitali atomowych i molekularnych. Ich rozjaśnienie będzie przedmiotem drugiej części artykułu. W jego trzeciej części krótko omówię podstawowe założenia teoretyczne, które umożliwiają posługiwanie się *orbitalami* w opisie układów wieloelektronowych, by w kolejnej części podjąć problem interpretacji wyników badań eksperymentalnych uzyskanych przez J. M. Zuo i współpracowników, a tym samym odpowiedzieć na pytanie sformułowane w tytule artykułu. W ostatniej części artykułu rozważę niektóre metodologiczne aspekty możliwych rozwiązań sporu o status ontologiczny orbitali.

2. O problemie obserwowalności i realności przedmiotów teoretycznych

W filozofii nauki dość długo pokutowało przekonanie przeciwstawiające przedmioty teoretyczne przedmiotom obserwowalnym. Te pierwsze były rozumiane

³ W 2000 roku doniesiono o zaobserwowaniu orbitali molekularnych. Zobacz [Pascual i in. 2000, s. 78-82].

⁴ Zobacz [Scerri 2000(b), s. 1-3; 2001, s. 76-88].

jako nieobserwowalne przedmioty postulowane przez teorie naukowe. Przekonanie to było ugruntowane w – dokonanym przez neopozytywistów – podziale terminów na obserwacyjne i teoretyczne. Przyjmowali oni, że terminy obserwacyjne są interpretowane przez przedmioty obserwowalne, a terminy teoretyczne uznawali za niezinterpretowane semantycznie albo zakładali, że odnoszą się do przedmiotów nieobserwowalnych. Nieobserwowalność przedmiotów postulowanych przez teorie naukowe prowadziła do kontrowersji dotyczących ich realności, gdyż to obserwowalność była uznawana za podstawowe kryterium istnienia.

Powyższe przekonanie poddał krytyce Grover Maxwell, który sformułował szereg argumentów na rzecz tezy, że obserwowalność nie może być uznana za rozstrzygające kryterium fizycznej realności [Maxwell, 1962, s. 3-27]. Zakres przedmiotów i zjawisk, które uznajemy za obserwowalne, ulega w nauce ciągłej zmianie wraz z rozwojem badań naukowych i technologii, a próby sformułowanie kryterium, które umożliwiłoby oddzielenie tego, co obserwowalne, od tego, co nieobserwowalne, uznał za bezsensowne. Przynajmniej niektóre przedmioty postulowane przez teorie naukowe mogą z czasem stać się pośrednio, a nawet bezpośrednio obserwowalne. Uważał również, że niemożność zaobserwowania przedmiotów, która jest spowodowana ich niewielkimi wymiarami, nie może być podstawą odmawiania im realności fizycznej, jeśli są one przedmiotami tego samego typu co przedmioty obserwowalne⁵. Dlatego *obserwowalność*, a zwłaszcza *obserwowalność bezpośrednia*, nie może być traktowana jako mocne kryterium istnienia przedmiotów postulowanych przez teorie naukowe, co nie zmienia faktu, że rezultaty szeroko rozumianej obserwacji naukowej są uznawane przez badaczy za istotne przesłanki na rzecz akceptacji bądź odrzucenia hipotez egzystencjalnych.

Wydaje się, że dla analizy praktyki badawczej współczesnego przyrodoznawstwa przydatny sposób rozumienia terminu „obserwacja bezpośrednia” zaproponował Dudley Shapere [1982, s. 487]. Obserwacji bezpośredniej dokonujemy – jego zdaniem – wtedy, gdy: a) *receptor (zmysłowy bądź instrument) odbiera informację od przedmiotu obserwowanego*; b) *odbiór informacji następuje bezpośrednio, tzn. bez zakłóceń*. Do tak rozumianej *obserwacji bezpośredniej* odnosi się, zwłaszcza wtedy gdy receptorem jest instrument pomiarowy, teza o jej teoretycznym obciążeniu, która dotyczy wszystkich elementów składowych obserwacji ujętej jako proces przekazywania informacji. Opis procesu przekazywania informacji za pomocą sygnału, zgodnie z klasyczną teorią komunikacji C. Shannona i W. Weavera, zakłada znajomość teorii źródła wysyłającego sygnał, teorii ośrodka, przez który on przebiega, a który może być źródłem szumów, oraz teorii odbiorcy –

⁵ Z przeprowadzonej krytyki obserwowalności jako kryterium istnienia Maxwell wyprowadził skrajnie realistyczny wniosek. Twierdził on, że wszystkie przedmioty postulowane przez empirycznie potwierdzone teorie naukowe należy uznać za fizycznie realne [Maxwell, 1962, s. 9].

rejestratora sygnału, tj. aparatu percepcyjnego człowieka lub instrumentu pomiarowego. Shapere, w kilku kolejnych artykułach, analizował bardzo wnikliwie rolę tzw. informacji podstawowych (*background information*), bez których obserwacja bezpośrednia nie byłaby możliwa⁶. Jego koncepcja informacji podstawowych znacznie wykracza poza klasyczną koncepcję *obciążenia teoretycznego* obserwacji, gdyż obejmuje nie tylko zakładaną wiedzę teoretyczną, odnoszącą się do wszystkich składowych procesu przekazywania informacji, lecz także wiedzę zdobytą w trakcie wcześniejszej praktyki eksperymentalnej. Shapere związał swoją koncepcję obserwacji z procesem percepcji i przeciwstawił ją podejściu, które ujmuje obserwację naukową w kontekście uzyskiwania ewidencji empirycznej dla teorii naukowych.

Aby odpowiedzieć na tytułowe pytanie tego artykułu, skoncentruję się na analizie samego procesu obserwacji naukowej, a więc odwoływać się będę do koncepcji obserwacji bezpośredniej Shapere'a. Sądzę jednakże, iż jest ona zbyt szeroka i nie pozwala ukazać istotnych różnic, jakie zachodzą między różnego rodzaju obserwacjami naukowymi. Dlatego proponuję jej zawężenie, wykorzystując w tym celu koncepcję obserwacji pośredniej Giovanniego Boniolo [Boniolo, 2000, s. 187; 2007, s. 77-80]⁷. Na przykład za wielkość obserwowaną bezpośrednio uznaję długość fal w widmie uzyskanym dzięki zastosowaniu metody spektroskopii w podczerwieni, lecz wartości takich wielkości, jak np.: częstotliwości drgań odpowiednich wiązań w cząsteczce, długości określonych wiązań lub kąty między wiązaniami, będę uważał za pośrednio obserwowalne. Nie są one bowiem bezpośrednio rejestrowane w metodzie spektroskopii w podczerwieni, lecz są wyznaczane z odpowiednich równań, do których podstawiono wyniki obserwacji bezpośrednich (długości fal) i wartości pewnych stałych, które wchodzi w skład informacji podstawowych. Wielkości, których wartości są uzyskiwane w powyżej opisany sposób, będę nazwał *pośrednio obserwowalnymi*. Pośrednia obserwowalność jest stopniowalna, gdyż zależy od złożoności przeprowadzonych wnioskowań i obliczeń. Gdy z rezultatów obserwacji bezpośrednich wnioskujemy o właściwościach przedmiotów postulowanych przez teorie naukowe, to odwołujemy się nie tylko do złożonej wiedzy teoretycznej, lecz wykorzystujemy także różnorodne informacje

⁶ Zobacz na ten temat [Shapere, 1982, s. 485-525], [Shapere, 1985, s. 26-29], a zwłaszcza [Shapere, 2000, s. 153-164].

⁷ G. Boniolo posługuje się zwrotem „observability by inference”, który należałoby tłumaczyć jako „obserwowalność przez wnioskowanie”. Sformułowanie to brzmi jednakże co najmniej niezręczne i dlatego będę używał zwrotu „obserwowalność pośrednia”. W kontekście niniejszych rozważań termin ten nie będzie zatem oznaczał obserwacji przedmiotu teoretycznego dokonanej za pomocą odpowiednich przyrządów, lecz będzie odnosił się do stwierdzenia właściwości przedmiotu teoretycznego, która została wywnioskowana z wyników obserwacji bezpośredniej w sensie Shapere'a. Oczywiście „to, co jest obserwowalne dzisiaj pośrednio, jutro może być obserwowalne bezpośrednio” [Boniolo, 2007, s. 79].

podstawowe [Boniolo, 2007, s. 77-80]⁸. Na przykład wnioskując o właściwościach cząsteczek związków chemicznych z ich widm w podczerwieni, musimy, obok szeregu założeń teoretycznych, dysponować informacjami dotyczącymi między innymi: charakterystyki zastosowanego promieniowania, właściwości użytego rozpuszczalnika, grubości kuwety, stopnia czystości próbki itp. Wykorzystanie tych i innych informacji oraz odpowiednich praw jest niezbędne, gdy na podstawie zarejestrowanego widma w podczerwieni stwierdza się występowanie określonego typu drgań odpowiednich wiązań w cząsteczkach związku chemicznego, a na tej podstawie z kolei wnioskuje się o obecności określonych grup funkcyjnych, długości odpowiednich wiązań i kątach między wiązaniami⁹. Dopiero te dane, wraz z wynikami innych eksperymentów, umożliwiają postawienie hipotezy egzystencjalnej, mówiącej o istnieniu cząsteczek o określonym składzie i strukturze¹⁰. Można zatem powiedzieć, że obserwacja cząsteczek danego związku chemicznego za pomocą metody spektroskopii w podczerwieni ma bardzo pośredni charakter, gdyż bazuje na szeregu wnioskowań i operacji matematycznych.

Shapere objaśniał pojęcie *obserwacji bezpośredniej* na przykładzie obserwacji wnętrza Słońca za pomocą neutronów. Różni się ona od przykładu pośredniej obserwacji składu i struktury cząsteczek związków chemicznych. W przypadku obserwacji bezpośredniej w sensie Shapere'a zakładana wiedza teoretyczna nie dotyczy przedmiotów obserwowanych, tzn. koncepcje teoretyczne odnoszące się do tych przedmiotów nie wpływają na rezultat obserwacji. W przypadku obserwacji pośredniej taki wpływ ma miejsce. Rejestracja widma w podczerwieni nie wymaga znajomości teorii budowy cząsteczek, lecz gdy w oparciu o obserwowane bezpośrednio długości fal wyznaczamy na przykład długości wiązań w cząsteczce, to wówczas od przyjętego modelu budowy cząsteczki związku chemicznego zależy sposób definiowania długości wiązania, a tym samym uzyskane wartości tej wielkości.

W kontekście prowadzonych rozważań nad obserwowalnością należy przeanalizować praktykę uczonych w zakresie uznawania przedmiotów teoretycznych za fizycznie realne. Bez wątpienia, gdy w naukach przyrodniczych stawia się pytanie o istnienie przedmiotów postulowanych przez teorie naukowe lub chociażby przedmiotów postulowanych przez prawa eksperymentalne i prawa przyczynowe, to ma się na myśli ich istnienie fizyczne. Jednakże pojęcia „realności fizycznej” i „istnienia fizycznego” są, jak zauważył Ernest Nagel, notorycznie niejasne

⁸ Wskazanie na istotną rolę informacji podstawowych w procesie obserwacji łączy koncepcje obserwacji bezpośredniej Shapere'a i obserwacji pośredniej Boniolo.

⁹ Zobacz np. [Silverstein, Webster, Kiemle, 2007]. Metodologiczno-epistemologiczne problemy związane z budową spektrometrów, zasadami wykonywania za ich pomocą pomiarów oraz odczytem i interpretacją wyników omówiono w: [Rothbart, Slayden, 1999, s. 111-126].

¹⁰ W praktyce badawczej chemii, gdy stawia się hipotezy egzystencjalne, to dookreśla się warunki termodynamiczne, w których cząsteczki danego związku są trwałe.

[Nagel, 1970, s. 136-141]. W praktyce badawczej nauk przyrodniczych ta niejasność wyraża się poprzez kontrowersje dotyczące mocy uzasadniającej, jaką dla tez egzystencjalnych mają poszczególne kryteria istnienia. Na kryteria te nakłada się warunek efektywności, co oznacza, że mają one pozwalać na rozstrzygnięcie w skończonej liczbie kroków, czy specyfikujące je warunki są w poszczególnych sytuacjach spełnione. Nie wymaga się natomiast, aby konstytuujące te kryteria metody uzasadniania istnienia były niezawodne¹¹.

Nie ulega wątpliwości, że obserwacja bezpośrednia jest uważana w nauce za mocne kryterium fizycznej realności. Jest tak zwłaszcza wówczas, gdy można dokonywać obserwacji przedmiotów tego samego rodzaju za pomocą różnych technik obserwacji. Jest to tzw. *argument z koincydencji*, stosowany zwłaszcza wówczas, gdy uzasadniamy realne istnienie przedmiotów mikroskopowych, które nie są obserwowalne *gołym okiem*. Zagadnienie to szczegółowo analizował Ian Hacking na przykładzie obserwacji dokonywanych za pomocą różnych technik obserwacji mikroskopowej [Hacking, 1983, s. 186-209]¹². Niewątpliwie do poważniejszych kontrowersji dochodzi wówczas, gdy uzasadnia się istnienie przedmiotów teoretycznych w oparciu o rezultaty obserwacji pośrednich. Im bardziej złożone są wnioski prowadzące od danych uzyskanych z obserwacji bezpośredniej do rezultatów obserwacji pośredniej, tym bardziej są one teoretycznie i informacyjnie obciążone. Powoduje to, że hipotezy egzystencjalne formułowane na podstawie obserwacji pośrednich łatwiej jest kwestionować. Jednakże analiza praktyki badawczej nauk laboratoryjnych, chociażby w zakresie – omawianej już w tym artykule – identyfikacji cząsteczek związków chemicznych, wykazuje, że obserwacja pośrednia odgrywa kluczową rolę w zakresie uzasadniania hipotez egzystencjalnych.

Można powiedzieć, precyzując dotychczasowe rozważania odnoszące się do praktyki stawiania i uzasadniania hipotez egzystencjalnych w nauce, że eksperci z danej dziedziny wiedzy określają zbiór wartości parametrów jakościowych i ilościowych, które powinny charakteryzować indywidua, aby można je były uznać za przedmioty danego typu. To, że wartości tych parametrów są ustalane w oparciu o obserwacje bezpośrednie i pośrednie, sprawia, iż przedmioty te są traktowane przez badaczy jako fizycznie realne. Są jednak filozofowie nauki, którzy uznają za niewystarczający powyższy sposób przypisywania fizycznej realności przedmiotom teoretycznym.

Hacking, analizując moc uzasadniającą wyników różnego typu eksperymentów naukowych w odniesieniu do tez egzystencjalnych, podzielił wszystkie

¹¹ Metodologiczne problemy kryteriów istnienia przedmiotów teoretycznych omówiła M. Czarnocka w książce *Kryteria istnienia w naukach przyrodniczych* [1986].

¹² Hacking wskazywał na powody, dla których argument z koincydencji nie jest niezawodny, a zarazem przekonywał, że jego moc uzasadniająca wzrasta, gdy obserwacja ma charakter aktywny, tzn. gdy manipulujemy przedmiotem obserwowanym.

eksperymenty na dokonywane na przedmiocie badanym (obserwacje bezpośrednie i pośrednie) oraz eksperymenty polegające na manipulowaniu przedmiotem teoretycznym. Zdaniem autora *Representing and Intervening* te drugie posiadają znacznie większą moc uzasadniającą [Hacking, 1983, s. 262-275]. Uważa on na przykład, że dopiero dzięki temu, iż manipulując wiązką elektronów byliśmy w stanie wytworzyć nowe zjawiska, mamy wystarczająco mocne podstawy, by sądzić, że elektrony istnieją¹³.

Problem realności przedmiotów teoretycznych postulowanych w nauce rozpatrywany jest często w kontekście potwierdzenia empirycznego praw, w których występują terminy mające denotować te przedmioty [Nagel, 1970, s. 136-140]. Twierdzi się na przykład, że każdy pozalogiczny termin występujący w przyjętym prawie (eksperymentalnym lub teoretycznym) denotuje coś fizycznie realnego, pod warunkiem, że prawo to jest dobrze empirycznie potwierdzone. Bozon Higgsa jest postulowany przez model standardowy cząstek elementarnych. Wyniki niektórych eksperymentów potwierdzają poprawność tego modelu, a tym samym uzasadniają hipotezę egzystencjalną mówiącą o istnieniu bozonów Higgsa. Jest to jednak uzasadnienie słabsze od tego, którego dostarczyłaby bezpośrednia bądź pośrednia obserwacja tej cząstki¹⁴.

Z punktu widzenia przeprowadzonych powyżej rozważań nie jest możliwy podział przedmiotów teoretycznych, który nie byłby zrelatywizowany do aktualnego stanu badań, a zwłaszcza do poziomu rozwoju technologii, od którego zależy zakres i dokładność obserwacji naukowej. Zakładając powyższą relatywizację, można wyróżnić: a) przedmioty teoretyczne, o istnieniu których wnioskuje się na podstawie rezultatów obserwacji bezpośrednich lub/i obserwacji pośrednich; b) przedmioty teoretyczne, o istnieniu których wnioskuje się w oparciu o rezultaty manipulowania tymi przedmiotami; c) przedmioty teoretyczne, których nie można zaliczyć – przynajmniej na danym etapie badań naukowych – do wyżej wymienionych grup, lecz są one postulowane przez teorie naukowe posiadające potwierdzenie empiryczne, np. wspomniany już bozon Higgsa. Można jednakże wyróżnić przedmioty

¹³ W praktyce badawczej chemii, w zakresie stwierdzania istnienia cząsteczek o określonym składzie i strukturze, zazwyczaj wystarczają eksperymenty przeprowadzane na przedmiocie badanym. W rzadkich przypadkach konieczne jest odwołanie się do eksperymentów polegających na manipulowaniu danym przedmiotem. Przykładem w tym względzie może być stwierdzenie istnienia benzynu, którego cząsteczki, ze względu na nietrwałość, nie mogły być bezpośrednio, a nawet pośrednio zaobserwowane. Uzasadniono hipotezę mówiącą o ich istnieniu, projektując i przeprowadzając odpowiednie przemiany chemiczne, które doprowadziły do uzyskania nowych produktów, które by nie powstały, gdyby cząsteczki benzynu nie tworzyły się w czasie zachodzących przemian [Zeidler, Sobczyńska, 1995/1996, s. 517-538].

¹⁴ Rezultaty eksperymentów przeprowadzanych w akceleratorze pracującym w CERN pod Genewą mogą zmienić ten stan rzeczy i bozon Higgsa może stać się cząstką pośrednio obserwowalną.

teoretyczne, które ze względu na sposób ich konstrukcji nigdy nie będą mogły być zaobserwowane ani nie będzie można nimi manipulować w sensie Hackinga, choć postulujące je teorie naukowe są empirycznie bardzo dobrze potwierdzone. W kolejnej części artykułu będę starał się wykazać, że orbitale atomowe i molekularne są przedmiotami teoretycznymi tego ostatniego typu.

3. Konstrukcja orbitali atomowych i molekularnych oraz problem ich fizycznej rzeczywistości

W mechanice falowej Schrödingera stan elektronu w atomie wodoru opisuje się za pomocą funkcji falowych nazywanych orbitalami¹⁵. Konkretnie postaci tych funkcji są tak dobierane, by uzyskana energia stanu podstawowego atomu była zgodna z obserwowaną w eksperymencie. Ze względów matematycznych dokładne analityczne rozwiązanie elektronowego równania Schrödingera jest możliwe wyłącznie dla atomu wodoru. W przypadku cząsteczek energię stanu podstawowego, zgodną z obserwowaną, uzyskano dla zjonizowanej cząsteczki wodoru H_2^+ przy założeniu, że elektron porusza się w polu wytworzonym przez oba jądra. Funkcja falowa jest funkcją prawdopodobieństwa znalezienia elektronu w przestrzeni wokół jądra atomowego, a dokładną interpretację fizyczną posiada kwadrat bezwzględnej wartości tej funkcji. Jest on interpretowany jako gęstość prawdopodobieństwa znalezienia elektronu w danym miejscu wokół jądra. W praktyce badawczej chemii bardzo ważną rolę odgrywają reprezentacje graficzne orbitali, które obrazują możliwe *rozkłady ładunków* wokół jąder atomów. Jednakże gdy rozpatrujemy atomy lub cząsteczki wieloelektronowe, to pojawiają się poważne kłopoty obliczeniowe. Chcąc w odniesieniu do takich układów posługiwać się pojęciem *orbital*, należy przyjąć przybliżenie jednoelektronowe, zgodnie z którym każdemu elektronowi w atomie bądź cząsteczce przypisuje się funkcję falową, zwaną odpowiednio: orbitalem atomowym lub orbitalem molekularnym. Gdy rozpatruje się atomy wieloelektronowe, to w równaniu falowym Schrödingera zaniedbuje się w hamiltonianie oddziaływania między elektronami i zakłada się, że jest on sumą hamiltonianów jednoelektronowych, a każdy elektron porusza się wokół nieskończenie ciężkiego jądra w uśrednionym polu wszystkich pozostałych elektronów. Przybliżoną energię stanu podstawowego oblicza się za pomocą metody wariacyjnej Hartree-Focka, która zwana jest również metodą pola samouzgodnionego. Jest to metoda *ab initio*, czyli metoda, w której oblicza się „wszystko od początku” bez wprowadzania parametrów pochodzących z doświadczenia, z wyjątkiem tzw. stałych uniwersalnych, np. ładunku i masy elektronu. W metodzie tej, mówiąc

¹⁵Funkcja ta zależy wyłącznie od współrzędnych przestrzennych elektronu. Jeśli uwzględnimy również jego spin, to wówczas funkcja falowa nazywana jest spinorbitalem.

w uproszczeniu, podstawia się funkcję falową o założonej postaci do wyrażenia na energię, a następnie tak długo się ją modyfikuje, aż uzyska się minimum energii stanu podstawowego rozpatrywanego atomu. Jednakże elektrony oddziałują na siebie siłami odpychania kulombowskiego i stan każdego z nich zależy od konfiguracji pozostałych elektronów w atomie. Im atom zawiera większą liczbę elektronów, tym założenie jednoelektronowe staje się coraz bardziej dyskusyjne, gdyż różnice między energią stanu podstawowego pochodzącą z obliczeń a energią obserwowaną w eksperymencie są coraz większe.

W przypadku orbitali molekularnych konieczne jest jeszcze uprzednie wprowadzenie przybliżenia adiabaticznego, odseparowującego ruch jąder od ruchu elektronu, oraz przybliżenia Borna-Oppenheimera, które nakazuje liczyć energię stanu podstawowego dla danego położenia jąder atomów tworzących cząsteczkę, a więc dla określonej struktury cząsteczki. Dopiero wówczas, zakładając przybliżenie jednoelektronowe, można skonstruować orbital molekularny jako liniową kombinację orbitali atomowych i zastosować metodę pola samouzgodnionego¹⁶.

W 1990 roku J. Ogilvie opublikował artykuł, w którym utrzymywał, że orbitale nie istnieją [Ogilvie, 1990, s. 280-289]. Większość przesłanek jego argumentacji jest dobrze znana każdemu chemikowi teoretykowi, a uświadamia je sobie również wielu chemików eksperymentatorów. Z punktu widzenia mechaniki kwantowej przybliżenie jednoelektronowe należy odrzucić, gdyż poszczególne elektrony nie mogą być związane z konkretnymi funkcjami falowymi. Jedną z podstawowych zasad mechaniki kwantowej mówi bowiem o nierozróżnialności elektronów w atomie lub cząsteczce. Z tego między innymi względu atomy i cząsteczki powinny być traktowane holistycznie, a w szczególności nie znajduje uzasadnienia wyróżnianie atomów i orbitali atomowych jako składników cząsteczki. Nie ma więc fizycznego uzasadnienia dla konstruowania funkcji falowej dla całego atomu jako liniowej kombinacji funkcji falowych poszczególnych elektronów. Inną ważną przesłanką tego rozumowania, którą fizycy i chemicy teoretycy dobrze znają, głosi, że energię stanu podstawowego atomu lub cząsteczki, zgodną z wyznaczoną eksperymentalnie, można obliczyć także wtedy, gdy założy się postaci funkcji falowych zasadniczo odmienne od „klasycznych” orbitali. Jednakże, w przeciwieństwie do tych ostatnich, nie posiadają one klarownego sensu fizycznego. Na przykład dla cząsteczek skończona baza funkcji, tworzona w celu zastosowania metody pola samouzgodnionego, nie musi być zbudowana z orbitali atomowych, lecz z dowolnych funkcji, które są dogodne ze względów numerycznych

¹⁶Dokładniej rzecz ujmując, orbitale atomowe izolowanych atomów cząsteczki mogą stanowić bazę funkcyjną dla utworzenia reprezentacji orbitali molekularnych za pomocą metody pola samouzgodnionego. Metody molekularnej mechaniki kwantowej, a wśród nich metoda polegająca na konstruowaniu orbitali molekularnych z orbitali atomowych, zostały szczegółowo omówione w podręcznikach z tego zakresu. Zobacz np.: [Kołos, 1975], [Kołos, Sadlej, 2007], [Piela, 2003].

i dają dostatecznie zwartą reprezentację orbitali molekularnych [Nalewajski, 2001, s. 172].

Podobnie orbitale zhybrydowane są jedynie konstruktami matematycznymi, które można zastąpić innymi funkcjami, którym nie sposób przypisać określonej interpretacji fizycznej. Dlatego, zdaniem tego autora, formułowana w książkach teza, że metan posiada strukturę tetraedryczną ze względu na hybrydyzację sp^3 atomu węgla, nigdy nie znalazła eksperymentalnego i teoretycznego uzasadnienia. Z wymienionych i kilku jeszcze innych powodów należy, zdaniem Ogilwiego, uznać, że takie przedmioty jak orbitale nie istnieją.

Linus Pauling, odnosząc się do powyższej tezy, zauważył, że rozstrzygnięcie diskutowanego problemu zależy od sposobu rozumienia czasownika „istnieć”. Jego zdaniem orbitale są przedmiotami naszych myśli, lecz nie istnieją jako byty fizyczne [Pauling, 1992, s. 519-522]. Są one postulowane przez określone metody molekularnej mechaniki kwantowej, a zatem można je uznać za byty *inteligibilne*, które podlegają racjonalnej analizie. W odniesieniu do problemu hybrydyzacji atomu węgla w metanie Pauling odwołał się do swoich wcześniejszych prac, w których stwierdzał, że hybrydyzacja sp^3 jest rezultatem tzw. zjawiska rezonansu¹⁷. Zjawisko rezonansu jest *de facto* rezultatem przyjęcia pewnej metody matematycznej prowadzącej do minimalizacji energii. Pauling wykazał, że tetraedryczna struktura czterech wiązań czterowartościowego atomu węgla jest stabilna, gdyż ma niższą energię niż inne możliwe struktury. Zgodność energii obliczonej stanu podstawowego metanu, przy założeniu hybrydyzacji sp^3 atomu węgla, z energią wyznaczoną eksperymentalnie, potwierdza trafność wybranej metody. Można więc powiedzieć, że użyteczność matematycznych konstrukcji, jakimi są orbitale zhybrydowane sp^3 , została eksperymentalnie potwierdzona.

O niezwyklej przydatności orbitali atomowych i molekularnych do przewidywania i wyjaśniania przebiegu przemian chemicznych nie trzeba przekonywać żadnego chemika. Użyteczność orbitali atomowych i molekularnych sprawiła, że spór o ich status ontologiczny nie miał wpływu na praktykę badawczą chemików. Chemicy teoretycy uznawali je za byty wyłącznie postulowane – inteligibilne – a eksperymentatorzy byli skłonni przypisywać im fizyczną realność¹⁸. Dopiero doniesienie o zaobserwowaniu orbitali d_{z^2} jonów miedzi w kryształach tlenku miedzi I postawiło na porządku dziennym problem ich statusu ontologicznego. Jeśli przyjmując, że interpretacja wyników przeprowadzonych eksperymentów była trafna, to należy uznać, iż z postulowanych przedmiotów teoretycznych orbitale stały się przedmiotami obserwacji bezpośredniej, co powinno przemawiać na rzecz tezy mówiącej o ich fizycznej realności.

¹⁷ Zobacz zwłaszcza [Pauling, 1960, s. 111-120].

¹⁸ Stanowiska w sporze o status ontologiczny orbitali zostały omówione w: [van Brakel, 2000(a), s. 133-143].

4. Co i w jaki sposób zaobserwowała grupa badaczy pod kierunkiem J. M. Zuo?

Z rozważań zawartych w poprzedniej części artykułu wynika, że pojęcie *orbital* nie odnosi się – ściśle rzecz biorąc – do układów wieloelektronowych, a więc orbitale nie mogą być w takich układach zaobserwowane. Jeśli zatem nie orbitale, to co zaobserwowała grupa badaczy pod kierunkiem J. M. Zuo?

Chemicy z Uniwersytetu Stanowego w Arizonie zastosowali połączone metody dyfrakcji zbieżnej wiązki elektronów oraz dyfrakcji promieni X na kryształach tlenku miedzi I (Cu_2O). Tlenki miedzi należą do wnikliwie badanych wysokotemperaturowych nadprzewodników¹⁹. Zastosowana metoda umożliwiła wykreślenie map rozkładu gęstości ładunku, a dzięki temu można było zobrazować *d-dziury* na atomach miedzi oraz wykazać istnienie wiązań Cu–Cu. Uzyskane wyniki były istotne, gdyż przyjmuje się, że *d-dziury* są odpowiedzialne za nadprzewodnictwo w wysokich temperaturach²⁰.

Zazwyczaj w celu wykreślenia map gęstości elektronowej korzystano wyłącznie z metody dyfrakcji promieni X. Jednakże metoda dyfrakcji elektronów pozwala na, wolny od ekstynkcji, pomiar tych elementów wysoko-uporządkowanej struktury krystalicznej, które są czułe na elektrony walencyjne. Metoda ta została zastosowana również w celu oszacowania wielkości błędu spowodowanego ekstynkcją, którym obarczone są dane otrzymane z pomiarów dyfrakcji promieniowania X. Uznano, że zaobserwowany rozkład ładunku wokół kationu Cu^+ można wytłumaczyć hybrydyzacją *d* elektronów z nieobsadzonymi stanami *s* i *p* o wysokich energiach. Hybrydyzacja ze względu na symetrię jest dozwolona wyłącznie dla orbitali $3d_{z^2}$ oraz $4s$. Jeśli do niej dojdzie, to część stanu d_{z^2} pozostanie niezajęta i powstanie tak zwana „dziura *d*-orbital”. Autorzy artykułu zinterpretowali odpowiednie fragmenty rozkładu ładunku jako nieobsadzone orbite $3d_{z^2}$, gdyż przypominały one swoim kształtem, znany z podręczników, rozkład ładunku odpowiadający orbitalowi $3d_{z^2}$ atomu wodoru.

W pierwszej kolejności rozważę kwestię: czy dokonana obserwacja rozkładu ładunku była obserwacją bezpośrednią, jak twierdzili autorzy artykułów opublikowanych w „Nature”, czy obserwacją pośrednią. Odpowiadając na powyższe pytanie, ograniczę się do analizy wyłącznie jednej składowej zastosowanej metody, a mianowicie do metody dyfrakcji promieni X, gdyż pod względem sposobu obserwacji metody te nie różnią się od siebie. Do dyfrakcji promieni X dochodzi na ładunkach atomów lub cząsteczek tworzących odpowiednie kryształy. Z punktu

¹⁹Odkrycia nadprzewodników wysokotemperaturowych dokonali Bednorz i Müller w 1986 roku, a rok później otrzymali za nie Nagrodę Nobla.

²⁰W tlenku miedzi II (CuO) za nadprzewodnictwo wysokotemperaturowe odpowiedzialne są *dziury* na atomie tlenu.

widzenia badacza stosującego metodę rentgenografii strukturalnej kryształ może być traktowany albo jako zbiór oddzielnych punktów rozpraszających, albo jako trójwymiarowy obszar o zmiennej gęstości elektronów²¹. Pierwsze podejście umożliwia wyznaczenie współrzędnych atomów w kryształ; drugie pozwala na wykreślenie rozkładu ładunku, które było celem dyskutowanej obserwacji. Funkcja rozkładu gęstości elektronowej jest bardzo złożona, lecz periodyczna natura kryształu, określona przez odpowiednie parametry, może być przedstawiona za pomocą szeregu Fouriera²². Znajomość współczynników odpowiednich wyrazów szeregu Fouriera umożliwia wyznaczenie gęstości elektronów i położenia atomów. Po odpowiednich przekształceniach otrzymuje się funkcję rozkładu gęstości elektronowej, która umożliwia z kolei wyznaczenie gęstości elektronowej w dowolnym punkcie komórki elementarnej jako rezultat sumowania, wyznaczonych z dyfraktogramu, amplitud natężeń fal ugiętych. Z powyższego opisu wynika, że bezpośrednio obserwowalne są amplitudy ugiętych fal „odczytywane” z dyfraktogramu, podczas gdy gęstość elektronową w danym punkcie komórki elementarnej wylicza się z odpowiedniego równania, a więc jest ona wielkością obserwowaną pośrednio w sensie Boniola²³. Zawarte w podręcznikach poświęconych rentgenografii strukturalnej opisy: dyfraktometrów, stosowanego promieniowania rentgenowskiego, sposobów przygotowania kryształów, sposobów rejestracji i „odczytywania” refleksów na dyfraktogramie, ujawniają zakładaną wiedzę teoretyczną i informacje podstawowe, które są niezbędne do przeprowadzania pomiarów²⁴. Jeszcze bardziej złożona wiedza jest wykorzystywana w celu interpretacji uzyskanych dyfraktogramów. Już samo wskaźnikowanie odbić (prążków) na dyfraktogramie zakłada znajomość rodzajów sieci krystalicznych. Wyznaczenie wartości tych wskaźników umożliwia obliczenie wartości parametru strukturalnego, wyrażającego amplitudę wiązki ulegającej dyfrakcji na płaszczyźnie określonej przez te wskaźniki²⁵. Dopiero wykorzystanie transformaty Fouriera pozwala wyliczyć

²¹ Omawiając zagadnienie zastosowania metod rentgenograficznych w analizie strukturalnej, wykorzystując informacje, które można znaleźć w odpowiednio zaawansowanych podręcznikach chemii fizycznej, krystalografii, a zwłaszcza fizyki fazy skondensowanej. Zobacz przede wszystkim [Oleś, 1998], a także [Barrow, 1973, s. 340-363].

²² Podobną postać posiada funkcja rozkładu radialnego opisująca dyfrakcję elektronów [Barrow, 1973, s. 359].

²³ Gęstość elektronową można wyznaczać z dyfraktogramów promieniowania X, wykorzystując różne metody, lecz zawsze jej wyznaczenie będzie miało charakter pośredni.

²⁴ Przekonuje o tym zwłaszcza lektura książki A. Olesia *Metody doświadczalne fizyki ciała stałego* [1998], a także informacje zawarte w: [Barrow, 1973, s. 340-350] lub [Bojarski i in., 2008, s. 358-382].

²⁵ We współczesnej rentgenografii strukturalnej wykorzystuje się automatyczne dyfraktometry, których praca jest sterowana odpowiednimi programami komputerowymi. Automatycznie dokonywana jest rejestracja sygnałów (obserwacja bezpośrednia), a *opracowanie* uzyskanych danych eksperymentalnych i wyznaczenie wartości wielkości pośrednio obserwowalnych umożliwiają odpowiednie programy [Oleś, 1998, s. 30].

gęstość elektronową jako funkcję parametru strukturalnego. Nie ulega zatem wątpliwości, że rozkłady ładunku są wielkościami pośrednio obserwowalnymi, których uzyskanie jest *obciążone* teoretycznie i informacyjnie.

Drugie kluczowe pytanie dotyczy prawomocności wnioskowania, które doprowadziło autorów artykułów zamieszczonych w „Nature” do sformułowania konkluzji, że zaobserwowany został orbital d_{z^2} . W poprzedniej części artykułu argumentowałem, że pojęcie *orbital* nie odnosi się do układów wieloelektronowych, a więc orbitale nie mogą być zaobserwowane ani bezpośrednio, ani nawet pośrednio. W rozważaniach tych zakładałem jednakże, iż jedyną wartością obserwowaną jest energia stanu podstawowego atomu lub cząsteczki, a postać funkcji falowej jest jedynie postulowana. Jednakże, jak wykazały rozważania zawarte w tej części artykułu, wielkością pośrednio obserwowalną jest również rozkład ładunku. Można by zatem przyjąć, że rezultaty eksperymentów przeprowadzonych przez Zuo i współpracowników potwierdzają zastosowaną metodę aproksymacji, w której elektrony w układach wieloelektronowych reprezentowane są przez orbitale.

Metoda orbitali nie jest jednakże jedyną metodą aproksymacji, która prowadzi do uzyskania rozkładu ładunku zgodnego z obserwowanym. Należy przede wszystkim zwrócić uwagę na metodę funkcjonałów gęstości, która umożliwia bezpośrednie wyznaczenie wartości gęstości elektronowej, a w której nie operuje się pojęciem funkcji falowej. „Podstawą teorii funkcjonałów gęstości [...] nie jest funkcja falowa, ale gęstość elektronowa [...] zdefiniowana w trójwymiarowej przestrzeni, a także dostępna z doświadczeń dyfraktometrycznych” [Kołos, Sadlej, 2007, s. 133]. Również i ta metoda ma charakter przybliżony, lecz ma wyraźną przewagę nad innymi metodami, gdyż nie tylko – jak już stwierdziłem – pozwala bezpośrednio wyznaczyć wartość gęstości elektronowej, lecz „można ją stosować do badania dużych układów molekularnych, w tym także układów biologicznych i ciała stałego” [Kołos, Sadlej, 2007, s. 135].

Istnieje wiele metod przybliżonych, które są wykorzystywane do aproksymowania energii stanu podstawowego cząsteczek wieloelektronowych. To, czy wybierzemy metodę wiązań walencyjnych, metodę orbitali molekularnych, czy funkcjonałów gęstości, zależy nie tylko od postawionego problemu badawczego, lecz także od bardzo wielu okoliczności o charakterze pragmatycznym, np. złożoności matematycznej zastosowanej metody czy kosztów obliczeń. Jak zauważyła Nancy Cartwright, wyniki badań eksperymentalnych jedynie ograniczają wybór procedury aproksymacyjnej. Jeżeli dopuszczają one kilka procedur, to wybór między nimi jest uzasadniony względami pragmatycznymi [Cartwright, 1983, s. 100-127]. Nie ma zatem żadnych podstaw, aby przedmiotom teoretycznym, postulowanym przez określoną metodę aproksymacji, przypisywać status realnie istniejących bytów.

Przeprowadzone powyżej rozważania uzasadniają postawienie tezy, że uznając pośrednią obserwowalność za wystarczająco mocne kryterium fizycznej realności obserwowanego przedmiotu, można rozkładowi ładunku przypisać fizyczną realność,

lecz nie można na tej podstawie wnioskować, że zaobserwowany został, chociażby pośrednio, odpowiedni orbital. Orbitale w układach wieloelektronowych (atomach lub cząsteczkach) mogą być uznane za przybliżone opisy rozkładu ładunku, lecz termin *orbital* nie posiada odniesienia przedmiotowego, któremu można przypisać fizyczne istnienie. Sformułowanie powyższego wniosku nie oznacza jednakże, że orbitale nie mogą być traktowane, w sposób zaproponowany przez Linusa Paulinga, jako konstrukty matematyczne mające charakter bytów inteligibilnych.

Zagadnienie statusu ontologicznego orbitali było przedmiotem wcześniej opublikowanej przeze mnie pracy, w której odniosłem się również do kwestii zadziwiającej skuteczności orbitali atomowych i molekularnych w praktyce badawczej współczesnej chemii²⁶. W ostatniej części artykułu powrócę do tego zagadnienia, koncentrując się na kilku jego ważnych aspektach.

5. Jak wyjaśnić efektywność orbitali atomowych i molekularnych jako narzędzi praktyki badawczej współczesnej chemii?

Zwolennicy realizmu w sporze o status poznawczy wiedzy naukowej za ostateczny argument na rzecz swojego stanowiska uznają argument z sukcesu nauki: „jeśli się nie akceptuje stanowiska realizmu naukowego, to trzeba uznać, że sukces nauki jest cudem”²⁷. Przyjmuje się na ogół, iż w skład stanowiska realizmu naukowego wchodzi dwie centralne tezy: a) *terminy dojrzałej nauki zazwyczaj do czegoś się odnoszą, tzn. istnieją przedmioty należące do denotacji tych terminów*; b) *prawa teorii należącej do dojrzałej nauki są zazwyczaj aproksymacyjnie prawdziwe*²⁸. Realiści naukowcy twierdzą zatem, że jeśli nie akceptujemy powyższych tez, to nie mamy innej możliwości wyjaśnienia sukcesu nauki. Sukces nauki rozumiany jest zazwyczaj szeroko, przede wszystkim jako sukces teorii naukowych. „Teoria odnosi sukces, gdy jest wykorzystywana w różnorodnych kontekstach wyjaśniających, prowadzi do potwierdzonych przewidywań, pozwala ingerować w przebieg zjawisk i kreować nowe zjawiska, a także wtedy, gdy jest skuteczna technologicznie”²⁹. Zwolennicy powiązania realizmu z sukcesem nauki nie tylko twierdzą, że realistyczne

²⁶ Zobacz [Zeidler, 2007, s. 191-201].

²⁷ Zobacz [Putnam, 1984, s. 140].

²⁸ Zobacz sformułowania realizmu naukowego [Boyd, 1984, s. 41] lub [Laudan, 1984(b), s. 219-220]. Dwie podstawowe tezy konstytuujące stanowisko realizmu są uzupełniane o tezy dodatkowe, dotyczące konwergencji i retencji wiedzy naukowej. Larry Laudan nazywał zrekonstruowane przez siebie stanowisko realizmu naukowego realizmem konwergentnym. Zobacz [Laudan, 1984(b), s. 219-221].

²⁹ Choć sposób definiowania *sukcesu nauki* był przedmiotem szczegółowych dyskusji, to teza, że nauka odnosi sukcesy, nie była kwestionowana ani przez realistów, ani przez antyrealistów. Zobacz na ten temat np. [Laudan, 1984(a), s. 86-90] lub [Devitt, 1984, s. 87-91].

tezy wyjaśniają sukces nauki, lecz zarazem uważają, że sukces nauki potwierdza stanowisko realizmu. Właśnie ta druga kwestia jest interesująca w kontekście rozważań nad statusem ontologicznym orbitali atomowych i molekularnych.

Larry Laudan rekonstruuje rozumowanie zwolenników stanowiska realistycznego pod postacią abdukcyjnego wnioskowania, zgodnie z którym: *jeśli główne terminy teorii naukowych rzeczywiście posiadają odniesienia przedmiotowe, to zazwyczaj teorie te osiągają empiryczny sukces* (przesłanka 1) i *naukowe teorie osiągają empiryczny sukces* (przesłanka 2), *to główne terminy tych teorii rzeczywiście posiadają odniesienia przedmiotowe* (wniosek) [Laudan, 1984(b), s. 220]³⁰. Laudan podważa konkluzję powyższego rozumowania, odwołując się do wyników badań historycznych nad nauką. Podaje przykłady teorii, których główne terminy, z punktu widzenia współczesnej wiedzy, nie posiadają odniesień przedmiotowych, a które w swoim czasie odniosły sukces, jak np.: teoria flogistonu, ciepłika, liczne teorie eteru. Jednakże niektórzy zwolennicy realizmu naukowego twierdzą, że wymienione teorie nie należą do dojrzałej nauki i że do tej pory nie podano przykładów takich teorii z zakresu współczesnego z matematyzowanego przyrodoznawstwa. Powyższe zastrzeżenie z całą pewnością nie odnosi się do teorii orbitali atomowych i molekularnych. Są to teorie bardzo szeroko stosowane, które odniosły olbrzymi sukces we wszystkich składających się na nie aspektach, a ich podstawowe terminy nie posiadają odniesień przedmiotowych [Scerri, 2001, s. 81-85]. Istnieje zasadnicza różnica między przykładami podanymi przez Laudana a teorią orbitali atomowych i molekularnych. Teorie: flogistonu, ciepłika czy eteru przestały, wraz z rozwojem badań doświadczalnych, odnosić eksplanacyjne, prognostyczne i technologiczne sukcesy. Natomiast teoria orbitali atomowych i molekularnych ma ciągle niezwykle stymulujący wpływ na praktykę badawczą chemii, lecz z samych założeń tej teorii wynika, że nie mogą istnieć byty przez nią postulowane.

Nie ulega zatem wątpliwości, że teoria orbitali atomowych i molekularnych stawia pod znakiem zapytania, w stopniu znacznie większym niż przykłady podane przez Laudana, ścisłe powiązanie sukcesu nauki z tezą realizmu naukowego³¹. Powyższa konkluzja sprawia, że nadzwyczajna efektywność orbitali atomowych i molekularnych, zwłaszcza w eksperymentalnej praktyce badawczej chemii, jest tym bardziej zagadkowa. Właśnie z tego powodu problem statusu ontologicznego orbitali był rozpatrywany w kontekście zagadnienia autonomii chemii. Wielu filozofów chemii uznało, że pojęcie *orbital* jest specyficznie chemiczne, gdyż to chemiczy, wbrew postulatam mechaniki kwantowej, posługują się tym pojęciem

³⁰Takie samo wnioskowanie można przeprowadzić w odniesieniu do drugiej centralnej tezy realizmu naukowego. Zobacz [Laudan, 1984(b), s. 220].

³¹Dotyczy to także drugiej centralnej tezy realizmu, mówiącej o aproksymacyjnej prawdziwości podstawowych praw teorii naukowych. Jeśli podstawowe terminy występujące w tych prawach nie posiadają odniesień przedmiotowych, to nie mogą być aproksymacyjnie prawdziwe.

w odniesieniu do układów wieloelektronowych. W tym celu przyjmują przybliżenie jednoelektronowe, a w przypadku molekuł również adiabatyczne i Born-Oppenheimera, których wprowadzenie jest uzasadnione wymogami praktyki badawczej chemii. Można zatem mówić o swego rodzaju emergencji, o pojawieniu się na poziomie chemicznym nowego rodzaju bytów. Jak twierdzi Scerri, ich realistyczne traktowanie ugruntowuje autonomię chemii względem fizyki³². Zack Jenkins uważa jednak, iż nie należy łączyć problemu statusu ontologicznego orbitali z zagadnieniem redukcji chemii do fizyki [Jenkins, 2003, s. 1052-1062]. Jego zdaniem kwestia istnienia orbitali powinna być rozpatrywana w kontekście wyjaśniania praktyki badawczej chemii, a nie jako problem metafizyczny.

Gdy śledzi się sposób, w jaki orbitale traktują chemicy eksperymetatorzy w swojej praktyce badawczej, to nie można zaprzeczyć, że uznają oni orbitale atomowe i molekularne za byty fizyczne. To właśnie z ich przekonaniem w tym względzie polemizował J. Ogilvie, gdy – przytaczając argumentację dobrze znaną wszystkim chemikom teoretykom, a także wielu eksperymentatorom – twierdził, że orbitale nie istnieją. Jednakże podana w drugiej i trzeciej części artykułu argumentacja, wymierzona w przypisywanie realności fizycznej orbitalom atomowym i molekularnym, nie uchyla pytania o wpływ przekonania badaczy w kwestii statusu ontologicznego orbitali na efektywność ich praktyki badawczej. Starłem się wykazać, w artykule już wcześniej przywoływanym, że myślenie teoretyczne, którego postulatami są orbitale, wyznacza podstawy myślenia aplikacyjno-praktycznego, które steruje eksperymentalną praktyką badawczą chemii [Zeidler, 2007, s. 198-200]. Efektywność orbitali, które są jednym z podstawowych narzędzi praktyki badawczej chemii, jest tak duża przede wszystkim dlatego, że orbitale mają swoje graficzne, wyobrażeniowe reprezentacje, którymi operują chemicy eksperymetatorzy, gdy wyjaśniają bądź projektują przebieg przemian chemicznych³³. Zauważmy, że od strony semiotycznej przejście od orbitalu będącego funkcją prawdopodobieństwa o określonej postaci do orbitalu jako graficznego jej przedstawienia jest przejściem od znaku symbolicznego do znaku ikonicznego. Można, jak sądzę, bronić tezy, że warunkiem skutecznego manipulowania orbitalami w trakcie projektowania przebiegu reakcji chemicznych jest ich uprzedmiotowienie, a nawet przypisanie uprzedmiotowionym orbitalom realności fizycznej. Zabieg ten jest dobrze uzasadniony zwłaszcza wówczas, gdy operujemy reprezentacjami graficznymi orbitali. Tak jak w codziennym życiu, aby skutecznie działać, jesteśmy zdroworozsądkowymi realistami i uznajemy za fizycznie realne otaczające nas przedmioty, tak w praktyce eksperymentalnej wyobrażeniowo dostępnym przedmiotom teoretycznym, za pomocą których projektujemy nasze działania, przypisujemy status bytów istniejących realnie. W omawianym przypadku to nie możliwość

³² Zobacz np. [Scerri, 2000(a), s. 405-425].

³³ Zobacz na ten temat [Woody, 2000, s. 612-627].

manipulowania orbitalami uzasadnia tezę o ich realnym istnieniu, lecz przekonanie o ich fizycznej realności jest niezbędne, aby można było nimi efektywnie manipulować. Manipulowanie orbitalami ma jednakże odmienny sens od manipulowania przedmiotami teoretycznymi, o którym pisał Hacking. Autor *Representing and Intervening* miał na myśli fizyczne manipulowanie przedmiotami teoretycznymi w celu wytworzenia nowych zjawisk. Tymczasem manipulowanie orbitalami odbywa się na etapie projektowania przebiegu przemian chemicznych, a więc ma charakter wyłącznie konceptualny, choć i ono prowadzi do wykreowania nowych przedmiotów (zjawisk). Nancy Cartwright twierdziła, że uznanie pewnych przedmiotów teoretycznych za realne jest związane z zaakceptowaniem wyjaśniania przyczynowego, w którym występują one jako przyczyny, o ile możemy tymi przedmiotami manipulować w sensie Hackinga. Ponieważ w przypadku orbitali warunek ten nie jest spełniony, to choć odgrywają one ważną rolę w wyjaśnianiu przyczynowym w chemii, to fakt ten nie może być uznany za argument przemawiający na rzecz ich fizycznej realności.

Powyżej zaproponowane rozwiązanie problemu realności orbitali można uznać za niewielką transformację konstatacji Basa van Fraassena, twierzącego, że uczeni, którzy są zaangażowani w dany program badawczy, uznają za realne przedmioty przez ten program postulowane, co nie oznacza, że muszą akceptować hipotezę egzystencjalne, mówiące o istnieniu tych przedmiotów [van Fraassen, 1980, s. 80-83]. Stawiam zatem tezę, że przypisywanie przez chemików określonego statusu ontologicznego orbitalom zależy od kontekstu badawczego, w którym się one pojawiają. Gdy są rozważane przez chemików teoretyków, to są przez nich uznawane za przedmioty postulowane, którym można przypisać, co najwyżej, status bytów inteligibilnych. Natomiast gdy orbitale są stosowane w ramach praktyki eksperymentalnej chemii, to uznawanie ich za byty fizyczne wzmacnia przekonanie o ich prognostycznej i manipulacyjnej skuteczności. Nie oznacza to jednakże, iż chemicy są skłonni akceptować hipotezę egzystencjalną, zgodnie z którą orbitale miałyby być fizycznie realnymi przedmiotami.

IX

Semiotyczny i poznawczy status wzorów strukturalnych związków chemicznych a przyczynowa teoria oznaczania

1. Wstęp

Kluczowym zagadnieniem semiotyki jest kwestia odnoszenia się znaków do przedmiotów przez nie oznaczanych. Koncepcje z zakresu semantyki, mówiące o tym, jak słowa i zdania łączą się ze światem, mogą być zastosowane w analizach szczegółowych zagadnień semiotyki chemicznej. Jednym z jej podstawowych problemów jest status semiotyczny wzorów strukturalnych. Czy są to ikony, charakteryzujące się podobieństwem do obrazowanych struktur cząsteczek związków chemicznych? Czy są one elementami symbolicznego języka chemii, których funkcja semiotyczna niewiele różni się od funkcji semiotycznej nazw związków chemicznych? Czy – a jeśli tak, to w jakim sensie – reprezentują one struktury rzeczywistych cząsteczek? Próby udzielenia odpowiedzi na powyższe pytania zakładały zazwyczaj tradycyjną – deskrypcjonistyczną teorię oznaczania, którą stosuje się w badaniach semantycznych nad symbolicznymi wyrażeniami języka nauki. W niniejszym artykule, w celu przeprowadzenia analizy semantycznej wzorów strukturalnych, odwołam się do przyczynowej teorii oznaczania S. Kripkego i H. Putnama. Ian Hacking sugerował, że teoria ta powinna być wykorzystana do analizy funkcji denotacyjnej języka nauki, badanego z perspektywy jego wykorzystania w praktyce eksperymentalnej dyscyplin empirycznych z zakresu przyrodoznawstwa¹. Dlatego też zastosujemy ją w rozważaniach z zakresu semiotyki chemicznej w kontekście roli, jaką wzory strukturalne pełnią w praktyce laboratoryjnej chemii. Nie bez znaczenia jest również fakt, że dyskusja nad zagadnieniem identityczności

¹ Zobacz [Hacking, 1983, s. 75-91].

indywidualności chemicznych, prowadzona w obrębie samej chemii, przypomina – ze względu na stosowaną w niej argumentację – dyskusję nad tożsamością desygnatów nazw, prowadzoną przez zwolenników i krytyków teorii sztywnego oznaczania. Sądzę więc, że zawarte w tym artykule rozważania mogą posiadać pewną wartość także dla teorii chemii oraz jej praktyki laboratoryjnej.

Wykorzystywanie teorii sztywnego oznaczania w analizach języka nauki wiąże się na ogół z próbą obrony stanowiska realizmu metafizycznego (np. realizmu eksperymentalnego). Sądzi się zazwyczaj, że stanowisko to jest bliskie samemu uczonemu, szczególnie zaś tym, którzy pracują eksperymentalnie. Jednakże to właśnie analiza praktyki eksperymentalnej prowadzi do wniosku, że deskrypcjonistyczna teoria oznaczania trafniej oddaje sposób, w jaki wzory strukturalne wskazują na „przedmioty” oznaczane. Jeśli takie przekonanie jest trafne, to staje się możliwa obrona stanowiska realizmu wewnętrznego w odniesieniu do ich statusu poznawczego.

Artykuł składa się z trzech części, z których pierwsza i druga obejmują dobrze znane zagadnienia, których przypomnienie wydaje się niezbędne w kontekście – kluczowych dla tej pracy – rozważań z zakresu semiotyki chemicznej. W części pierwszej przedstawię podstawowe założenia deskrypcjonistycznej i przyczynowej teorii oznaczania, które będą istotne ze względu na prowadzone dalej rozważania nad odniesieniem przedmiotowym wzorów strukturalnych. Następnie sformułuję kilka uwag na temat znaków ikonicznych i sposobu, w jaki odnoszą się one do przedmiotów oznaczanych. W trzeciej części artykułu, wykorzystując poczynione wcześniej ustalenia, podejmę próbę analizy semiotycznej wzorów strukturalnych związków chemicznych oraz sformułuję kilka uwag dotyczących ich statusu poznawczego.

2. Deskrypcjonistyczna a przyczynowa teoria oznaczania

Zgodnie z tradycyjną teorią znaczenia „znaczenie wyrazu (w sensie ‘intensji’) wyznacza jego ekstensję (w tym sensie, że tożsamość intensji pociąga za sobą tożsamość ekstensji)” [Putnam, 1998(b), s. 100]. W teorii tej pojęcie (znaczenie, intensję nazwy) ujmuje się jako zbiór koniecznych i wystarczających cech (warunków), które decydują o przynależności przedmiotów do zakresu (ekstensji) nazwy. Tak więc odniesienie przedmiotowe ustala się, wiążąc nazwy z odpowiednimi opisami zupełnymi. Zmiana deskrypcji związanych z danymi nazwami prowadzi do zmiany ich intensji i tym samym może prowadzić do zmiany ekstensji, a w konsekwencji do niewspółmierności na poziomie językowym i ontologicznym². Jeden z możliwych

² Powyższej kwestii jest poświęcona bardzo bogata literatura przedmiotu. Zobacz chociażby prace K. Jodkowskiego [1984, 1990, 1995]. Autor ten zwrócił uwagę, iż T. Kuhn i P. Feyerabend,

sposobów wyjścia z tej kłopotliwej – przynajmniej dla realistycznie nastawionych filozofów nauki – sytuacji polegał na zmianie koncepcji znaczenia i oznaczania, stosowanej w celu charakteryzowania semantycznych funkcji języka nauki. Koncepcją, która w tym celu wydawała się najbardziej obiecująca, była przyczynowa teoria oznaczania, zwana także teorią sztywnego oznaczania. Została ona sformułowana najpierw dla nazw własnych, a następnie dla nazw gatunków naturalnych i nazw substancjalnych przez S. Kripkego i H. Putnama³. Chcąc zastosować tę koncepcję do analizy języka nauki, rozszerzono ją również na terminy teoretyczne. Podstawowym dążeniem jej twórców było takie zdefiniowanie funkcji denotacji, która zachowywałaby niezależność odniesień przedmiotowych terminów od historycznie zmieniającej się wiedzy, którą na ich temat posiadamy.

Putnam proponuje uznać za normalną formę opisu znaczenia danej nazwy pewien skończony ciąg składający się z: charakteryzatora składniowego, charakteryzatora semantycznego, stereotypu i ekstensji [Putnam, 1998(b), s. 180-184]. Trzy pierwsze składniki opisu znaczenia reprezentują kompetencję językową pojedynczego użytkownika języka. Stereotyp związany z daną nazwą jest to zespół rozpowszechnionych przekonań na temat właściwości przedmiotów oznaczanych przez tę nazwę. Jednakże stereotyp nie wyznacza jej ekstensji. Jest ona stałym składnikiem opisu znaczenia danej nazwy i jest sztywno z nią związana przez akt jej nadania. Akt „chrztu” łączy przyczynowo nazwę z jej odniesieniem. W przypadku nazw gatunkowych lub substancjalnych, to pierwotne powiązanie dotyczy egzemplarzy przedmiotów danego rodzaju i jest następnie przekazywane w procesie komunikacji językowej.

Putnam wysuwa również dwie inne tezy – niezwykle istotne w odniesieniu do problemów, które będą rozważane w tym artykule. Jedną z nich jest teza o społecznym podziale pracy językowej. To eksperci są w stanie ostatecznie i prawomocnie ustalić ekstensję danej nazwy. To oni mogą określić podstawową wewnętrzną strukturę jej desygnatów, która decyduje o ich identyczności. Zgodnie z definicją Putnama dana nazwa posiada taką samą ekstensję we wszystkich światach możliwych. Termin „woda” jest tylko wtedy poprawnie użyty – twierdzi Putnam – gdy jest nazwą cieczy o wzorze H_2O i to niezależnie od tego, czy używający go wiedzą, czy też nie wiedzą, jaki jest skład chemiczny wody. Tym samym nawiązał on do niektórych myślicieli średniowiecznych, którzy twierdzili, że istotą wody jest jej forma substancjalna. W przypadku terminów teoretycznych ich denotację stanowią

z których nazwiskami wiąże się tezę o niewspółmierności, nie byli zwolennikami poglądu, że odniesienie przedmiotowe danej nazwy jest wyznaczone przez deskrypcję skojarzoną z tą nazwą [Jodkowski, 1995, s. 215].

³ Koncepcja ta była szeroko przedstawiana i dyskutowana w polskiej literaturze przedmiotu. Dlatego przytoczymy tylko te jej tezy, które są istotne dla dalszych rozważań zawartych w tym artykule. Zobacz [Kripke, 1988], [Putnam, 1992, s. 61-184], [Muszyński, 2000], [Skalski, 1991, s. 47-63].

przedmioty, wywołujące dające się obserwować w określonych warunkach efekty. Sądzę, iż w zgodzie z duchem koncepcji Putnama i Kripkego należy założyć, że postulowane przez teorię bytu, stanowiące denotację danego terminu, muszą posiadać tę samą wewnętrzną strukturę („istotę”), która jest przyczynowo odpowiedzialna za zachodzenie obserwowalnych efektów. Wydaje się bowiem, że deskrypcje, wprowadzające terminy teoretyczne, zawierają nie tylko elementy stereotypu, będące składnikiem opisu znaczenia, ale również określają przyczyny obserwowalnych efektów [Muszyński, 2000, s. 266].

Niewątpliwie, znaczenia takich terminów, jak „istota”, „istotna wewnętrzna własność”, „wewnętrzna struktura” nie były przez Putnama w sposób jednoznaczny określone. Czy posiadają one jedynie sens filozoficzny, którego eksplikacja zależy od wyboru koncepcji ontologicznej, czy mogą oznaczać właściwości, definiowane w obrębie poszczególnych dyscyplin naukowych? Zarówno teza o roli ekspertów w ustalaniu odniesienia przedmiotowego, jak i przykłady podawane przez Putnama, pozwalają na udzielenie jednoznacznej odpowiedzi na to pytanie. Gdy rozważamy odniesienie przedmiotowe nazw gatunkowych lub nazw substancjalnych, to specjaliści decydują o tym, jaka właściwość świadczy o tożsamości poszczególnych desygnatów danej nazwy, a więc wyraża ich „istotę”. W przypadku wody ma to być jej struktura ustalona przez chemików⁴, a w przypadku złota liczba atomowa określona przez fizyków. Odnotujmy również i to, co zauważyło już wielu autorów, że właściwości te posiadają wysoce teoretyczny charakter. W przypadku terminów teoretycznych jedynie eksperci są w stanie stwierdzić, czy określone obserwowalne efekty mogą być wyjaśnione przez postulowane właściwości bytów, które mają stanowić ich denotację⁵.

Zwolennicy przyczynowej teorii oznaczania twierdzą, iż na jej gruncie można uchylić tezę o niewspółmierności na płaszczyźnie ontologicznej. Przyjmują bowiem, że użytkownicy języka, posługując się np. terminem elektron, choć mogą odwoływać się do różnych teorii elektronów, odnoszą się do tych samych bytów. Jednakże niektórzy filozofowie nauki utrzymują, że nie dotyczy to sytuacji, gdy dany termin występuje w teoriach przedzielonych rewolucyjną zmianą w nauce, gdyż „po rewolucji naukowej świat ‘zaludniany’ jest przez nowe przedmioty, których nazwy wprowadza się do języka przez inicjującą więź przyczynową i przekazuje innym członkom wspólnot językowych przez językowy podział pracy” [Jodkowski, 1995, s. 221]. Cytowany powyżej autor uważa natomiast, iż przyczynowa teoria referencji posiada ograniczoną przydatność, zapewniając „stałość odniesie-

⁴ Rozważany przez Putnama przykład „wody jako cieczy o strukturze H₂O” jest – z chemicznego punktu widzenia – bardzo niefortunny. Jego zaletą jest jednak to, że umożliwia krytyczną analizę niektórych elementów przyczynowej teorii oznaczania, co będzie przedmiotem trzeciej części artykułu.

⁵ Porównania sposobów wyznaczania denotacji terminów nauki w deskrypcjonistycznej i przyczynowej teorii oznaczania dokonał Z. Muszyński [2000, s. 259-282].

nia w okresach między rewolucjami i to mimo zmian opinii naukowych” [Jodkowski, 1995, s. 221]. Z tym ostatnim przekonaniem będę polemizował w trzeciej części artykułu. Ustosunkuję się w niej również do poglądu, że przyczynowa teoria referencji umożliwia obronę stanowiska realizmu metafizycznego, gdyż ustanawia jednoznaczność relacji między nazwami a niezależnymi od podmiotu poznającego przedmiotami. Zastosowanie sztywnej teorii oznaczania do analiz semantycznych wzorów strukturalnych jest dlatego w pełni uzasadnione, że wielu chemików w sposób sztywny ujmuje relację oznaczania między wzorami strukturalnymi a związkami chemicznymi. Ponieważ określenie statusu semiotycznego wzorów strukturalnych jest niezwykle dyskusyjne, dlatego przedstawię obecnie podstawowe – znane z literatury przedmiotu – ustalenia dotyczące znaków ikonicznych, bowiem najczęściej za takie uznaje się wzory strukturalne.

3. O relacji między znakiem ikonycznym a przedmiotem oznaczanym – podobieństwo czy konwencja

Charles S. Peirce wyróżnił trzy rodzaje znaków: ikony, indeksy i symbole. Odróżnia je sposób, w jaki wskazują na oznaczany przedmiot. Zdaniem Peirce’a między znakiem ikonycznym a przedmiotem, do którego się on odnosi, zachodzi relacja podobieństwa przynajmniej pod względem jednej właściwości. Indeks jest połączony z przedmiotem oznaczanym pewną relacją przyczynową, gdyż jest on wyznaczony przez ten przedmiot. Natomiast symbol oznacza przedmiot wyłącznie na mocy konwencji. Wśród znaków ikonicznych Peirce wyodrębnił: obrazy, diagramy i metafory⁶. Funkcja referencyjna obrazów polega na zachodzeniu relacji podobieństwa między nimi a przedmiotami obrazowanymi. Zadaniem diagramów jest przedstawienie struktury reprezentowanego przedmiotu, co jest możliwe dzięki ich podobieństwu strukturalnemu. Natomiast metafory wskazują pośrednio na oznaczane przedmioty poprzez uwydatnienie ich wybranych właściwości. Charles Morris początkowo przeciwstawiał znaki ikoniczne znakom symbolicznym, zakładając, że te pierwsze charakteryzuje „naturalna” relacja podobieństwa do przedmiotu oznaczanego, a te drugie są powiązane z ich przedmiotem za pomocą przyjętych konwencji. W późniejszych pracach podkreślał, że o ikoniczności znaku decyduje fakt, iż posiada on przynajmniej niektóre cechy przedmiotu oznaczanego⁷.

W klasycznej koncepcji znaków ikonicznych zakłada się, że mogą one reprezentować jedynie przedmioty postrzegane zmysłowo [Wallis, 1969, s. 391]. Choć na ogół znaki ikoniczne reprezentują pojedyncze przedmioty, to mogą również być

⁶ Na temat koncepcji znaków ikonicznych Peirce’a zobacz [Pelc, 1982, s. 142-150].

⁷ Zobacz [Pelc, 1982, s. 144-145].

znakami klas przedmiotów dzięki podobieństwu owych znaków do każdego elementu danej klasy pod danymi względami. Ta ich cecha sprawia, że znaki ikoniczne są uznawane bardzo często za modele przedmiotów oznaczanych, a ustalając formalne własności relacji reprezentacji, ujmuje się zarówno jej dziedzinę, jak i przeciw-dziedzinę jako odpowiednie struktury relacyjne. Zakłada się na ogół izomorfizm modelu (ikony) i przedmiotu modelowanego (odniesienia ikony) lub (w słabszej wersji) ich homomorfizm. Dalsza ewolucja badań nad znakami ikonicznymi wiązała się ze wskazywaniem na relację analogii jako tę, która łączy znaki ikoniczne z przedmiotami oznaczanymi. Relacja ta może być definiowana na różne sposoby⁸. W ujęciu formalnym, które również odwołuje się do pojęcia modelu, zachodzi ona pomiędzy strukturą modelu (znaku ikonicznego) a strukturą obiektu modelowanego (przedmiotu). Szersze od tradycyjnego, a zarazem słabsze, ujęcie relacji analogii zakłada, że jest ona homomorfizmem [Dąbska, 1962, s. 13]⁹. Dziedziną tej relacji nie są jednak konkretne znaki ikoniczne pewnego rodzaju, ale znak ikoniczny pojęty jako typ idealny¹⁰. Takie podejście pozwala abstrahować od indywidualnych właściwości różnych konkretyzacji danego znaku ikonicznego.

Szczegółowa analiza wielu znaków ikonicznych prowadzi do wniosku, że to nie podobieństwo, lecz konwencja odgrywa podstawową rolę w ustaleniu odniesienia znaku ikonicznego. Dotyczy to zwłaszcza piktogramów i diagramów, które mają „postać” tak bardzo schematyczną, że ustalenie relacji podobieństwa wymaga przyjęcia skomplikowanego układu konwencji. Konwencjonalny charakter znaków ikonicznych oddaje definicja podana przez J. Kotarbińską: „Przedmiot A jest ze względu na konwencję K znakiem ikonicznym przedmiotu B wtedy i tylko wtedy, jeżeli przedmiot A posiada taką własność F i jest podobny do przedmiotu B pod takim względem W, że (1) dzięki zachodzeniu tego podobieństwa to, że przedmiot A ma własność F, jest oznaką tego, że i przedmiot B ma własność F; (2) na mocy konwencji K przedmioty o własnościach F nadają się do wyrażania myśli o przedmiotach podobnych do nich pod względem W” [Kotarbińska, 1990, s. 229]. Chociaż, zgodnie z tą definicją, to ciągle podobieństwo wyróżnia znaki ikoniczne spośród innych rodzajów znaków, lecz jego ustalenie jest możliwe tylko dzięki układowi konwencji przyjętych przez członków określonej grupy kulturowej, posługujących się danymi znakami ikonicznymi. Nie posiada więc ono – jak głosiła tradycyjna koncepcja znaku ikonicznego – charakteru naturalnego.

Szczegółowe analizy wielu rodzajów znaków ikonicznych występujących w różnych dziedzinach sztuki wykazywały, że nie można ustalić żadnej relacji

⁸ Zagadnienie to zostało szeroko omówione przez W. Ławniczaka [1971(b), s. 65-113].

⁹ W mocniejszym ujęciu relacji analogii przyjmuje się, że zachodzi izomorfizm pomiędzy strukturą znaku ikonicznego a strukturą przedmiotu oznaczanego.

¹⁰ Zobacz [Ławniczak, 1971(a), s. 74-76].

podobieństwa między nimi a przedmiotami przez nie oznaczanymi. W wyniku procesu „deikonizacji” wiele znaków ikonicznych nabiera charakteru symbolicznego¹¹. Zgodnie z deskrypcjonistyczną koncepcją odniesienia przedmiotowego do znaczenia znaków ikonicznych, podobnie jak to ma miejsce w przypadku nazw, wyznaczają ich denotacje. Jednakże, w odniesieniu do znaków ikonicznych, ich znaczenia są konstytuowane przez to, co te znaki przedstawiają, a powiązanie tych przedstawień z określonymi przedmiotami jest możliwe tylko na mocy przyjętych konwencji. Najprostszym przykładem są w tym względzie piktogramy, np. skrzyżowany nóż i widelec jako znak obecności wagonu restauracyjnego w składzie pociągu. „Obrazowość” znaków ikonicznych może odgrywać – jak będziemy starali się wykazać w rozdziale trzecim – istotną rolę, co wcale nie musi oznaczać, że są one obrazami oznaczanych przedmiotów. Wydaje się, że z punktu widzenia przyczynowej teorii oznaczania, różnica między znakami ikonicznymi (przynajmniej niektórymi ich typami) a znakami symbolicznymi (nazwami) jest jeszcze trudniejsza do uchwycenia. Należy przyjąć, że – podobnie jak w przypadku nazw – to inicjujący akt przyczynowego powiązania przedmiotu ze znakiem ikonicznym ustala referencję tego ostatniego. Jednakże, ze względu na olbrzymie zróżnicowanie znaków ikonicznych, badanie powyższej kwestii musiałoby być przeprowadzone oddzielnie dla każdego rodzaju znaku ikonicznego.

Analiza przedstawionych powyżej ujęć znaków ikonicznych wykazuje, że na gruncie „tradycyjnej” teorii znaczenia występuje istotna różnica pomiędzy nimi a nazwami (indywidualnymi lub ogólnymi). Te ostatnie są powiązane ze swoją ekstensją za pomocą zespołu konwencji i dlatego nie niosą ze sobą wiedzy o przedmiocie oznaczanym¹². Natomiast znaki ikoniczne, rozumiane klasycznie za pomocą relacji podobieństwa, są nośnikiem określonego zespołu informacji o przedmiotach oznaczanych. Sposób, w jaki te informacje są zawarte w niektórych znakach ikonicznych, sprawia, że odgrywają one istotną rolę w procesie naukowego wyjaśniania i przewidywania, a także ważną rolę heurystyczną. Uważa się, że przykładem takich znaków ikonicznych są wzory strukturalne cząsteczek związków chemicznych. Czy zastosowanie teorii sztywnego oznaczania likwiduje tę różnicę i czy umożliwia, spójne pod względem semiotycznym, ujęcie nomenklatury chemicznej? Te pytania, obok wcześniej postawionych, będą przedmiotem rozważań następnego rozdziału.

¹¹ Różne sposoby przemiany znaków ikonicznych (rozumianych tradycyjnie przez odwołanie się do relacji podobieństwa znaku do przedmiotu oznaczanego) w symbole omówiła S. Wysłouch [1991, s. 134-137].

¹² Wprawdzie deskrypcjonistyczny charakter „tradycyjnej” koncepcji oznaczania sugeruje coś innego, to należy pamiętać, że to konwencja wiąże daną nazwę z przedmiotem oznaczanym, o którym posiadamy określoną wiedzę, wyrażoną przez wiązkę deskrypcji.

4. Problem statusu semiotycznego i poznawczego wzorów strukturalnych związków chemicznych

Podstawowym problemem semiotyki chemicznej jest kwestia jednoznaczności relacji oznaczania związków chemicznych przez ich nazwy. Z tego punktu widzenia zastosowanie teorii sztywnego oznaczania do analizy semiotycznej języka chemii wydaje się w pełni uzasadnione, gdyż sztywne (przyczynowe) powiązanie nazwy ze związkiem chemicznym miało ustanowić jednoznaczną relację oznaczania. Tej jednoznaczności nie zapewniała tradycyjna – deskrypcjonistyczna teoria znaczenia, zgodnie z którą to intensja nazwy związku chemicznego miała wyznaczać jego odniesienie. Jednakże jej niedookreśloność i zmienność rzutowała na niejednoznaczność odniesienia przedmiotowego. O celowości zastosowania sztywnej teorii oznaczania świadczy też teza o kompetencji ekspertów w ustalaniu denotacji, z którą to tezą w chemii nie sposób polemizować, a także uniezależnienie odniesienia przedmiotowego od stereotypowej wiedzy związanej z nazwami przynajmniej niektórych związków chemicznych. Lecz najważniejszym argumentem – z perspektywy rozważanego w tym artykule zagadnienia – jest odwołanie się w tej koncepcji do wewnętrznej struktury desygnatów (ich „istoty”) jako tej własności, która rozstrzyga o ich tożsamości, przesądzając zarazem o właściwym i jednoznacznym powiązaniu nazwy z jej odniesieniem przedmiotowym. Wymienione tezy uzasadniają przekonanie, że zastosowanie teorii sztywnego oznaczania w analizach semiotycznych nomenklatury chemicznej jest szczególnie istotne z punktu widzenia praktyki laboratoryjnej. Ta ostatnia opiera się bowiem na założeniu, że nazwy systematyczne, wzory sumaryczne lub strukturalne, pojawiające się na butelkach lub fiolkach z odczynnikami, w sposób jednoznaczny oznaczają cząsteczki związków chemicznych.

Zgodnie z przyjętą w chemii zasadą każda cząsteczka związku chemicznego określona jest przez swój skład i strukturę, tj. konstytucję, konfigurację i konformację¹³. Tylko cząsteczki o takim samym składzie i takiej samej strukturze są identyczne. Zgodnie z teorią sztywnego oznaczania nazwie związku chemicznego określone odniesienie przedmiotowe przysługuje ze względu na strukturę jego cząsteczek. Przypomnijmy, że zgodnie z ideą twórców tej koncepcji posiada ona charakter intencjonalny, a więc zachowuje swoją ważność nawet w odniesieniu do czasów przed 1860 rokiem, gdy w chemii pojęcie struktury nie było jeszcze znane. Takie stanowisko rodzi poważne problemy związane z faktem, że pod jedną nazwę

¹³Konstytucja to określony sposób i kolejność powiązania ze sobą atomów w cząsteczce. Konfiguracja to wzajemne usytuowanie atomów w przestrzeni, opisane za pomocą kątów walencyjnych atomu centralnego, tzn. atomu związanego bezpośrednio z co najmniej dwoma atomami. Konformacja to wzajemne usytuowanie w przestrzeni atomów bezpośrednio związanych z parą atomów centralnych. Są to określenia przyjęte przez IUPAC. Zobacz [Kowalewski, 1988, s. 943].

zwyczajową, a nawet pod jeden wzór sumaryczny, mogą podpadać cząsteczki o różnych strukturach. Pominiemy jednak te kwestie i ograniczymy nasze rozważania do czasów, w których istniała już chemia strukturalna, umożliwiająca przypisywanie cząsteczkom związków chemicznych wzorów strukturalnych. Wzór strukturalny, traktowany jako dookreślenie nazwy zwyczajowej, wzoru sumarycznego lub nazwy systematycznej, względnie występujący samodzielnie, powinien zapewniać jednoznaczność odniesienia, gdyż zgodnie z klasycznym podejściem do wzoru strukturalnego jako znaku ikonicznego miał on obrazować strukturę cząsteczki¹⁴. Ta ostatnia zaś decydowała o „szywności” relacji denotacji. Takie podejście reprezentował Aleksander Butlerow, jeden z twórców teorii strukturalnej w chemii. Uważał on, że każdej substancji chemicznej będzie można przypisać jeden wzór strukturalny, który będzie wyrażał jej „istotę”. Posługując się przenośnią S. Weiningera, można powiedzieć, że wzór strukturalny miał pełnić funkcję palca wskazującego na daną substancję (związek chemiczny) i najpełniej realizować starożytną maksymę: „Jedna rzecz, jedno słowo” [Weininger, 1998]. Nie ulega wątpliwości, że idea „szywnego” powiązania nazwy związku (wzoru strukturalnego) z jego denotacją, ze względu na posiadanie przez cząsteczki tego związku określonej struktury, pochodzi od samych chemików, którzy tworzyli podstawy zarówno teorii strukturalnej jak i współczesnej semiotyki chemicznej.

Rozstrzygnięcie, na ile powyższe postulaty teorii szywnego oznaczania są spełnione w odniesieniu do wzorów strukturalnych, wymaga analizy ich statusu semiotycznego. Zgodnie z klasycznym podejściem są one ikonami, tzn. że istnieje relacja podobieństwa pod określonymi względami między wzorami strukturalnymi a strukturami rzeczywistych cząsteczek. Ch. Morris uważał, że obrazują one substancję, „której drobina składa się z tyłu i tak samo powiązanych atomów jak te we wzorze” [Pelc, 1982, s. 144]. Zgodnie z tym podejściem wzory strukturalne uznawano za modele, które pozostają w relacji izomorfizmu lub homomorfizmu do rzeczywistej struktury cząsteczek. Modele te zbudowane są z dwóch podstawowych klas symboli, reprezentujących odpowiednio: atomy oraz wiązania. Wzory strukturalne są dwuwymiarowe, lecz istnieją określone konwencje graficzne, które umożliwiają symulowanie trójwymiarowej struktury rzeczywistych cząsteczek.

Szczegółowa analiza wzorów strukturalnych skłania wielu badaczy do wskazywania na konwencjonalny charakter relacji odniesienia przedmiotowego, która łączy je ze strukturami rzeczywistych cząsteczek. Na przykład R. Hoffmann i P. Laszlo twierdzą, że sytuują się one pomiędzy symbolami a modelami i podkreślają rozstrzygającą rolę konwencji w konstrukcji wzorów strukturalnych [Hoffmann,

¹⁴Należy zaznaczyć, że wzór strukturalny może być rozpatrywany samodzielnie, gdyż pełni on również funkcję nazwy systematycznej, ponieważ dysponując wzorem strukturalnym danego związku chemicznego, możemy ułożyć jego nazwę systematyczną. Zachodzi również zależność odwrotna, choć pełna nazwa systematyczna nie może zastąpić, z punktu widzenia praktyki chemicznej, wzoru strukturalnego.

Laszlo, 1994, s. 158-159]. To nie ze względu na podobieństwo wzoru do struktury cząsteczki – jak przewiduje, podana w części drugiej artykułu, definicja znaku ikoniznego – określone właściwości wzoru chemicznego mają przysługiwać cząsteczce. Takiego przyporządkowania nie można ustanowić nawet dla kształtu cząsteczki, gdyż wzory strukturalne są dwuwymiarowe. Zawsze więc to na mocy konwencji określone elementy składowe wzoru strukturalnego symbolizują określone właściwości cząsteczki. Wzór strukturalny może być też rozpatrywany jako metafora (model będący diagramem), która wskazuje pośrednio na właściwości strukturalne związku chemicznego. Ten tylko zrozumie metaforę, kto zna odpowiednie konwencje. Następuje więc proces symbolizacji – deikonizacji wzorów strukturalnych. Jeśli wzory strukturalne mogłyby być rozpatrywane jako modele, to wyłącznie jako modele abstrakcyjne, jak to sugeruje C. Trindle [1999, s. 141]. Powyższe ujęcie jest o tyle dopuszczalne, że rozpatrując wzory strukturalne, możemy abstrahować od wyglądu konkretnego wzoru i założyć, że reprezentuje on pewien typ idealny. Trudno jednakże rozstrzygnąć, jak należy rozumieć stwierdzenie tego autora, iż wzór strukturalny łączy z przedmiotem reprezentowanym taka sama struktura logiczna. Próba odwołania się w tym kontekście do tradycji zapoczątkowanej *Traktatem logiczno-filozoficznym* L. Wittgensteina, zgodnie z którą struktura logiczna zdania i struktura komunikowanego przez to zdanie faktu są identyczne, nie znajduje racjonalnego wyjaśnienia. Wzory strukturalne są znakami ikonizno-symbolicznymi, które na mocy złożonego zestawu konwencji mają nie tylko odnosić się do obiektu oznaczanego, ale również wskazywać na jego złożoną właściwość – strukturę. Różnią się więc one w sposób istotny od innych symbolicznych wyrażań języka nauki i nie mogą być ujmowane tak samo, jak inne słowa będące składnikami zdań. Jeśli w ogóle wzory strukturalne reprezentują strukturę cząsteczek, to na pewno nie jest to struktura logiczna.

Złożony charakter konwencji, niezbędnych przy pisaniu i odczytywaniu wzorów strukturalnych, sprawia, że nieuzasadnione wydaje się przekonanie Hoffmanna i współpracujących z nim autorów, którzy określają je, pomimo wszystko, mianem ikon. Sądzę, że wpływa to z roli, jaką wzory strukturalne pełnią w rozumowaniach chemików, którzy są w stanie zaprojektować oryginalne syntezы chemiczne, operując w swoich umysłach przestrzennymi przedstawieniami struktur cząsteczek związków chemicznych¹⁵. Ze stanowiskiem Hoffmanna polemizuje Schummer, który wskazuje na fakt, że wzory strukturalne i obiekty kwantowo-mechaniczne, jakimi są cząsteczki związku chemicznego, nie mają żadnych istotnych cech

¹⁵R. Hoffmann powołuje się często na przykład swojego mistrza R. B. Woodwarda, który posiadał niezwykły dar operowania w umyśle trójwymiarowymi wzorami strukturalnymi (modelami molekularnymi) i dzięki temu zaprojektował wiele nowych syntez. Jednakże Hoffmann opisuje to zjawisko wyłącznie w kategoriach psychologicznych: „Studiując szczegółowo syntezы Woodwarda, ujrzeć można, jak obracał on cząsteczkę w swoim umyśle i dostrzegał niektóre jej elementy pod nowym kątem” [Hoffmann, Laszlo, 1994, s. 165].

wspólnych [Schummer, 1999, s. 192]. Nie spełniają więc minimalnego warunku nałożonego przez Peirce'a na znaki ikoniczne. Wzory strukturalne przedstawiają izolowane cząsteczki, a ich elementy składowe są ujmowane na gruncie klasycznej teorii struktury chemicznej, zgodnie z którą na przykład kreska reprezentuje wiązanie pojedyncze utożsamiane z parą elektronów. Wzory strukturalne mogą być więc rozumiane jedynie jako schematyczna, topologiczna i geometryczna reprezentacja cząsteczek, lecz i takie ich ujęcie napotyka na poważne trudności. Jak już stwierdziliśmy, wzory strukturalne są dwuwymiarowe, a przyjęte konwencje jedynie ułatwiają ich przeobrażanie – w umysłach chemików – w struktury trójwymiarowe. Jednakże najpoważniejszy problem związany z ikonicznym ujęciem wzorów strukturalnych jest konsekwencją faktu, że są one statyczne, podczas gdy cząsteczki charakteryzują się wewnętrzną i międzycząsteczkową dynamiką [Schummer, 1999, s. 192]. Tradycyjna interpretacja wzorów strukturalnych jako ikon odpowiadała więc wyidealizowanemu ujęciu struktury, które brało pod uwagę wyizolowaną cząsteczkę i tym samym nie miało większego znaczenia z punktu widzenia praktyki eksperymentalnej. Chemik przeprowadza reakcje chemiczne w określonych warunkach termodynamicznych, używając określonych ilości substratów. Warunki te nie pozostają bez wpływu na strukturę cząsteczek. Schummer proponuje, aby interpretować wzory strukturalne w kontekście całego systemu znaków chemicznych i zakłada, że zawierają one wiele informacji o właściwościach chemicznych substancji, a przede wszystkim o ich reaktywności. Uważa on, że „dany zestaw znaków i zestaw reguł semiotycznych dla dopuszczalnych zmian (transformacji, połączeń, separacji, wymiany etc.) znaków można zdefiniować jako semiotyczne właściwości znaku, które mają taką samą strukturę logiczną jak właściwości chemiczne (tzn. dynamiczną i relacyjną). Zgodnie z tymi regułami znaki można scharakteryzować poprzez dopuszczalne semiotyczne możliwości ich zmian (przekształceń), a nie poprzez właściwości strukturalne; przez przejście od statycznego do dynamicznego punktu widzenia” [Schummer, 1999, s. 193]. Podejście Schummera do wzorów strukturalnych jest próbą ujęcia ich jako nośników informacji o właściwościach chemicznych substancji, a więc także o właściwościach polegających na tworzeniu nowych substancji. Układ reguł semiotycznych mógłby zatem być rozumiany nie tylko jako rekonstrukcja reguł myślenia chemicznego, ale również jak rekonstrukcja reguł laboratoryjnych. Jednakże jego pomysł musi opierać się na założeniu, że „aby skonstruować język znaków idealny do celów chemicznych, trzeba przenieść chemiczne relacje między substancjami chemicznymi na relacje semiotyczne między wzorami strukturalnymi w taki sposób, aby każda substancja chemiczna odpowiadała jednoznacznie jednemu wzorowi strukturalnemu, a każda reguła laboratoryjna dotycząca eksperymentów chemicznych odpowiadała jednoznacznie regule semiotycznej dla wzorów strukturalnych” [Schummer, 1999, s. 193]. Podstawowe pytanie dotyczy tego, czy można skonstruować taki system reguł semiotycznych, który nie będzie odnosił się wprost do właściwości

substancji na poziomie mikro, a w sposób jednoznaczny będzie przyporządkowywał wzorom określone substancje. Rozpatrzenie tego zagadnienia wymagałoby drobiazgowej analizy koncepcji Schummera. Jednakże już jej pobieżna charakterystyka pozwala stwierdzić, że zaproponowane przez niego ujęcie wzorów strukturalnych wyklucza zastosowanie do ich analizy semiotycznej teorii sztywnego oznaczania. Schummer nie wskazuje bowiem na żadną „istotę” substancji chemicznej, która mogłaby stanowić podstawę ustalenia „sztywnej” relacji denotacji między wzorem a daną substancją.

Dotychczasowe rozważania nie dotyczyły bezpośrednio problemu, czy wzory strukturalne mogą być uznawane za znaki oznaczające w sposób sztywny strukturę cząsteczek, ujmowaną jako ich immanentna właściwość. Powyższa kwestia może być rozważana niezależnie od tego, czy wzory strukturalne ujmujemy jako ikony rozumiane klasycznie, czy uznajemy je za znaki symboliczne. Podejmując to zagadnienie, powróćmy do rozpatrzenia, podanego przez Putnama, przykładu nazwy substancjalnej „woda”. Jest rzeczą oczywistą, że powiedzieć „woda jest ciekłym H_2O ” to tyle, co uplasować to stwierdzenie w rozbudowanym systemie leksykalno-teoretycznym” [Kuhn, 1991, s. 147]. Jednakże, właśnie z leksykalno-teoretycznego punktu widzenia chemii, powiedzenie, że ‘woda to ciekłe H_2O ’, nie posiada żadnego określonego sensu. Zwróćmy uwagę na fakt, iż H_2O wyraża skład cząsteczki wody, a nie skład wody. Można by więc je rozumieć w taki sposób, że „woda składa się z cząsteczek o składzie H_2O ”. Jednakże to nie sam skład decyduje o identyczności cząsteczek tworzących daną substancję, lecz ich struktura. Cząsteczki o tym samym składzie, ale różnych strukturach, mogą ‘tworzyć’ różne substancje (reprezentować różne związki chemiczne). Trzeba by więc uwzględnić we wzorze strukturalnym wody fakt, że atomy wodoru są powiązane z atomem tlenu wiązaniami pojedynczymi, a kąt, jaki te wiązania tworzą, wynosi $104,45^\circ$. Jednak nie istnieje ciecz, która składałaby się wyłącznie z takich cząsteczek. Woda składa się z różnego rodzaju „bytów chemicznych”, np. jonów OH^- , molekuł H_4O_2 i bardziej złożonych układów. Ich liczebność zależy od temperatury i innych parametrów termodynamicznych [van Brakel, 1991, s. 147]. Tym samym struktura cząsteczek tworzących związek chemiczny, będąca właściwością mikro, zależy od własności makro (termodynamicznych). Rozważania komplikują się jeszcze bardziej, gdy uwzględnimy fakt występowania wody w różnych stanach skupienia. Jedynie w szczególnych warunkach temperatury ($0,01^\circ C$) i ciśnienia (4,58 mm Hg) woda we wszystkich trzech stanach skupienia znajduje się w stanie równowagi termodynamicznej (tzw. punkt potrójny wody).

Z punktu widzenia głównego celu tego artykułu, istotne jest to, że powyższe rozważania mają sens tylko wtedy, gdy są odniesione do pewnej ilości (porcji) wody, a nie do cząsteczki wody¹⁶. Nie można zatem zdefiniować substancji chemicznej,

¹⁶ Powyższe kwestie analizuje szczegółowo P. Needham [2000, s. 13-21].

odnosząc się tylko do wzoru tworzących ją cząsteczek. Albo definiuje się substancje chemiczne przez odwołanie się wyłącznie do właściwości makroskopowych [van Brakel, 1986, s. 291-324], albo próbuje się łączyć makroskopowe kryteria wyróżniania substancji z mikroskopowymi [Needham, 2000, s. 20-21]¹⁷. W obu ujęciach odrzuca się ideę, że właściwości makroskopowe substancji są pochodną właściwości mikroskopowych (składu i struktury), że te drugie są konieczne, a te pierwsze przypadkowe. Z tej perspektywy założenie, iż to struktura jest właściwością stanowiącą 'istotę' danego związku chemicznego, traci sens przede wszystkim dla praktyki laboratoryjnej chemii. Jednocześnie podważeniu ulega podstawowe założenie teorii sztywnego oznaczania, zgodnie z którym to struktura decyduje o 'sztywności' relacji wiążącej nazwę z jej odniesieniem. Trudności, na które napotyka się, rozważając przykład wody, stają się znacznie poważniejsze, gdy analizuje się struktury złożonych związków organicznych. Zakładając jednakże, że każdy wzór reprezentuje cząsteczkę związku chemicznego o określonej konstytucji, konfiguracji i konformacji, mogłoby się wydawać, że przynajmniej z teoretycznego punktu widzenia warunek identyczności zostaje spełniony. Zgodnie z przyjętym podejściem do terminów teoretycznych w teorii sztywnego oznaczania (wzór strukturalny niewątpliwie może być rozpatrywany jako taki termin) ich poprawne użycie rozpoznajemy po obserwowalnych zjawiskach, uwarunkowanych przyczynowo strukturą cząsteczek. Jednakże wystąpienie obserwowalnych efektów zależy nie tylko od struktury, lecz również od warunków 'makroskopowych', w których substancja złożona z cząsteczek o określonej strukturze się znajduje. Te ostatnie, sformułowane w symbolicznym języku chemii, przesądzają o tym, czy posłużenie się określonym wzorem strukturalnym związku chemicznego będzie dobrze uzasadnione w danym kontekście chemicznym, tzn. czy na przykład można użyć danego wzoru, zapisując mechanizm reakcji chemicznej, zachodzącej w określonych warunkach. Poza tym kontekstem, z punktu widzenia praktyki laboratoryjnej, wzór strukturalny związku chemicznego traci na znaczeniu.

Powyższe rozważania wykazują, że zakwestionowaniu podlega idea, że indywidua tworzące denotację nazwy substancjalnej, a więc również wzoru strukturalnego, są identyfikowane przez ich strukturę. Wynika to również z faktu, że we współczesnej chemii teoretycznej podważa się samą ideę struktury chemicznej jako immanentnej własności, którą można zawsze przypisać cząsteczkom związku chemicznego¹⁸. Badania teoretyczne i eksperymentalne dowodzą, że na strukturę cząsteczki danego związku ma wpływ bardzo wiele czynników. Tak zwany sztywny model struktury cząsteczki jest obecnie zastępowany modelem dynamicznym.

¹⁷ Powyższe uwagi dotyczące wody podważają w sposób oczywisty analizy Putnama, odwołujące się do opowieści o Ziemi 'bliźniaczej'.

¹⁸ Tę kluczową kwestię analizowałem już wielokrotnie i dlatego ograniczam się w tym względzie jedynie do uwag o charakterze podstawowym. Zobacz Zeidler [1999(a), s. 63-68; 2000(b), s. 17-34].

W modelu tym kształt cząsteczki jest pochodną jej stanu energetycznego, który zmienia się w czasie i zależy od oddziaływania z otoczeniem, np. od zderzeń z innymi cząsteczkami, od wpływu pola elektromagnetycznego i grawitacyjnego. Niekiedy cząsteczkom pewnych związków chemicznych nie sposób przypisać jakiegokolwiek struktury. Zdaniem niektórych chemików pojęcie struktury staje się metaforą, która nie reprezentuje żadnej określonej i stałej właściwości cząsteczki. Przypomnijmy również, że wielkości określające kształt cząsteczki, np. odległości między atomami, są wielkościami z poziomu mikro, a wielkości uzyskiwane z pomiarów są wielkościami makroskopowymi. W zależności od zastosowanej metody pomiaru w odmienny sposób definiujemy odległości między atomami. Tym samym kształt cząsteczki zależy od zastosowanej procedury pomiarowej, co jest związane z faktem, że „każda metoda doświadczalna wprowadza swoją transformację danych z przestrzeni mikro do przestrzeni makro” [Konarski, 1984, s. 626].

Z powyższych uwag wynika, że realistyczne ujęcie struktury jako atrybutu cząsteczki napotyka na bardzo poważne trudności. Tym samym podważeniu ulega podstawowa idea teorii sztywnego oznaczania. Struktura nie może być już dłużej uznawana za tę właściwość bytów fizycznych, która przesądza o identyczności desygnatów danej nazwy, a zarazem ustala stałą więź między znakiem (nazwą zwyczajową, nazwą systematyczną, wzorem strukturalnym) a przedmiotem oznaczanym. Reprezentowanie tej własności przez wzory strukturalne jest mitem klasycznej chemii strukturalnej. Podważeniu ulega więc koncepcja semantyczna, która miała ratować stanowisko realizmu metafizycznego. Nie istnieje coś takiego jak istotna właściwość cząsteczek – ich struktura, która mogłaby być rozpatrywana niezależnie od wiedzy, jaką na jej temat posiadamy.

Struktura cząsteczki związku chemicznego nie jest dana chemikowi w sposób bezpośredni. Jest to konstrukt teoretyczny. Posługiwanie się określonym pojęciem (modelem) struktury cząsteczki związku chemicznego zależy od rodzaju eksperymentów, do opisu których model ten stosujemy. W odniesieniu do wielu typów eksperymentów chemicznych klasyczne pojęcie struktury cząsteczki dobrze spełnia swoje funkcje: eksplanacyjną, przewidywczą i heurystyczną. W tych wszystkich przypadkach funkcje te będą również wypełniały wzory strukturalne. Jeżeli będziemy pamiętać, że struktura nie jest atrybutem cząsteczki i może ulegać modyfikacji przy zmianie stanu energetycznego cząsteczki, to o zasadności posłużenia się danym wzorem strukturalnym będzie decydował każdorazowo cały kontekst teoretyczny i eksperymentalny. W tym sensie pojęcie struktury staje się pojęciem zrelatywizowanym do kontekstu, a więc pojęciem internalistycznym. Konkluzja ta ściśle współgra z przekonaniem wielu filozofów, że nie można mówić o czymś takim jak wewnętrzne lub „istotne” własności rzeczy. W aspekcie semiotycznym przemawia ona na rzecz klasycznej deskrypcjonistycznej teorii znaczenia. Powyższe rozważania wzmacniają, jak sądzę, przekonanie, że „wpisywać w świat relację [odniesienia przedmiotowego – P.Z.] tak z gruntu ludzką i tak na wskroś intencjonalną

i zadowalać się powstałą w ten sposób wizją metafizyczną (obojętnie, czy jest się materialistą, czy nie) jest czymś zgoła absurdalnym” [Putnam, 1998(c), s. 258]. Nieprzewyciężalne trudności, związane z zastosowaniem teorii sztywnego oznaczania do wzorów strukturalnych, martwią oczywiście tych chemików, którzy właściwości mikroskopowe uznają za kryterium wyróżniające i identyfikujące dany związek chemiczny. Jednakże nic tak nie przemawia za koniecznością odrzucenia eksternalistycznego pojmowania „struktury” związku chemicznego, jak codzienna praktyka laboratoryjna chemików.

X

Metodologiczne i semiotyczne aspekty modelowania teoretycznego w chemii

1. Wstęp

Od lat dziewięćdziesiątych XX wieku zainteresowanie metodologów i filozofów nauki przesunęło się od teorii naukowych w stronę modeli teoretycznych, gdyż to te ostatnie zostały uznane za podstawowe jednostki wiedzy naukowej. Powyższy stan rzeczy w pełni odpowiada centralnej roli, jaką modele teoretyczne pełnią w praktyce badawczej chemii, w której kwestionuje się nawet samo istnienie teorii fundamentalnych¹. Natomiast modele teoretyczne, które reprezentują obiekty i zjawiska empiryczne określonego typu, są w chemii wszechobecne i determinują rozwój jej praktyki badawczej, a zwłaszcza praktyki laboratoryjnej. Ukazanie rozlicznych funkcji, jakie modele teoretyczne pełnią w tej praktyce, wymaga, choćby skrótowego, przedstawienia dotychczasowych ustaleń poczynionych w metodologicznej i filozoficznej refleksji nad tymi modelami. Zostanie ona rozszerzona o analizę ich aspektu semiotycznego, która pozwoli na modyfikację koncepcji modelu teoretycznego Petera Achinstein'a, a zarazem ukaże różnorodność i specyfikę modeli teoretycznych budowanych i stosowanych w chemii. Powyższe rozważania będą przedmiotem drugiej części artykułu. Natomiast w jego części trzeciej wykorzystam poczynione wcześniej ustalenia do analizy kilku ważnych typów modeli teoretycznych budowanych w praktyce badawczej chemii. Omówię modele wiązań chemicznych, reprezentacje graficzne i materialne struktur cząsteczek związków chemicznych, które uznaję za modele teoretyczne, a na zakończenie poddam analizie mechanizmy reakcji chemicznych, które są modelami teoretycznymi przemian chemicznych. Będę zmierzał do wykazania, że modele teoretyczne

¹ Kwestia ta jest rozważana w artykule *O teoretyczności chemii – studium metodologiczne* [Zeidler, 1999(a)], który jest również zamieszczony w niniejszym tomie.

pełnią w chemii funkcję względnie autonomicznych narzędzi konceptualnych, służących do formułowania i rozwiązywania sytuacji problemowych. Problemy, które rozwiązują chemicy, powstają zwłaszcza w trakcie ich działalności eksperymentalnej w laboratoriach, choć mają one, na ogół, swoją teoretyczną reprezentację pod postacią odpowiednich modeli.

2. O sposobie ujmowania modeli teoretycznych w filozofii nauki

2.1. Koncepcja modelu teoretycznego Petera Achinstein'a i jej modyfikacja

Zakres pojęcia „model teoretyczny” jest wyznaczany na bardzo wiele sposobów. Filozofowie nauki, którzy eksplikują to pojęcie, dążą do zawarcia w nim podstawowych właściwości, jakie posiadają modele konstruowane i stosowane w naukach empirycznych². Ponieważ celem tego artykułu jest objęcie pojęciem „model teoretyczny” bardzo szerokiej klasy wytworów badań naukowych prowadzonych w chemii, dlatego odwołam się do jego ramowej charakterystyki podanej przez Petera Achinstein'a [1968, s. 212-225]. Chociaż została ona sformułowana głównie z punktu widzenia fizyki teoretycznej, to jest „otwarta” na dopełnienia, będące rezultatem szczegółowych analiz modeli teoretycznych budowanych w różnych naukach empirycznych i dobrze wywiązuje się z roli narzędzia, służącego do analizowania – innych niż poznawcza i eksplanacyjna – funkcji pełnionych przez te modele w laboratoryjnej praktyce badawczej chemii. Składa się na nią pięć tez, które wystarczająco precyzyjnie wyróżniają klasę modeli teoretycznych spośród innych typów modeli, a zarazem pozwalają na ich odróżnienie od teorii naukowych.

Teza I. Model teoretyczny jest zbiorem założeń i postulatów odnoszących się do pewnego układu empirycznego. Na ogół są to sformułowane w pewnym języku, zazwyczaj zmatematyzowanym i zinterpretowanym, warunki określające sposób rozwiązania danego problemu. Relatywizacja modelu teoretycznego do określonego problemu i stopnia dokładności, z jakim powinien być on rozwiązany, jest jego własnością konstytutywną.

² Również sami uczeni podejmują próby zdefiniowania pojęcia „model teoretyczny”. Na przykład fizycy teoretycy modelami teoretycznymi nazywają zazwyczaj układy równań wraz z warunkami ich rozwiązywalności [Kopczyński, Trautman, 1981, s. 20-36]. Jeśli nawet powyższą definicję uzupełni się o konieczny warunek, mówiący o empirycznej interpretacji terminów występujących w językowym sformułowaniu modelu, to i tak podana definicja będzie zdecydowanie zbyt wąska.

Teza II. Modele teoretyczne ukazują wewnętrzną strukturę, skład i mechanizm modelowanych układów empirycznych, które manifestują się obserwowalnymi właściwościami tych ostatnich.

Teza III. Założenia konstytuujące modele teoretyczne są uznawane za przybliżenia użyteczne do realizacji określonych celów badawczych. Ta właściwość modeli teoretycznych wiąże się ściśle z ich – wskazaną w tezie I – aspektowością. Model teoretyczny jest więc symbolicznym, a zarazem uproszczonym przedstawieniem obiektu modelowanego.

Teza IV. Modele teoretyczne są konstruowane w oparciu o bardziej podstawowe teorie (teorie fundamentalne). Jeśli więc można o modelu teoretycznym powiedzieć, że jest teorią, to jest on teorią określonego rodzaju układów empirycznych. Nie jest natomiast uzasadnione, w świetle powyżej sformułowanych tez, stwierdzenie, że teoria fundamentalna jest modelem teoretycznym.

Teza V. Modele teoretyczne mogą ukazywać podobieństwo, pod pewnymi istotnymi względami, między modelowanymi obiektami a innymi układami empirycznymi. Na przykład model teoretyczny oscylatora mechanicznego ukazuje jego podobieństwo do fizycznie odmiennych układów empirycznych, gdyż mogą być one reprezentowane za pomocą tej samej funkcji okresowej, która opisuje ruch oscylatora mechanicznego [Achinstein 1968, s. 212-225].

Formułowane w ciągu ostatnich kilkudziesięciu lat koncepcje modeli teoretycznych kładły nacisk na wybrane aspekty charakterystyki podanej przez Achinsteina. Propozycję, zgodnie z którą działalność uczonych w zakresie zmatematyzowanych nauk empirycznych polega przede wszystkim na konstruowaniu modeli, przedstawił Wojciech Sady [Sady, 1980, s. 119-131]. W jego ujęciu: „Model jest to opis zjawiska taki, że w opisie tym spełnione są prawa nauki” [Sady, 1980, s. 119]. To modele stanowią reprezentację świata, a sposób ich konstrukcji zależy od aparatu pojęciowego teorii, w którym są one budowane, a dokładniej, to prawa nauki określają reguły konstruowania modeli [Sady, 1980, s. 120].

Do zmatematyzowanych nauk empirycznych odnosi się również koncepcja, zgodnie z którą model teoretyczny jest utożsamiany z eksplanans w nomologiczno-dedukcyjnej koncepcji wyjaśniania Hempela-Oppenheima. Szczegółowe analizy ujętego w ten sposób modelu teoretycznego wiązały się na przykład z analizą założeń idealizacyjnych występujących w prawach teorii oraz założeń idealizacyjnych związanych z modelowanym układem empirycznym³. Dla eksplikowanych w powyższy sposób modeli teoretycznych kluczowe znaczenie posiada relacja między teorią, modelem a doświadczeniem. Jeśli zakłada się, tak jak to czyni

³ Szczegółowe analizy tak rozumianego modelu teoretycznego można znaleźć w pracy: [Grabińska, 1993].

Nancy Cartwright, że prawa fundamentalne teorii można traktować jedynie instrumentalnie, gdyż ze względu na warunki *ceteris paribus* nie odnoszą się one do rzeczywistych układów empirycznych, to nie pełnią one funkcji opisującej, a jedynie funkcję wyjaśniającą. Jednakże mogą one wyjaśniać wyłącznie zjawiska zachodzące w modelach, a więc w odpowiednio skonstruowanych obiektach zwanych *symulakrami*, które tylko „imitują” rzeczywiste układy empiryczne⁴.

Zarysowane powyżej propozycje ujęcia modeli teoretycznych formułowanych w zmatematyzowanych naukach empirycznych napotykać na problemy, dotyczące – już wspomnianych – trudności z jednoznaczną interpretacją semantyczną języka teorii empirycznej. Interpretacja języka teorii empirycznej posiada charakter uniwersalny, co oznacza, że określony jest jedynie zakres dziedzin przedmiotowych, do opisu których język teorii może być stosowany. Dlatego fundamentalne teorie empiryczne pełnią przede wszystkim funkcję heurystyczną, polegającą na dostarczaniu języka, w którym konstruuje się modele teoretyczne możliwie szerokich klas układów empirycznych. Jednoznaczną interpretację semantyczną może zatem posiadać język teorii, w którym zbudowany jest model teoretyczny. Jest to jego interpretacja lokalna, wyznaczona za pomocą odpowiednich procedur pomiarowych stosowanych w odniesieniu do danego typu układów empirycznych, które podlegają modelowaniu⁵. Zachodzi wzajemne sprzężenie pomiędzy modelem teoretycznym a procedurami pomiarowymi, nadającymi sens empiryczny terminom użytym do jego budowy⁶.

Jednakże wiele modeli teoretycznych budowanych i stosowanych we współczesnej praktyce badawczej chemii, a zwłaszcza w jej praktyce laboratoryjnej, nie podpada pod podaną przez Achinsteina charakterystykę „modelu teoretycznego” i dlatego zaproponuję jej modyfikację. W ujęciu autora *Concepts of Science* modele teoretyczne są tworamii lingwistycznymi, które od strony semiotycznej są znakami symbolicznymi. Przyjmuje się powszechnie, że to, co charakterystyczne dla modeli teoretycznych tego typu, to istnienie funkcji interpretacji, która jest funkcją przekładającą zdania o modelu na zdania o układzie modelowanym⁷. Natomiast

⁴ Koncepcję wyjaśniania teoretycznego za pomocą symulaków, która wykorzystuje prawa fundamentalne rozumiane instrumentalnie, przedstawiła Nancy Cartwright w: [Cartwright, 1983, s. 143-162].

⁵ Rozróżnienie na uniwersalną (referencjalną) interpretację języka teorii empirycznej i lokalną (proceduralną) interpretację terminów, wykorzystywanych do konstrukcji modelu teoretycznego, wprowadził R. Wójcicki [1995/1996, s. 510-514].

⁶ Zagadnienie to omówiłem szczegółowo w artykule *O teoretyczności chemii – studium metodologiczne* na przykładzie interpretacji proceduralnej długości wiązań chemicznych, która zależy od założonego modelu ruchów wewnętrznych w cząsteczce [Zeidler, 1999(a), s. 66-67].

⁷ Koncepcję modelu teoretycznego, w którym centralną rolę odgrywa funkcja reprezentowania, zwana funkcją kodu interpretacyjnego, rozwinął R. Wójcicki w książce *Teorie w nauce* [1991, s. 75-84].

reprezentacje graficzne bądź materialne, podobne choćby ze względu na niektóre właściwości do układów reprezentowanych, są uznawane za znaki ikoniczne. Jednakże w literaturze z zakresu semiotyki wykazano, że każdy znak ikoniczny jest zarazem znakiem symbolicznym, gdyż podobieństwo między nim a układem przez niego reprezentowanym można ustalić tylko wtedy, gdy założy się odpowiednie konwencje. Przykładem takich znaków (modeli) w chemii są wzory strukturalne oraz modele materialne struktur cząsteczek związków chemicznych. Modele te są uważane za reprezentacje struktur rzeczywistych cząsteczek, gdyż istnieje funkcja reprezentowania, która odpowiednim znakom graficznym lub materialnym składnikom modelu przypisuje odpowiednie elementy układu modelowanego⁸. Modelami teoretycznymi będą zatem nie tylko układy twierdzeń, lecz również, zbudowane zgodnie z przyjętymi założeniami teoretycznymi, graficzne bądź materialne reprezentacje układów empirycznych, które od strony semiotycznej należy uznać za reprezentacje (modele) o charakterze ikoniczno-symbolicznym⁹. W odniesieniu do tezy III należy zauważyć, że modele teoretyczne są często budowane na gruncie kilku różnych teorii podstawowych, a niekiedy w konstrukcji modelu używa się terminów, które nie należą do żadnej systematycznej teorii naukowej. Dotyczy to zwłaszcza modeli teoretycznych budowanych na potrzeby praktyki laboratoryjnej nauk przyrodniczych. W przypadku ikoniczno-symbolicznych modeli teoretycznych elementy, z których są one konstruowane, mogą należeć do różnych systemów znaków graficznych lub zbiorów przedmiotów materialnych, np. odpowiednich kul i prętów, za pomocą których konstruuje się modele kulowo-prętowe struktur cząsteczek związków chemicznych.

Proponowana w tym artykule modyfikacja koncepcji modelu teoretycznego Achinstein'a polega również na zmianie sposobu, w jaki model teoretyczny reprezentuje obiekt modelowany. Choć wśród tez składających się na charakterystykę modelu teoretycznego nie ma tezy mówiącej wprost, że model reprezentuje strukturę obiektu modelowanego, to można uznać, że jest ona konsekwencją zwłaszcza tezy II i tezy III. Realizm strukturalny jest jedną z najbardziej rozpowszechnionych form współczesnego realizmu naukowego. W skrajnej wersji stanowisko to głosi, że podobieństwo modelu do modelowanego układu empirycznego zachodzi ze względu na wszystkie znane własności i relacje charakteryzujące ten układ. Stanowisko to jest nie do utrzymania chociażby ze względu na, zakładany przez Achinstein'a, aspektowy i przybliżony charakter modeli teoretycznych. Natomiast, zdaniem Ronalda Gierego, można argumentować na rzecz umiarkowanego realizmu

⁸ Realistyczne ujęcie funkcji reprezentowania zostanie poddane krytyce w następnym paragrafie tego artykułu.

⁹ Proces deikonizacji znaków ikonicznych w semiotyce współczesnej, który doprowadził do uznania ich za znaki ikoniczno-symboliczne, omówiłem w artykule *Semiotyczny i poznawczy status wzorów strukturalnych związków chemicznych a przyczynowa teoria oznaczania* [2001], który został również zamieszczony w niniejszym tomie.

strukturalnego, zgodnie z którym rzeczywisty układ empiryczny jest podobny do modelu pod określonymi względami i w określonym stopniu [Giere, 1985, s. 80]. Jednakże nawet tak osłabione stanowisko realizmu strukturalnego jest trudne do obrony zwłaszcza w odniesieniu do modeli, które mają reprezentować zjawiska zachodzące w mikroświecie. Eksplikując pojęcie modelu strukturalnego, przyjmuje się, że zachodzi stopniowalne podobieństwo struktur formalnych, będących reprezentantami modelu i modelowanego układu empirycznego, a funkcja reprezentacji ustala związek analogii między tymi strukturami¹⁰. Aby stwierdzić zachodzenie podobieństwa, trzeba zatem mieć możliwość ustalenia struktury nie tylko modelu, lecz również układu modelowanego. Można by sądzić, że to wyniki pomiarów odpowiednich wielkości konstytuują strukturę modelowanego układu empirycznego. Jednakże obiekt modelowany nie jest dany badaczowi bezpośrednio, a jedynie jako układ teoretycznie skonceptualizowany, a więc przedmiot, który – podobnie jak sam model – jest konstruowany przez uczonych. To oni decydują, na gruncie jakiej teorii dokonują konceptualizacji układu empirycznego, a metody pomiaru odpowiednich wielkości, a tym samym wartości tych wielkości, zależą również od zaproponowanego modelu teoretycznego. Uzyskiwane z pomiaru wartości odpowiednich wielkości mają sens empiryczny określony przez zastosowane metody pomiaru, które jednocześnie nadają lokalną interpretację empiryczną terminom teorii użytym do budowy modelu. Dlatego wartości odpowiednich wielkości otrzymane z pomiaru mogą weryfikować zaproponowany model teoretyczny. Konsekwencją opisanego stanu rzeczy jest to, że model i reprezentowany przez niego skonceptualizowany teoretycznie układ empiryczny nie mogą być analizowane oddzielnie. Reprezentacja, jaką jest model teoretyczny, odnosi się do skonceptualizowanego teoretycznie układu empirycznego, a więc do reprezentacji danych doświadczenia, która z kolei – w procesie weryfikacji – ma wpływ na konstrukcję modelu teoretycznego. Można zatem powiedzieć, że obiekt reprezentowany determinuje właściwości reprezentacji (modelu), a reprezentacja określa właściwości obiektu reprezentowanego¹¹.

Drugi problem, na jaki napotyka stanowisko realizmu strukturalnego, jest pochodną możliwości zbudowania różnych modeli teoretycznych tego samego układu empirycznego, które mogą być niewspółmierne wówczas, gdy albo zostały skonstruowane na gruncie niewspółmiernych teorii, albo zastosowano całkowicie odmienne metody pomiaru wartości odpowiednich wielkości, które tym samym nabierają odmiennej interpretacji proceduralnej¹².

¹⁰Logiczne podstawy analogii przedmiotowej zostały omówione w pracy: [Tworak, 1997, s. 27-33].

¹¹S. Woolgar mówi w tym kontekście o zwrotności relacji reprezentacji i określa występowanie tej własności mianem jednego z *horrorów* reprezentacji [Woolgar, 1988, s. 22].

¹²Jest to kolejny z *horrorów* reprezentacji opisany przez Woolgara [Woolgar, 1988, s. 22].

Powyższe, omówione skrótowo, trudności traktowania modeli teoretycznych jako modeli strukturalnych prowadzą do wniosku, że należy poszukiwać odmiennej interpretacji statusu poznawczego modelu teoretycznego. W jednym z wcześniejszych artykułów zaproponowałem ujęcie modeli teoretycznych jako modeli informacyjnych, które są nośnikami informacji o skonceptualizowanym teoretycznie układzie empirycznym [Zeidler, 1996, s. 73-86]. Modele teoretyczne dostarczają informacji o układzie empirycznym, lecz nie pozostają w stosunku podobieństwa do jego struktury, gdyż takiej relacji nie można między nimi ustanowić. Analiza modeli struktur cząsteczek związków chemicznych stanowi dobrą egzemplifikację powyższych rozważań. Zostanie ona przeprowadzona w trzeciej części artykułu. Obecnie przedstawię ewolucję poglądów na temat funkcji modeli teoretycznych w naukach empirycznych.

2.2. Ewolucja poglądów na rolę modeli teoretycznych w naukach empirycznych

Można przyjąć, że idea uznania modeli teoretycznych za podstawowe nośniki wiedzy, a zarazem podstawowe narzędzia badań naukowych, pochodzi od Nancy Cartwright. Przedstawiła ona oryginalne ujęcie „skrzynki narzędziowej nauki”, w której mieszczą się zarówno teorie naukowe, jak i matematyczne techniki dokonywania obliczeń, metody aproksymacji i ekstrapolacji, a także procedury badawcze stosowane w pracy laboratoryjnej [Cartwright, Shomar, Suarez, 1995, s. 137-149]. Składniki te nie powinny być rozpatrywane jako elementy twierdzeń o naturze lub strukturze rzeczywistości, którym można by przypisać wartość logiczną. Należy je uznawać za narzędzia umożliwiające, między innymi, konstrukcję modeli teoretycznych, które – zdaniem Cartwright – są uważane przez uczonych za podstawowe jednostki wiedzy, pełniące funkcję reprezentowania badanych układów empirycznych. Dzięki temu modele odgrywają kluczową rolę w projektowaniu badań naukowych i rozwoju technologii. Cartwright koncentruje swoją uwagę na badaniu relacji, w jakich instrumentalnie rozumiane teorie pozostają z realistycznie ujmowanymi modelami teoretycznymi, a te z kolei z danymi doświadczenia, gdyż teoria posiada kontakt z empirią jedynie za pośrednictwem modeli. W ujęciu Margaret Morrison i Mary Morgan modele teoretyczne stają się autonomicznymi instrumentami badania naukowego, gdyż nie są ani wyprowadzane z teorii, ani konstruowane wyłącznie z dostępnych danych empirycznych [Morrison, Morgan, 1999, s. 11-37]. Ważną konstatacją autorek jest to, że teoria nie dostarcza jednoznacznych reguł budowania modeli. Modele, choć są podstawowymi narzędziami stosowanymi w nauce, są konstruowane po to, by na różne sposoby reprezentować zarówno świat, jak i teorie naukowe. Dzięki temu można za ich pomocą interweniować w świat i modyfikować teorie, a także uczyć się tak teorii, jak i świata.

Modele teoretyczne pełnią istotną, jeśli nie centralną, rolę zarówno w konstrukcji ogólnej teorii opisującej szeroką klasę zjawisk, a także mogą być użyte do projektowania działań prowadzących do wytworzenia tych zjawisk. Bardzo dobrym przykładem jest wykorzystanie wzorów i równań chemicznych zarówno w celu wprowadzenia szeregu podstawowych pojęć chemicznych, które umożliwiły sformułowanie wielu praw i reguł chemicznych, jak i do projektowania przemian chemicznych, które doprowadziły do otrzymania nowych związków.

Modele teoretyczne umożliwiają poprawienie pewnych elementów teorii lub mogą zachęcać do szczegółowych badań nad niektórymi aspektami teorii i tym samym umożliwić ich modyfikacje. Pełniąc takie funkcje względem teorii, są zazwyczaj empirycznie testowane lub wykorzystywane w trakcie projektowania eksperymentów. Egzemplifikacji w tym względzie dostarczają nie tylko przykłady z fizyki, chemii i biologii, lecz również z ekonomii.

Autonomiczność modeli teoretycznych sprawia, że mogą być wartościowymi narzędziami do badania tych procesów, których nie można opisać za pomocą istniejących teorii. Mogą również być stosowane bezpośrednio w procesie eksperymentowania, np. przy obliczaniu ilości substratów, które powinny być użyte w projektowanej syntezie chemicznej.

Najbardziej konsekwentne ujęcie modelu teoretycznego jako narzędzia działania eksperymentalnego i technologicznego przedstawiła Evelyn Fox Keller [Keller, 2000, s. 72-86]. Uważa ona, podobnie jak „nowi eksperymentalisci” oraz wielu przedstawicieli nauk laboratoryjnych, iż rola teorii fundamentalnych jest w tych naukach bardzo ograniczona. Zdaniem tej autorki w biologii bardzo dyskusyjny jest sam fakt występowania teorii fundamentalnych, a dotyczy to również, jak wykazywałem w innych artykułach zawartych w tym tomie, chemii. Dlatego ujmowanie modeli teoretycznych głównie jako nośników wiedzy, pośredniczących pomiędzy teorią a badanymi układami empirycznymi, nie wydaje się uzasadnione. Modele teoretyczne powinny być uznawane za podstawowe narzędzia, dzięki którym możemy projektować, wykonywać i weryfikować eksperymenty, a także przekształcać zastane i wytwarzać nowe obiekty i zjawiska empiryczne, a ich rola jako reprezentacji układów empirycznych jest drugorzędna. Ta ostatnia teza, sformułowana przez Keller, jest dyskusyjna z realistycznego punktu widzenia, zgodnie z którym modele teoretyczne mogą być efektywnymi narzędziami praktyki badawczej, gdyż reprezentują, chociażby pod względem struktury, układy empiryczne.

Rozważania przeprowadzone w tej części artykułu skłaniają do sformułowania wniosku, że definicja funkcji reprezentowania badanego układu empirycznego przez model teoretyczny powinna *explicite* zawierać podmiot, który posługuje się modelem teoretycznym w określonym celu. Takie ujęcie reprezentacji zaproponował R. Giere: „S używa X do reprezentowania W w celach P” [Giere, 2004, s. 742-752]. S może reprezentować indywidualnego badacza, grupę badaczy lub całą społeczność naukową. X reprezentuje różnego rodzaju modele, które podpadają

pod przyjęte w tym artykule określenie modelu teoretycznego. Natomiast W jest aspektem rzeczywistego układu empirycznego, który jest modelowany. Wprowadzenie celów P, ze względu na które konstruuje się model, przesądza o konieczności wprowadzenia podmiotu, który te cele wybrał. Ponieważ konstruuując model, chcemy rozwiązać jakiś problem badawczy, to można przyjąć, że cele, ze względu na które podmiot S buduje model X, będą należały do zbioru problemów badawczych sformułowanych przez badaczy w danej dziedzinie wiedzy.

2.3. Modele teoretyczne jako relatywnie autonomiczne narzędzia rozwiązywania sytuacji problemowych

Modele teoretyczne rozpatruję w kontekście ujęcia koncepcji procesu badawczego zaproponowanego przez Johna Deweya. Modele teoretyczne są więc rozumiane jako najbardziej efektywne, konceptualne narzędzia służące do przekształcania sytuacji problemowych. Modele są narzędziami projektowania i wytwarzania nie dlatego, że są replikami układów modelowanych, lecz dlatego, że dostarczają informacji o tych układach, które umożliwiają interweniowanie w świat. Nawiązując do poglądów Hackinga i Cartwright, można powiedzieć, że dostarczają informacji, które umożliwiają ustalanie związków przyczynowo-skutkowych niezbędnych do takiej interwencji.

Zaproponowane przez Deweya podejście do procesu badawczego jako do działalności polegającej na rozwiązywaniu problemów, a właściwie przekształcaniu sytuacji problemowych, zakłada, iż rolę narzędzi pełnią idee (myśli). Nie dostarczają one reprezentacji faktów, lecz są instrumentami, za pomocą których konstytuujemy sytuacje problemowe i myślowo je przekształcamy. Wprawdzie analiza procesu poznania dokonana przez tego autora jest najczęściej odnoszona do idei – pojęć lub myśli, to zasadne jest przyjęcie interpretacji, zgodnie z którą „Deweyowskie idee to ‘twory’ kolektywne, to znaczy swego rodzaju ciągi, zbiory, układy. W szczególności zbiory zdań (sądów), pojęć, na przykład tak wysoko zorganizowane zbiory-układy, jak teorie, systemy” [Chwedeńczuk, 1984, s. 178]. Cytowany autor uważa, iż Dewey – przypisując swoim ideom funkcje opisu i wyjaśniania sytuacji problemowych oraz funkcję projektowania sposobów rozwiązania tych sytuacji – nie mógł utożsamiać idei z pojedynczymi sądami czy zdaniem. O ujmowaniu idei jako złożonych tworów konceptualnych ma świadczyć również fakt, że zawierają one, w przekonaniu amerykańskiego pragmatysty, dwa składniki „korespondencyjne”. Jeden umożliwia „adekwatne odtworzenie tego, co zastane”, a drugi adekwatną „zapowiedź tego, co nastąpi” [Chwedeńczuk, 1984, s. 178]. Kolejny argument na rzecz powyższej tezy wypływa z faktu, że istota instrumentalizmu Deweya wyraża się w tym, iż idee muszą niejako zawierać instrukcje działania, a to jest możliwe tylko wtedy, gdy są one tworami złożonymi [Chwedeńczuk, 1984, s. 179].

Z rozważań zawartych we wcześniejszych paragrafach wynika, że funkcji reprezentowania konkretnych układów empirycznych, z której wypływałyby imperatywy działania, nie można przypisywać teoriom naukowym. Dlatego założę, iż za owe „wysoko zorganizowane zbiory-układy”, które są ideami (narzędziami), za pomocą których przekształcamy sytuacje problemowe, należy uznać modele teoretyczne. Dewey, znajdując się pod wpływem operacjonizmu Bridgmana, podkreślał rolę różnego rodzaju operacji w postępowaniu badawczym. Kładąc nacisk na eksperymentalne aspekty tego postępowania, uznawał, że przedmiot poznania jest konstrukcją lub raczej rekonstrukcją tworzoną przez podmiot w oparciu o dokonywane obserwacje, eksperymenty i pomiary. Tym samym naturalne wydaje się przyjęcie tezy, że terminy, przy użyciu których konstruujemy modele, uzyskują interpretację proceduralną w ich konkretnych zastosowaniach. Ponieważ model teoretyczny jako wyodrębniona, autonomiczna jednostka pełni funkcję narzędzia, więc jego sens również powinien być określony przez operacje wykonywane za jego pomocą. Tym samym dokonujemy podwójnej operacyjnej interpretacji modeli teoretycznych. Z jednej strony operacyjnie (proceduralnie) interpretowane są terminy, w których konstytuujemy model; z drugiej strony model teoretyczny, jako autonomiczna jednostka sensu, też posiada interpretację operacyjną. Dzieje się tak dlatego, że posługując się modelami w różnych celach badawczych i praktycznych, równocześnie poddajemy je weryfikacji, co prowadzi do ukonstytuowania przedmiotu badania – sytuacji problemowej. Model jest wartościowym narzędziem wówczas, gdy umożliwia jej rozwiązanie. Modele budowane w celu rozwiązywania problemów badawczych (teoretycznych i eksperymentalnych) oraz praktycznych nie mogą tylko pełnić funkcji opisowej, lecz są imperatywami działania. Mówią, co należy zrobić, aby rozwiązać dany problem (przekształcić sytuację problemową).

Zaproponowane powyżej podejście do modeli teoretycznych jako podstawowych narzędzi rozwiązywania sytuacji problemowych jest zgodne z pierwszą tezą Achinstein. Przyjął on, o czym była mowa w paragrafie 2.1, iż podstawowym wyróżnikiem modeli teoretycznych jest to, że są one formułowane w celu rozwiązywania problemów badawczych. Inne cele, którym – zdaniem Achinstein – służy budowanie modeli, a więc chęć ukazania wewnętrznej struktury, składu i mechanizmu układu empirycznego, posiadają charakter wtórny, choć często jest tak, że ukazanie przez model wewnętrznej struktury danego układu empirycznego, np. struktury DNA, niejako implikuje różnego rodzaju mechanizmy, np. replikacji DNA i – pośrednio – sposobu syntezy białek, a w konsekwencji umożliwia określone działania praktyczne, np. w zakresie inżynierii genetycznej.

Modele teoretyczne jako wytwory badań naukowych, a zarazem narzędzia, za pomocą których konceptualizujemy sytuacje problemowe i je rozwiązujemy, są znakami. Kluczowy jest ich aspekt poznawczy, a właściwie metodologiczny, gdyż zgodnie z propozycją Deweya poznanie ujmujemy instrumentalnie, a znaki

(modele) uznajemy za narzędzia badawcze. Aby ich semiotyczna analiza odślaniała metodologiczne funkcje znaków (modeli), należy wybrać odpowiedni aparat pojęciowy, w którym będzie ona dokonywana. W kontekście prowadzonych w tym artykule rozważań wydaje się czymś naturalnym, aby odwołać się w tym względzie do semiotyki pragmatysty amerykańskiego Charlesa Sandersa Peirce'a. Nie tylko umożliwia ona charakterystykę różnego typu znaków (modeli), lecz przede wszystkim pozwala na wydobycie ich dynamiczno-praktycznych aspektów, które odgrywają kluczową rolę wówczas, gdy znaki (modele) są ujmowane jako narzędzia stosowane do rozwiązywania problemów badawczych (teoretycznych i eksperymentalnych) oraz problemów praktycznych i technologicznych¹³. Problemy rozwiązuje się na drodze rozumowań, a te ostatnie Peirce utożsamia ze znakami. Model teoretyczny może być traktowany jako rekonstrukcja określonego rozumowania lub jego składnik.

Peirce wprowadził do swojej koncepcji semiotycznej zasadę pragmatyzmu, która głosi, że każdy znak musi wśród swoich interpretantów posiadać taki, który mówi o ludzkim działaniu [Buczyńska-Garewicz, 1994, s. 105]. Zasada pragmatyczna dookreśla znaczenie każdego znaku w tym sensie, że musi się ono przekładać na nasze działanie, przy czym „nie ustala faktycznego związku między konkretną myślą a konkretnym czynem, ustala tylko logiczny związek między myślą o świecie a myślą o działaniu, między opisem a maksymą praktyczną” [Buczyńska-Garewicz, 1994, s. 107]. Tym samym „zasada pragmatyczna określa interpretant znaku jako sąd warunkowy, którego następnik jest imperatywem działania. Można ją więc rozumieć jako zasadę czysto formalną, mówiącą, że wszelka wiedza musi być przekładalna na imperatyw hipotetyczny. [...] Pragmatyzm jest teorią interpretanta znaku, teorią interpretacji deskrypcji przez dyrektywę, trybu oznajmującego przez imperatyw warunkowy” [Buczyńska-Garewicz, 1994, s. 107]. Imperatyw hipotetyczny można więc zrekonstruować jako zdanie warunkowe typu: „Jeśli jest tak a tak, to zrób to a to”. Jego sformułowanie w odniesieniu do danego znaku oznacza, że znaczenie znaku nabrało charakteru ostatecznego w tym sensie, że może zostać już ono empirycznie zweryfikowane. Ewentualny negatywny wynik takiej weryfikacji może skłaniać do dalszego kontynuowania procesu semiozy i zbudowania zmodyfikowanego lub zasadniczo zmienionego imperatywu hipotetycznego. Zmiana deskrypcji znajdującej się w poprzedniku pociąga za sobą zmianę imperatywu działania. Ponieważ zasada pragmatyczna wiąże znaczenie znaku z jego przyszłym możliwym zastosowaniem, dlatego koncepcja Peirce'a

¹³Semiotyczne poglądy Ch. S. Peirce'a są ciągle w fazie opracowywania i analiz, lecz w polskiej literaturze przedmiotu można już znaleźć próby ich spójnego przedstawienia. Jedna z nich została zaproponowana przez Hannę Buczyńską-Garewicz [1994], a inna przez Tomasza Komendzińskiego [1996]. Ponieważ koncepcja Peirce'a jest niezwykle rozbudowana, wykorzystuję jedynie pewne jej elementy, które są, moim zdaniem, istotne z punktu widzenia analizy modeli teoretycznych ujmowanych jako znaki.

może być odniesiona do modeli teoretycznych, które ujmują jako znaki, za pomocą których rozwiązuje się problemy badawcze, a zwłaszcza problemy powstające w praktyce eksperymentalnej lub w szeroko rozumianej praktyce i technologii¹⁴. Jest to zgodne z perspektywą przyjętą w tej książce, zgodnie z którą analiza eksplanacyjnej i reprezentacyjnej funkcji modeli teoretycznych schodzi na drugi plan i ustępuje analizie szeroko rozumianej funkcji prognostycznej. Modele (znaki), za pomocą których projektujemy, np. przebieg syntezy organicznej, przekładają się na odpowiednie dyrektywy, np. stanowiące określoną preparatykę, a w konsekwencji na konkretne działania, np. chemika w laboratorium. Zagadnienie to stanie się przedmiotem bardziej szczegółowej analizy w paragrafie 3.3.

Imperatywy hipotetyczne można formułować dla modeli budowanych nie tylko w naukach przyrodniczych, lecz także w naukach społecznych oraz w tzw. naukach stosowanych, np. w ekonomii i w tych dziedzinach nauki, których zadaniem jest prognozowanie globalnych zmian atmosfery na kuli ziemskiej. Dopiero sformułowanie odpowiedniego imperatywu działania czyni z modelu potencjalne narzędzie, które może być użyteczne w badaniach naukowych i w różnych dziedzinach praktycznej działalności człowieka.

3. Przykłady modeli teoretycznych w praktyce badawczej chemii

W praktyce badawczej chemii modele teoretyczne stanowią najczęstszy sposób reprezentowania obiektów i zjawisk chemicznych. Nie tylko służą do wyjaśniania i przewidywania procesów chemicznych, ale są podstawowym narzędziem konceptualnym, umożliwiającym projektowanie nowych związków chemicznych oraz przemian prowadzących do ich powstania. Będę się starał uzasadnić tezę, że modele teoretyczne sterują praktyką laboratoryjną chemików. Przedstawię zatem przykłady najważniejszych typów modeli teoretycznych budowanych w chemii, zaczynając od modeli wiązań chemicznych, które są elementami składowymi modeli struktur cząsteczek związków chemicznych, które omówię w następnej kolejności. Zakończę prezentację na analizie modeli przebiegu przemian chemicznych, które wykorzystują wcześniej omówione modele.

¹⁴Dla Peirce'a metoda pragmatycznego określania sensu znaków nie różniła się zasadniczo od metody eksperymentalnej, która była rozwijana przez Deweya. Zobacz w: [Buczyńska-Garwicz, 1994, s. 108].

3.1. Modele wiązań chemicznych jako fundament praktyki badawczej chemii

Co sprawia, że atomy mogą łączyć się ze sobą i tworzyć trwałe cząsteczki? Powyższe pytanie stawiane przez chemików wyróżnia problematykę badawczą chemii spośród innych nauk przyrodniczych. Odpowiedź na nie wydaje się prosta. To wiązania między atomami decydują o trwałości, strukturze i własnościach cząsteczek związków chemicznych, a w konsekwencji o ich reaktywności. Jednakże pojęcie wiązania chemicznego ukształtowało się w nowożytnej chemii relatywnie późno. Za pierwszą dojrzałą koncepcję wiązania chemicznego należy uznać koncepcję wiązania jonowego Berzeliusa, zgodnie z którą wiązanie powstaje w wyniku oddziaływania elektrostatycznego dwóch atomów, a właściwie jonów o różnych ładunkach¹⁵. Koncepcja ta z powodzeniem mogła być stosowana do wyjaśniania właściwości związków nieorganicznych, lecz zawodziła w przypadku molekuł organicznych.

Przełom w ujęciu wiązania chemicznego nastąpił wraz z pierwszymi pracami dotyczącymi budowy atomu¹⁶. Hipotezę elektronowej natury wiązania chemicznego wysunął J. Thomson w roku 1907. Jednakże zasadnicze znaczenie dla dynamicznego rozwoju chemii miała elektronowa koncepcja wiązania chemicznego G. Lewisa z roku 1916, która wykorzystywała niektóre założenia tzw. starej teorii kwantów Bohra. W każdym atomie istnieje – zdaniem Lewisa – rdzeń, który w przemianach chemicznych nie ulega zmianom i który posiada ładunek dodatni. Jest on otoczony powłoką zewnętrzną, która w przypadku atomu obojętnego zawiera ujemnie naładowane elektrony w takiej liczbie, że ładunek dodatni rdzenia jest neutralizowany. Atomy wchodzące w związki z innymi atomami dążą do zachowania na powłoce zewnętrznej parzystej liczby elektronów, a najtrwalszy jest układ, który zawiera osiem elektronów. W przeciwieństwie do Bohra, który zakładał, że elektrony krążą po orbitach kołowych, Lewis przyjmował, że są one rozmieszczone symetrycznie w ośmiu wierzchołkach sześcienu. Ten sposób przedstawiania powłoki zewnętrznej (walencyjnej) atomów stanowił podstawę zaproponowanych przez tego autora modeli wiązań chemicznych. Wiązanie pojedyncze miało powstawać w wyniku stykania się krawędziami dwóch sześciennych powłok zewnętrznych atomów, przy czym na każdej z łączących się krawędzi mógł być tylko jeden

¹⁵W literaturze z zakresu historii chemii za twórcę koncepcji wiązania jonowego uznaje się zazwyczaj albo Helmholtza, albo Arrheniusa, który był twórcą teorii dysocjacji jonowej. Jednakże to tzw. *dualistyczna teoria elektrochemicznej budowy związków chemicznych* Berzeliusa z lat 1818-1819 zawiera centralną ideę wiązania jonowego, które łączy atomy (jony) różnych pierwiastków o przeciwnych ładunkach. O koncepcji Berzeliusa i o jej ograniczeniach zob. w: [Mierzecki, 1985, s. 148-150].

¹⁶Proces ewolucji pojęcia wiązania chemicznego omówił szczegółowo David Bantz [1980, s. 291-329].

elektron. W ten sposób dochodziło do utworzenia wspólnej pary elektronów identyfikowanej z wiązaniem pojedynczym. Do powstania wiązania podwójnego dochodziło wówczas, gdy powłoki zewnętrzne dwóch atomów stykały się ścianami, a każda ze ścian tworzących wiązanie podwójne mogła na narożnikach posiadać tylko dwa elektrony. Idea reprezentacji struktury powłoki zewnętrznej (walencyjnej) atomu za pomocą sześcianu wyjaśniała dążenie atomu do posiadania na tej powłoce oktetu elektronów, który był uznawany za układ stabilny. Jednakże taka reprezentacja wiązań w cząsteczce nie była poręczna i stwarzała trudności, na przykład przy wyjaśnianiu reaktywności atomu węgla, którą znacznie łatwiej można było wytłumaczyć, zakładając, że jego powłoka walencyjna ma strukturę czworoscianu foremego, w wierzchołkach którego mogą się znajdować maksymalnie po dwa elektrony. Lewis nie potrafił w sposób przekonujący wyjaśnić, jak dochodzi do zmiany aranżacji przestrzennej powłoki walencyjnej w atomach niektórych pierwiastków, oraz tego, jak możliwe jest utworzenie wiązania potrójnego. Koncepcja Lewisa napotykała na jeszcze jedną poważną trudność. Nie można było w jej ramach pojęciowych wytłumaczyć, jak para elektronów może tworzyć stabilny układ, skoro elektrony, jako ładunki ujemnie naładowane, się odpychają. Ta wewnętrzna trudność koncepcji Lewisa została usunięta dopiero w roku 1925, kiedy to G. Uhlenbeck i S. Goudsmit wprowadzili pojęcie spinu elektronu.

Koncepcja Lewisa została zmodyfikowana i spopularyzowana przez Langmuira, który wyraźnie sformułował ideę, że atomy tworzące wiązanie dążą do uzupełnienia swoich powłok walencyjnych do trwałych konfiguracji, a zwłaszcza do konfiguracji oktetu. Z tego punktu widzenia łatwo można było zdefiniować różnicę między wiązaniem jonowym a kowalencyjnym. W przypadku wiązania jonowego para elektronów tworzących wiązanie jest przesunięta całkowicie w stronę jednego atomu, który uzyskuje ładunek ujemny i przyciąga elektrostatycznie drugi atom, który – w rezultacie odsunięcia pary elektronów – został dodatnio naładowany. Jeśli uwspólniona para elektronów należy do obu atomów tworzących wiązanie, to mówimy o wiązaniu kowalencyjnym.

Powyższa koncepcja wiązania chemicznego została wykorzystana w zapisie wzorów strukturalnych Lewisa, w których wiązanie jest reprezentowane za pomocą dwóch kropek odpowiadających dwóm elektronom tworzącym wiązanie między atomami. Z graficznego punktu widzenia prostsze było reprezentowanie wiązania utworzonego przez dwa elektrony za pomocą kreski, co odpowiada konwencji zapisywania wzorów strukturalnych przyjętej znacznie wcześniej przez Kekulégo. Ten sposób zapisu został powszechnie zaakceptowany, lecz jeśli dla wyjaśnienia przebiegu reakcji chemicznej istotne jest oznaczenie pojedynczego elektronu, to wówczas wolne pary elektronów lub niesparowane elektrony w atomie zaznacza się za pomocą kropek.

Koncepcja wiązania kowalencyjnego zaproponowana przez Lewisa oraz przyjęta metoda jego graficznego reprezentowania odgrywają do dzisiaj bardzo ważną

rolę w praktyce badawczej chemii organicznej, gdyż w wielu przypadkach stanowią wystarczające narzędzie wykorzystywane do reprezentowania struktur związków chemicznych oraz przebiegu przemian chemicznych na poziomie cząsteczkowym¹⁷. Przedstawione poniżej kwantowo-mechaniczne koncepcje wiązań chemicznych dostarczają koncepcji Lewisa niezbędną podstawę teoretyczną na gruncie współczesnej mechaniki kwantowej¹⁸. Jednocześnie klasyczne elektronowe ujęcie wiązań chemicznych odgrywa tak istotną rolę w wyjaśnianiu budowy i własności cząsteczek związków chemicznych, że modele wiązań chemicznych budowane na gruncie molekularnej mechaniki kwantowej są interpretowane w świetle koncepcji klasycznej.

Dwie podstawowe metody modelowania wiązań chemicznych na gruncie współczesnej mechaniki kwantowej, wypracowane w latach dwudziestych i trzydziestych XX wieku, opierały się na przeciwstawnych założeniach¹⁹. W metodzie wiązań walencyjnych Heitlera-Londona przyjmuje się, że zakres stosowania funkcji falowych dla poszczególnych atomów tworzących wiązanie można rozszerzyć na obszar molekularny. „Zgodnie z teorią wiązań walencyjnych wiązanie atomowe powstaje wówczas, gdy dwa atomy zbliżają się do siebie na taką odległość, że pojedynczo obsadzony orbital jednego atomu nakłada się na pojedynczo obsadzony orbital drugiego atomu. Tak sparowane ze sobą elektrony, w nałożonych na siebie orbitalach, ulegają przyciąganiu do jąder obydwu atomów i w ten sposób atomy połączą się ze sobą” [McMurry, 2003, s. 15]. Powyższa metoda oddaje w sposób „naturalny” podstawową ideę tworzenia się wiązania kowalencyjnego w koncepcji Lewisa. Opiera się ona na trzech zasadach. Pierwsza mówi, że bierze się pod uwagę wyłącznie elektrony powłoki walencyjnej, a wiązanie kowalencyjne powstaje w wyniku nałożenia się orbitali atomowych, z których każdy posiada jeden elektron o przeciwnym spinie. Elektrony te tworzą parę, która obsadza nakładające się na siebie orbitale. Im większy jest stopień nałożenia orbitali, tym powstające wiązanie jest silniejsze [McMurry, 2003, s. 15]. W zapisie matematycznym odpowiada to utworzeniu dwuelektronowej wiążącej funkcji falowej między

¹⁷ Jest tak niezależnie od tego, że sposób reprezentacji powłoki walencyjnej atomu pod postacią sześcianu foremego należy już wyłącznie do historii chemii. Na temat oryginalnej koncepcji wiązania kowalencyjnego Lewisa i wkładzie Langmuira w rozpropagowanie tej teorii zob. [Coffey, 2008, s. 121-150].

¹⁸ Jeszcze w latach pięćdziesiątych i sześćdziesiątych XX wieku ukazywały się podręczniki i monografie, zwłaszcza z chemii organicznej, które wykorzystywały wyłącznie klasyczną koncepcję wiązania chemicznego Lewisa-Langmuira. Zobacz np. L. B. Clappa *Chemistry of the Covalent Bond* [1957].

¹⁹ W literaturze przedmiotu używa się zamiennie terminów „metoda” i „teoria” molekularnej mechaniki kwantowej. Z perspektywy rozważań podjętych w tym artykule będę używał terminu metoda, gdyż oddaje on funkcję, jaką omawiane koncepcje pełnią w procesie konstruowania modeli wiązań chemicznych. Teorią podstawową dla omawianych metod jest mechanika kwantowa w sformułowaniu falowym Schrödingera.

atomami A i B o postaci: $\varphi_A(1)\varphi_B(2) + \varphi_B(2)\varphi_A(1)$. W cząsteczkach wieloatomowych funkcję falową zapisuje się dla każdej z możliwych struktur elektronowych cząsteczki, a funkcję sumaryczną uzyskuje się przez dodanie funkcji przypisanych poszczególnym strukturom kanonicznym wraz ze współczynnikami wagowymi. Taka metoda konstrukcji funkcji falowej dla cząsteczki posiada sens fizyczny w świetle koncepcji wiązania chemicznego Lewisa-Langmuira i objaśnia, na poziomie kwantowo-mechanicznym, klasyczne wzory strukturalne, gdyż stanowi reprezentację określonego granicznego rozmieszczenia elektronów w cząsteczce. Jest to bez wątpienia istotną zaletą tej koncepcji, gdyż klasyczne modele struktury cząsteczek związków chemicznych, które zostaną omówione w następnym paragrafie, odgrywają w praktyce badawczej chemii niezwykle istotną rolę. Jednakże interpretacja funkcji falowej jako wiązania kowalencyjnego nie jest w tej metodzie jednoznaczna, gdyż może być ono definiowane na dwa nierównoważne sposoby, co sprawia, że również jej sens empiryczny nie jest ściśle określony.

Metoda wiązań walencyjnych prowadziła do utworzenia modeli wiązań, które w przypadku wielu cząsteczek nie są zgodne z danymi empirycznymi i dlatego nie pełnią dobrze ani funkcji wyjaśniającej, ani predyktywnej. Przede wszystkim w odniesieniu do cząsteczek związków aromatycznych i polienowych wymagała uzupełnienia o teorię rezonansu. Nie wyjaśniała natury wiązań metalicznych ani paramagnetyzmu oraz nietrwałości niektórych cząsteczek²⁰. Te i inne wady tej koncepcji, pomimo jej istotnej zalety polegającej na traktowaniu wiązania jako wydzielonej jednostki, co było zgodne z intuicjami klasycznymi, doprowadziły do znacznego ograniczenia zakresu jej stosowalności²¹.

W metodzie orbitali molekularnych podejście do wiązania chemicznego jest zasadniczo odmienne, gdyż konstruuje się funkcję falową opisującą wiązanie kowalencyjne jako liniową kombinację orbitali atomowych (funkcji falowych atomów). Tak utworzona funkcja falowa ψ nazywana jest orbitalem molekularnym i przynależy do całej cząsteczki, a nie do jej poszczególnych atomów. Dlatego orbitale molekularne są z zasady wielocentrowe, a nie jednocentrowe, jak orbitale atomowe. Jeśli molekularne funkcje falowe są unormowane, to kwadraty ich bezwzględnych wartości są interpretowane jako gęstości prawdopodobieństwa znalezienia elektronu w obszarze wokół punktu, dla którego wyznaczona została wartość funkcji ψ . Ważną własnością orbitali molekularnych, z punktu widzenia ich wykorzystania w projektowaniu przemian chemicznych, jest możliwość ich graficznej reprezentacji. Można tworzyć orbitale molekularne, nakładając reprezentacje

²⁰ Wykorzystuję porównania zalet i wad teorii wiązań walencyjnych i teorii orbitali molekularnych zawarte w książkach: [Kołos, 1975, s. 150-152] oraz [Atkins, 1974, s. 275-278].

²¹ Koncepcja ta odegrała olbrzymią rolę w rozwoju chemii dzięki książce Linusa Paulinga *The Nature of the Chemical Bond*, wydanej po raz pierwszy w 1939 roku. Jej autor, z perspektywy teorii wiązań walencyjnych, uzupełnionej o teorię rezonansu, rozpatrywały wszystkie kluczowe problemy ówczesnej chemii, a zwłaszcza chemii organicznej.

graficzne orbitali atomowych interpretowane jako chmury ładunku. Jeśli środek gęstości elektronowej leży na osi przechodzącej przez jądra dwu atomów tworzących wiązanie, to powstaje wiązanie σ , a jeśli orbitale nakładają się prostopadle do osi wiązania, to mówimy o wiązaniu π ²². Każdy orbital molekularny ψ jest określony przez zestaw liczb kwantowych, które decydują o jego kształcie i energii. Energia odpowiadająca danemu orbitalowi molekularnemu jest rozumiana jako energia potrzebna do usunięcia, w drodze jonizacji, elektronu obsadzającego ten orbital. Opisując cząsteczkę za pomocą tej metody, ustalamy dozwolone orbitale molekularne, przestrzegając zasady wykluczania Pauliego. Molekularna funkcja falowa ψ o określonej postaci może opisywać dwa elektrony, lecz muszą się one różnić spinem.

Opis zachowania się elektronu w układach wieloelektronowych, a zwłaszcza w cząsteczkach utworzonych z wielu różnych atomów, jest bardzo skomplikowany ze względu na wielość oddziaływań, które muszą być uwzględnione w hamiltonianie energii. Dlatego stosowanie tej metody dla tak złożonych układów wymaga przyjęcia wielu założeń. Zagadnienie to omówiłem szczegółowo w innych artykułach zamieszczonych w niniejszym tomie²³. Przyjęte w metodzie orbitali molekularnych zasady tworzenia molekularnych funkcji falowych nie prowadzą do zgodnych z doświadczeniem przewidywań wówczas, gdy są stosowane do cząsteczek, w których występują duże odległości między jądrami tworzących je atomów. Z tej przyczyny modele budowane za pomocą tej metody nie opisują z zadowalającą dokładnością na przykład zjawiska dysocjacji cząsteczek.

Omówione powyżej dwie podstawowe metody molekularnej mechaniki kwantowej odmiennie modelują wiązania chemiczne. Każda z tych metod, jak już wspominałem, posiada zarówno pewne zalety, jak i wady, które można wyartykułować na gruncie klasycznej koncepcji wiązania chemicznego. „Metoda wiązań walencyjnych przecenia korelację elektronów, a metoda orbitali molekularnych nie docenia jej. Pierwszą można poprawić przez uwzględnienie struktur jonowych, a drugą przez wprowadzenie oddziaływań konfiguracyjnych” [Atkins, 1974, s. 277]. Inną ważną cechą różnicującą obie metody jest możliwość budowania wizualnych reprezentacji procesu tworzenia się wiązań chemicznych. Z powyższych powodów trudno jest porównać obie metody. Korzyści związane z zastosowaniem każdej z nich do modelowania wiązań chemicznych zależą od rodzaju cząsteczek i od typu problemów, jakie chcemy rozwiązać, posługując się odpowiednimi modelami. Dotyczących to zwłaszcza wyjaśniania i przewidywania reaktywności chemicznej, która jest przecież pochodną siły wiązań występujących w cząsteczkach,

²²Przedstawiony sposób modelowania wiązań ma charakter szkicowy. Pomijam zarówno orbitale antywiązące, jak i orbitale zdelokalizowane, które występują np. w związkach aromatycznych.

²³Zobacz zwłaszcza artykuł *O teoretyczności chemii – studium metodologiczne* [1999(a)], zawarty również w niniejszym tomie.

będących substratami i produktami reakcji chemicznych. Do kwestii tej powrócę w paragrafach 3.2, a zwłaszcza 3.3, gdy omówię zagadnienie modelowania przebiegu przemian chemicznych.

Na zakończenie rozważań dotyczących modelowania wiązania chemicznego należy zwrócić uwagę, że w praktyce laboratoryjnej chemii występuje tendencja do reifikacji wiązań chemicznych, gdyż posługiwanie się uprzedmiotowionymi wiązaniami ma wpływ na efektywność tej praktyki²⁴. Jednakże zasadnicza odmienność modeli wiązań, które są budowane na gruncie koncepcji elektronowej Lewisa-Langmuira, od modeli budowanych za pomocą metod molekularnej mechaniki kwantowej, sprawia, że wiązania tego samego typu są utożsamiane z różnymi przedmiotami. W koncepcji Lewisa-Langmuira wiązanie chemiczne jest modelowane pod postacią uwspólnionej pary elektronów, ujmowanych jako ładunki punktowe. W koncepcjach sformułowanych na gruncie molekularnej mechaniki kwantowej odpowiednie molekularne funkcje falowe opisują jedynie prawdopodobieństwo znalezienia elektronu w przestrzeni pomiędzy jądrami atomów tworzących wiązanie. Powyższe różnice sprawiają, że na poziomie rozważań teoretycznych należy zachować daleko posunięty sceptycyzm wobec prób reifikacji wiązań chemicznych.

3.2. O sposobach reprezentowania struktur związków chemicznych

Zagadnienie modelowania teoretycznego struktur cząsteczek związków chemicznych w aparacie pojęciowym molekularnej mechaniki kwantowej omówiłem szczegółowo w artykule *O teoretyczności chemii – studium metodologiczne* zamieszczonym w niniejszym tomie. Dlatego w tym paragrafie skoncentruję się na przedstawieniu procesu budowania reprezentacji ikonoczno-symbolicznych struktur cząsteczek związków chemicznych pod postacią wzorów strukturalnych oraz modeli materialnych.

Wzór strukturalny cząsteczki związku chemicznego ma, z założenia, reprezentować jej skład i strukturę. Eksperymentalne określenie składu cząsteczek związku chemicznego zazwyczaj nie napotyka na większe problemy. Inaczej jest z określeniem ich struktury, zwłaszcza gdy mamy do czynienia z cząsteczkami związków organicznych i gdy nie dysponujemy kryształami danej substancji lub gdy chcemy wyznaczyć strukturę cząsteczek substancji, która jest w roztworze. Określenie struktury cząsteczki danego związku chemicznego następuje wraz z podaniem jej konstytucji, konfiguracji i konformacji. Konstytucja cząsteczki wyraża się w określonym sposobie i kolejności powiązania atomów, konfiguracja we wzajemnym usytuowaniu atomów w przestrzeni, a konformacja we wzajemnym usytuowaniu

²⁴Tezę powyższą starałem się uzasadnić w studium: *Status ontologiczny orbitali atomowych i molekularnych w kontekście autonomii chemii* [Zeidler, 2007], który jest również zawarty w niniejszym tomie.

w przestrzeni atomów bezpośrednio związanych z parą atomów centralnych. Identyfikacja związku chemicznego polega zatem na ustaleniu składu i struktury jego cząsteczek, które muszą być identyczne.

Gdy przeprowadzone badania eksperymentalne pozwalają na ustalenie składu i struktury cząsteczki, to wtedy powstaje problem jej reprezentowania w publikacjach naukowych i podręcznikach. Jego rozwiązanie jest relatywnie proste tylko wówczas, gdy udaje się uzyskać kryształy danego związku i gdy tylko jeden wzór reprezentuje strukturę cząsteczki. Idea ścisłego powiązania wzoru strukturalnego z rzeczywistą budową cząsteczek pochodzi od A. Butlerowa. Twierdził on, że cząsteczki danego związku chemicznego są reprezentowane przez jeden wzór racjonalny (strukturalny), który wyraża wszystkie jego właściwości. Butlerow był jednym z pierwszych, który głosił, że od składu i struktury cząsteczek związku chemicznego zależą jej fizyczne, chemiczne i biologiczne właściwości.

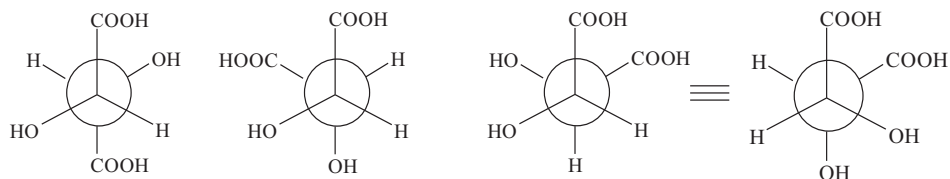
Reprezentowanie przez wzory strukturalne składu i struktury cząsteczek związków chemicznych było, i jest do dzisiaj, kluczowym elementem praktyki badawczej chemii, a zwłaszcza chemii organicznej. W artykule *Semiotyczny i poznawczy status wzorów strukturalnych związków chemicznych a przyczynowa teoria oznaczania*, zawartym w niniejszym tomie, podałem argumentację na rzecz tezy, że wzory strukturalne należy uznawać za znaki ikoniczno-symboliczne. Symboliczny, a więc konwencjonalny charakter wzorów strukturalnych sprawia, że można je traktować jako modele teoretyczne. Ta sama argumentacja może być odniesiona do modeli materialnych struktur związków chemicznych, które omówię w drugiej części tego paragrafu. Wzory strukturalne i modele materialne struktur cząsteczek związków chemicznych, np. modele kulowo-prętowe, spełniają większość tez zmodyfikowanej koncepcji modelu teoretycznego Achinsteina. Są budowane w celu rozwiązania określonego problemu badawczego, ze względu na który wybiera się odpowiednią konwencję graficzną zapisu struktury cząsteczki, umożliwiającą reprezentowanie tych jej aspektów, które badacz uznaje za istotne. Powyższe sformułowanie w pełni podpada pod omówione w paragrafie 2.2 pragmatyczne ujęcie reprezentacji zaproponowane przez R. Gierego.

Odwolując się do wprowadzonej w części drugiej artykułu funkcji reprezentacji, można powiedzieć, że odnosi ona odpowiednie znaki, które wykorzystujemy w konstrukcji reprezentacji struktury cząsteczki, do teoretycznie skonceptualizowanych elementów układu modelowanego – elementów tworzących strukturę cząsteczki. I tak, dla ukazania wzajemnego przestrzennego ułożenia ważnych grup funkcyjnych, w celu określenia ich konfiguracji, stosuje się, obok linii ciągłych, kliny wskazujące na wysunięcie danego elementu cząsteczki przed płaszczyznę i krótkie kreski równoległe do siebie, które odsyłają do elementów znajdujących się za płaszczyzną. Są to tak zwane wzory rzutowe Fischera, wykorzystywane w celu reprezentowania izomerów konfiguracyjnych cząsteczek z asymetrycznymi atomami węgla (atomami, które mają cztery różne podstawniki).



Rys. 1. Izomery konfiguracyjne aldehydu glicerynowego [Siemion, 1985, s. 16]

Jeśli chcemy reprezentować tzw. izomery konformacyjne, tzn. izomery różniące się kształtem ze względu na swobodną rotację poszczególnych podstawników wokół wiązań pojedynczych, to stosujemy tzw. wzory projekcyjne M. S. Newmana.

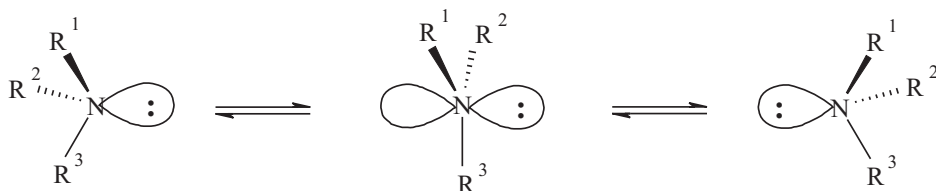
Rys. 2. Konformery odmiany *mezo* kwasu winowego [Siemion, 1985, s. 34]

Wyróżnione energetycznie konformacje odpowiadają takim orientacjom podstawników, przy których podstawniki te najmniej się przesłaniają i dlatego są najbardziej stabilne [Siemion, 1985, s. 34].

Ustalenie precyzyjnych zasad budowania modeli teoretycznych różnego typu izomerów jest bardzo istotne, gdyż izomery związku chemicznego o określonym składzie są odmiennymi bytami chemicznymi, które mogą nawet zasadniczo różnić się swoimi właściwościami fizycznymi, chemicznymi, a w konsekwencji i biologicznymi.

Wzory strukturalne spełniają również czwarty postulat Achinsteina. Są budowane na gruncie podstawowych koncepcji teoretycznych. Kreska we wzorze strukturalnym reprezentuje wiązanie chemiczne, które jest konceptualizowane na gruncie określonej teorii wiązań chemicznych. Na ogół zakłada się, że jest to uwspólniona para elektronów zgodnie z koncepcją Lewisa-Langmuira. Niekiedy jednak chemicy wprost odwołują się do teorii orbitali molekularnych, a nawet reprezentują jakiś orbital, np. orbital z wolną parą elektronową.

Azot w chiralnej aminie (rys. 3) posiada hybrydyzację sp^3 , a rolę jednego z podstawników pełni wolna para elektronów [Siemion, 1985, s. 35]. Jeśli wszystkie podstawniki przy azocie są różne, to atom azotu jest asymetryczny i należałoby przewidywać, że będą występowały różne izomery optyczne tego związku (różne

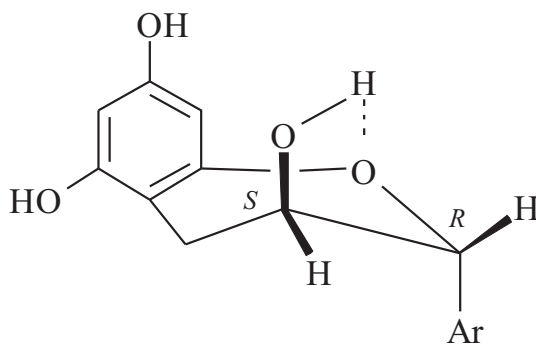


Rys. 3. Inwersja konfiguracji chiralnej aminy

enancjomery). Jednakże, jak pokazuje rysunek 3, konfiguracja cząsteczki aminy może łatwo ulegać zmianie i dlatego trzeciorzędowe aminy nie są konfiguracyjnie stabilne [Siemion, 1985, s. 35].

Chcąc wyjaśnić określoną budowę przestrzenną cząsteczek związków organicznych należy odwołać się do typu hybrydyzacji, która występuje na atomie węgla, gdyż determinuje on wartość kątów między wiązaniami. Jeśli jest to hybrydyzacja sp^3 , to kształt wyznaczony przez wiązania, jakie mogą powstawać, jest tetraedyczny; jeśli jest to hybrydyzacja sp^2 , to wyznaczony przez nią kształt jest trygonalny, a jeśli sp , to jest on liniowy.

Ważną rolę w cząsteczce mogą odgrywać oddziaływania elektrostatyczne między atomami, a szczególnie oddziaływania zwane wiązaniami wodorowymi. Reprezentowane są one zazwyczaj za pomocą przerywanej linii utworzonej z kropek, łączącej atom wodoru połączony wiązaniem kowalencyjnym z atomem elektroujemnym. Atom wodoru uzyskuje dzięki temu ładunek dodatni i może oddziaływać z dodatnio naładowanymi atomami innych pierwiastków.



Rys. 4. Konformacja (+)-katechiny

Rysunek 4 przedstawia jedną z diastereoizomerycznych pochodnych (2R)-flawanu, (+)-katechinę [Siemion, 1985 s. 127]. Związek ten jest stabilizowany przez wewnątrzcząsteczkowe wiązanie wodorowe pomiędzy podstawnikiem hydroksylowym a pierścieniowym atomem tlenu. Wzór (+)-katechiny został tak narysowany, że ukazuje strukturę przestrzenną cząsteczki, a jednocześnie wyjaśnia jej stabilność,

co jest istotne, gdyż związki tego typu występują w przyrodzie i biorą udział w reakcjach metabolicznych, których przebieg zależy od ich budowy przestrzennej [Sion, 1985, s. 127-128].

Niekiedy, jak to ma miejsce w przypadku DNA, wiązania wodorowe „spajają” dwa fragmenty cząsteczki – dwie pojedyncze nici DNA. Właściwości wiązania wodorowego są kluczowe w kontekście pełnienia przez DNA funkcji nośnika informacji genetycznej. Wiązania te są na tyle silne, że stabilizują strukturę, lecz są znacznie słabsze od wiązań kowalencyjnych i dlatego to właśnie one ulegają odwracalnemu zerwaniu w procesach biochemicznych. Dzięki temu zachodzi proces replikacji, a także transkrypcji na informacyjny RNA, a później translacji, która prowadzi do syntezy białka.

Uznawanie wzorów strukturalnych za ikony reprezentujące strukturę rzeczywistych cząsteczek, co ma często miejsce w literaturze przedmiotu, należy uznać za nieporozumienie. Wzór strukturalny nie jest pod żadnym względem podobny do struktury rzeczywistej cząsteczki. Relacji podobieństwa między tymi obiektami, a dokładniej – między strukturami tych obiektów, nie można ustanowić, gdyż struktura modelowanej cząsteczki nie jest dana bezpośrednio. Podobieństwo można ustalać, co najwyżej, między wzorem strukturalnym a strukturą wyznaczoną w oparciu o teoretycznie zinterpretowane wyniki odpowiednich pomiarów, które same są teoretycznie obciążone²⁵. Wzory strukturalne proponują uznawać za modele teoretyczne, będące nośnikami informacji o strukturze cząsteczki, która została wyznaczona z pomiarów²⁶. Ważną cechą różnego rodzaju graficznych reprezentacji struktur cząsteczek jest to, że można je przekształcać, co umożliwi nie tylko przedstawienie zmiany konfiguracji lub konformacji, ale również zapis mechanizmów reakcji chemicznych. Zagadnienie to omówię w paragrafie 3.3.

W praktyce badawczej chemii ważną rolę odgrywają również modele materialne struktur cząsteczek związków chemicznych, które – podobnie jak wzory strukturalne – należy uznać za modele teoretyczne. W ujęciu semiotycznym są one znakami ikoniczno-symbolicznymi. Modele te stanowią trójwymiarowe wizualizacje struktur cząsteczek, które są podatne na manipulacje, ukazujące niektóre właściwości

²⁵Zagadnienie teoretycznego obciążenia pomiarów wykonywanych w trakcie badań rentgenostrukturalnych, które umożliwiają określenie struktury cząsteczek substancji znajdującej się pod postacią kryształu, omówiłem w artykule *Czy można zaobserwować orbitale? O problemie obserwowalności i realności przedmiotów teoretycznych* [Zeidler, 2010(a)], zawartym również w niniejszym tomie. Natomiast problemy metodologiczne związane z wyznaczaniem struktur cząsteczek znajdujących się np. w roztworze, w oparciu o widma w podczerwieni, omówiłem w artykule *O teoretyczności chemii – studium metodologiczne* [Zeidler, 1999(a)], który jest również zamieszczony w niniejszym tomie.

²⁶Ujęcie wzorów strukturalnych jako informacyjnych modeli teoretycznych zaproponowałem w artykule *The Epistemological Status of Theoretical Model of Molecular Structure* [Zeidler, 2000(b), s. 17-34].

modelowanych cząsteczek. Do najbardziej znanych typów modeli materialnych budowanych w chemii i biologii molekularnej należy zaliczyć modele: kulowo-prętowe, czaszowe, drutowe i cylindryczne. Dla każdego typu modelu została skonstruowana funkcja interpretacji, która odpowiednim elementom materialnym przypisuje odpowiednie, teoretycznie zinterpretowane, elementy układu modelowanego. Na przykład w modelach kulowo-prętowych kule o odpowiednich wielkościach i barwach reprezentują atomy odpowiednich pierwiastków, a pręty reprezentują wiązania między nimi. W modelach czaszowych atomy różnych pierwiastków są reprezentowane za pomocą czasz o ustalonych dla danego pierwiastka kolorach i promieniach odpowiadających promieniom van der Waalsa atomów tych pierwiastków. Wiązania nie są w tych modelach reprezentowane wprost. Natomiast w modelach drutowych, które są często stosowane w symulacjach komputerowych, reprezentowane bezpośrednio są tylko wiązania za pomocą linii (drutów) o określonych kolorach. To, jakie atomy znajdują się w węzłach, w których stykają się linie reprezentujące wiązania, zależy od kolorów tych linii. W modelach cylindrycznych atomy poszczególnych pierwiastków są przedstawiane za pomocą odpowiednio pokolorowanych kul o promieniach proporcjonalnych do promieni van der Waalsa, a cylindry o określonych kolorach – reprezentujące wiązania między atomami – posiadają odpowiednio dobrane średnice.

W literaturze przedmiotu szeroko omawia się znane przykłady budowania modeli materialnych dużych cząsteczek o ważnych właściwościach biologicznych, np. model struktury helisy α białka zbudowany przez Paulinga i Coreya czy model struktury DNA skonstruowany przez Watsona i Cricka. Modele materialne są *de facto* hipotezami teoretycznymi poddawanyemu empirycznemu sprawdzaniu. „Pauling i Corey zaproponowali strukturę helisy α na sześć lat wcześniej zanim zaobserwowano ją doświadczalnie w mioglobinie, rekonstruując jej strukturę metodą analizy rentgenowskiej. *Zaproponowanie struktury helisy α było jednym z punktów zwrotnych w biologii molekularnej, okazało się bowiem, że można przewidzieć konformację łańcucha polipeptydowego, jeżeli właściwości jego składników są ściśle i dokładnie poznane* [kursywa pochodzi od autorów]” [Berg, Tymoczko, Stryer, 2005, s. 57]. Wyniki badań rentgenostrukturalnych potwierdziły model dwuniciowej helisy DNA zaproponowany przez Watsona i Cricka, a doprowadziły do odrzucenia trójniciowego modelu Paulinga.

3.3. Modele teoretyczne przebiegu reakcji chemicznych jako narzędzia praktyki laboratoryjnej chemii

Laboratoryjną praktyką badawczą w zakresie syntezy nowych związków chemicznych sterują, zwłaszcza w chemii organicznej, mechanizmy reakcji chemicznych. Ich analiza jest dokonywana – zarówno w samej chemii, jak i w metodologicznej refleksji nad chemią – z bardzo różnych perspektyw. Ze względu na przedmiot

rozważań niniejszego artykułu będę uznawać formułowane przez chemików mechanizmy reakcji chemicznych za modele teoretyczne. Takie podejście odpowiada sposobowi, w jaki do mechanizmów reakcji chemicznych podchodzą sami chemicy. W ich ujęciu mechanizm reakcji opisuje sposób, w jaki ona przebiega. „Mechanizm reakcji to ‘scenariusz’ jej przebiegu. Tłumaczy on, jak reagujące cząsteczki oddziałują ze sobą, dając końcowy produkt. Mechanizm mówi o sposobie – i kolejności – powstawania podczas reakcji nowych wiązań i rozrywania starych. Wyjaśnia on też, co dzieje się z elektronami walencyjnymi w cząsteczkach biorących udział w reakcji; a właśnie ruch tych elektronów jest istotą procesów chemicznych” [Patrick, 2002, s. 93]. Ten sposób podejścia do mechanizmów reakcji traktuję jako próbę odpowiedzi na pytanie: „Jak doszło do powstania określonych produktów z określonych substratów w określonych warunkach?”.

Odpowiedź na pytanie typu „jak?” jest często przeciwstawiana, z metodologicznego punktu widzenia, odpowiedzi na pytanie typu „dlaczego?”. Twierdzi się wówczas, że odpowiadając na pierwsze pytanie, dokonujemy opisu, a odpowiadając na drugie z nich – wyjaśnienia rozpatrywanego zjawiska. W literaturze przedmiotu można wskazać na koncepcje, które również odpowiadają na pytanie „jak?” uznają za pewnego typu wyjaśnienie. Charles Cross zwrócił uwagę, że pytanie „jak?” może być rozumiane: „w jaki sposób?” lub „na jakiej drodze?”. Zauważył również, że gdy formułuje się pytania w takiej postaci, to dąży się do podania struktury lub mechanizmu jakiegoś złożonego procesu, poszukując zależności o charakterze przyczynowo-skutkowym²⁷.

Nie będę analizował ani odmian wyjaśniania stanowiących odpowiedź na pytanie „jak?”, ani różnic między opisem a wyjaśnieniem²⁸. Przyjmę, na potrzeby tego artykułu, że budowane w chemii mechanizmy reakcji są modelami teoretycznymi, stanowiącymi próbę odpowiedzi na problem badawczy sformułowany w pytaniu: „w jaki sposób przebiegła (przebiegnie) określona przemiana chemiczna?”. Ponieważ modele teoretyczne interesują mnie głównie jako teoretyczne narzędzia działań laboratoryjnych, dlatego skoncentruję się przede wszystkim na mechanizmach reakcji chemicznych jako planach działań laboratoryjnych. Taki sposób podejścia do mechanizmu przemiany jest możliwy przede wszystkim wówczas, gdy mamy uzasadnione przesłanki, aby sądzić, że projektowana przemiana powinna przebiegać według jednego ze znanych mechanizmów. Niekiedy, gdy skład i struktura substratów oraz produktów reakcji lub warunki, w których chcemy ją przeprowadzić, nie sugerują żadnego ze znanych mechanizmów, wówczas proponuje się nowy mechanizm.

²⁷ Do wyjaśnień, które można uznać za odpowiedzi na pytanie „jak?”, Cross zalicza wyjaśnienia genetyczne, morfologiczne i systematyczne [1991, s. 237-260].

²⁸ Zagadnienie to było przedmiotem szczegółowych analiz przeprowadzonych przez E. Zielonacką-Lis [2003, s. 88-105].

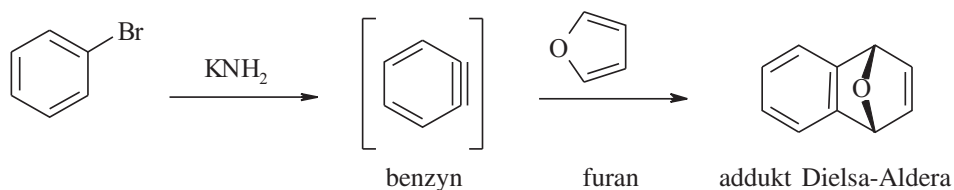
Do lat siedemdziesiątych-osiemdziesiątych XX wieku sformułowanie mechanizmu przemiany chemicznej danego typu było uznawane przede wszystkim za znaczące osiągnięcie poznawcze. We współczesnej chemii to głównie względy praktyczne stanowią uzasadnienie dla poszukiwania mechanizmów przemian chemicznych. Zostały one wymienione przez Richarda Jacksona w książce poświęconej mechanizmom reakcji chemicznych [Jackson, 2007, s. 16-17]. Dla uczących się chemii mechanizmy ułatwiają zrozumienie reakcji chemicznych i dostarczają poręcznej klasyfikacji dużej liczby rozpoznanych i przeprowadzanych przemian. Chemikom dokonującym syntez w chemii organicznej umożliwiają takie różnicowanie warunków reakcji i ustalanie proporcji substratów, które pozwalają na maksymalizację wydajności czystych produktów. Z punktu widzenia chemika zatrudnionego w przemyśle ich znajomość pozwala na projektowanie nowych odczynników i katalizatorów oraz modyfikowanie warunków, w których przeprowadza się procesy w skali technologicznej. Dzięki temu można optymalizować wydajność i zmniejszać ilość materiałów odpadowych, a w konsekwencji zmniejszać koszty i zwiększać zyski. Wreszcie w biochemii, a zwłaszcza w chemii leków, mechanizmy mają kluczowe znaczenie dla ustalenia sposobu, w jaki cząsteczki leku mogą wspomagać zachodzenie reakcji biochemicznych lub zapobiegać zachodzeniu tych reakcji, a więc mają istotny wpływ na projektowanie nowych leków.

Zasadniczy etap procesu formułowania mechanizmu danej przemiany polega na ustaleniu, które wiązania rozpadają się, a które powstają przy przechodzeniu od substratów do produktów w określonych warunkach termodynamicznych z ewentualnym udziałem katalizatora. Rozpatrzenie istniejących w tym względzie możliwości prowadzi zazwyczaj do sformułowania kilku mechanizmów, które mają charakter hipotez teoretycznych. Na drodze badań empirycznych dąży się do wyeliminowania wszystkich z wyjątkiem jednego, który jest najbardziej prawdopodobny. Jeśli dostępne dane empiryczne potwierdzają w równym stopniu kilka hipotez, wówczas chemicy są skłonni akceptować mechanizm, który jest najprostszy²⁹. W świetle nowych danych eksperymentalnych wcześniej zaakceptowana hipoteza może być modyfikowana lub nawet odrzucona. Niekiedy przyjmuje się, że przemiana chemiczna może przebiegać na kilka sposobów opisywanych przez różne mechanizmy.

W artykule *Wyjaśnianie genetyczno-teoretyczne a praktyka eksplanacyjna w chemii organicznej* [Zeidler, 2004(b)], który został także zamieszczony w niniejszej książce, omówiłem teoretycznie możliwe, konkurencyjne mechanizmy otrzymania aniliny w reakcji chlorobenzenu z amidkiem potasu. Badania nad

²⁹Pojęcie prostoty mechanizmu reakcji chemicznej, a także posługiwanie się prostotą jako kryterium wyboru między konkurencyjnymi mechanizmami, zostało poddane wnikliwej analizie przez Hoffmanna, Minkina i Carpentera w artykule *Brzytwa Ockhama i chemia* [1999, s. 45-74].

mechanizmami reakcji nukleofilowego podstawienia halogenków arylowych sugerowały, że przemiana powinna zachodzić albo według mechanizmu S_N1 , albo według mechanizmu polegającego na tworzeniu się kompleksu przejściowego. Jednakże eksperymenty z 1- ^{14}C -chlorobenzenem wykazały, że w pięćdziesięciu procentach cząsteczek aniliny grupa NH_2 znajdowała się przy węglu znacznym ^{14}C w pozycji 1, a w drugiej połowie cząsteczek przy węglu w pozycji 2. Gdyby reakcja zachodziła według jednego z przewidywanych teoretycznie mechanizmów, to grupa NH_2 powinna się znajdować wyłącznie przy węglu ^{14}C . Chcąc wyjaśnić ten fakt, zaproponowano mechanizm, zgodnie z którym reakcja przebiega w dwóch kolejnych etapach. Pierwszy polega na eliminacji chloru z utworzeniem benzynu, a drugi na przyłączeniu do benzynu amoniaku NH_3 . Jednakże benzynu nie można było wydzielić jako trwałego produktu reakcji. Dlatego zaplanowano przeprowadzenie reakcji stereospecyficznych Dielsa-Aldera. Polegają one na dodawaniu do środowiska reakcji, w której – jak postulowano – ma się tworzyć benzyn, substratu o takiej strukturze, aby produkt otrzymany w wyniku reakcji z benzynem był również stereospecyficzny. Jedną z zaprojektowanych reakcji tego typu miała przebiegać według następującego mechanizmu:

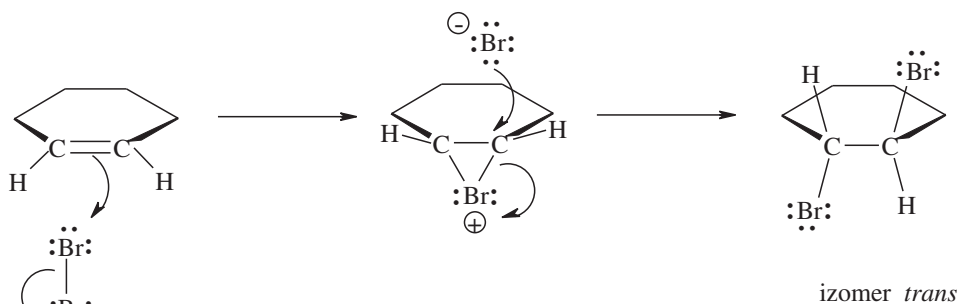


Rys. 5

Zaproponowany mechanizm jest mechanizmem reakcji przyłączania do hipotetycznego potrójnego wiązania w postulowanej cząsteczce benzynu [McMurry, 2003, s. 603]. Produkt tej reakcji, i innych reakcji podobnego typu, udało się wydzielić oraz określić jego skład i strukturę, a tym samym potwierdzić istnienie benzynu i słuszność zaproponowanego mechanizmu otrzymywania aniliny z chlorobenzenu³⁰. Zaproponowane modele teoretyczne, przedstawiające reakcje otrzymywania odpowiednio: aniliny i adduktu Dielsa-Aldera, stanowiły rozwiązanie sytuacji problemowej, jaka wytworzyła się w rezultacie stwierdzenia, że wcześniej proponowane modele teoretyczne otrzymywania aniliny są niezgodne z danymi empirycznymi.

Podany poniżej mechanizm reakcji przyłączania fluorowców (bromu) do alkenów cyklicznych (cykloheksenu) został sformułowany na gruncie elektronowej koncepcji wiązań kowalencyjnych Lewisa.

³⁰Przykład dotyczący potwierdzenia istnienia benzynu został omówiony w kontekście dyskusji nad manipulacyjnym kryterium istnienia I. Hackinga w artykule [Zeidler, Sobczyńska, 1995/1996, s. 517-535].



Rys. 6

Powyższa reakcja przyłączania przebiega z symetrią *anti* [Patrick, 2002, s. 131]. O przyjęciu takiego mechanizmu reakcji przesądza fakt, że jedynym otrzymywanym produktem jest izomer *trans* 1,2-dwubromoheksanu. Jest to zarazem argument na rzecz hipotezy, że produktem pośrednim tej reakcji jest jon bromoniowy i dlatego drugi atom bromu musi się przyłączyć po innej stronie niż pierwszy. Gdyby powstawała mieszanina izomerów *cis* i *trans*, wówczas mechanizm reakcji przewidywałby jako produkt pośredni karbokation, gdyż drugi atom bromu mógłby się przyłączać po dowolnej stronie płaszczyzny pierścienia.

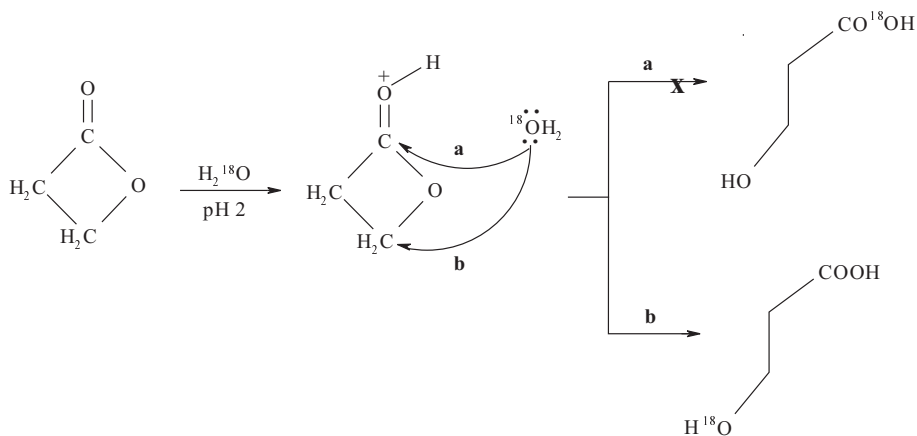
Przedstawiony mechanizm jest przykładem złożonego modelu teoretycznego, którego elementami są reprezentacje ikoniczno-symboliczne (modele teoretyczne) wiązań i struktur cząsteczek omówione w paragrafach 3.1 i 3.2. Istnieją określone reguły zapisywania mechanizmów, dotyczące zwłaszcza rozrywania wiązań i tworzenia nowych, co jest możliwe dzięki założeniu, że elektrony w cząsteczkach mogą się przemieszczać. Ten dynamiczny proces reprezentuje się za pomocą zakrzywionej strzałki – w przypadku przemieszczania się pary elektronów, i zakrzywionej strzałki z pojedynczym grotem – w przypadku przemieszczania się pojedynczego elektronu³¹. Odpowiednie konwencje reprezentowania wiązań umożliwiają sugerowanie stereochemii reakcji. Przedstawiony model teoretyczny przebiegu reakcji chemicznej posiada więc wiele właściwości modeli teoretycznych, które przypisywała im, zmodyfikowana w części drugiej artykułu, koncepcja modelu teoretycznego Achinsteina.

Zaproponowany model teoretyczny stanowi odpowiedź na postawiony problem badawczy – w jaki sposób przebiega reakcja przyłączania bromu do cykloheksenu. Jest, jak już wspomniałem, sformułowany w języku symbolicznym wykorzystywanym do tworzenia reprezentacji ikoniczno-symbolicznych wiązań oraz wzorów strukturalnych cząsteczek związków chemicznych. Kolejne etapy przemiany są

³¹Zakrzywiona strzałka obrazująca przemieszczanie się elektronów bywa uważana za najważniejszy symbol chemii organicznej XX wieku. Zobacz [Brock, 1999, s. 343].

reprezentowane zgodnie z zasadami przekształcania poszczególnych reprezentacji wiązań i struktur cząsteczek. Zapisany mechanizm ma charakter aspektowy, gdyż reprezentuje tylko jej niektóre składowe (np. nie uwzględnia atomów wodoru). Jest sformułowany na bazie podstawowej teorii – teorii wiązań chemicznych Lewisa, choć można by wykorzystać również elementy teorii orbitali atomowych i molekularnych. Spełniony jest też ostatni postulat konstytuujący koncepcję modelu teoretycznego Achinsteinia. Sformułowany mechanizm ukazuje podobieństwo modelowanej przemiany do innych przemian chemicznych, które także mogą być reprezentowane przez ten mechanizm, np. gdyby użyto do reakcji innego fluorowca lub innego cykloalkenu.

Ustalanie mechanizmu reakcji odbywa się zawsze w świetle złożonej wiedzy teoretyczno-praktycznej chemika pracującego w laboratorium. Wiedzę tę można zaliczyć do hipotez lokalnych w terminologii Hackinga. Weźmy jako przykład hydrolizę β -laktonu w środowisku kwaśnym [Alder, Baker, Brown, 1977, s. 28].



Rys. 7

Powyższa reakcja przebiega według mechanizmu **b**, co wykazano przez przeprowadzenie jej w środowisku, w którym woda była znakowana izotopem tlenu ^{18}O . Dla większości laktonów reakcja zachodzi według schematu **a**, tzn. następuje po ataku nukleofilowym na węgiel karbonylowy, w rezultacie którego dochodzi do rozerwania wiązania O–acyl. Jednakże chemik, widząc zapisany w mechanizmie reakcji wzór strukturalny β -laktonu, wie, że w cząsteczce tej występuje silne naprężenie kątowe, będące rezultatem różnicy między faktyczną wartością kątów występujących w cząsteczce a wartością kątów, która wynikałaby z hybrydyzacji orbitali atomów węgla i tlenu. Reakcja będzie zatem przebiegała drogą, która doprowadzi do osłabienia naprężenia kąтового, wyrażającego się zmniejszeniem różnicy energii między stanem podstawowym a stanem przejściowym reakcji, co prowadzi w konsekwencji do zerwania wiązania O–alkil

[Alder, Baker, Brown, 1977, s. 28]. Taki nietypowy przebieg reakcji był więc „sugerowany” przez wzór strukturalny laktonu, lecz – rzecz jasna – musiał być potwierdzony eksperymentalnie.

W kontekście ujmowania mechanizmu reakcji jako modelu teoretycznego, który może kierować pracami laboratoryjnymi podejmowanymi w celu przeprowadzenia danej przemiany, odwołam się do koncepcji semiotyki chemicznej Joachima Schummera, którą już przywołałem w artykule *Semiotyczny i poznawczy status wzorów strukturalnych związków chemicznych a przyczynowa teoria oznaczania* [Zeidler, 2001], zamieszczonym również w niniejszym tomie. Schummer wyszedł z założenia, że wzory strukturalne powinny być interpretowane w kontekście systemu znaków chemicznych [Schummer, 1999, s. 192-194]. Zgodnie z informacyjną koncepcją modelu teoretycznego, zaproponowaną przeze mnie we wcześniejszych artykułach [Zeidler, 1996, 2000(b)], wzory strukturalne są uznawane za modele niosące informacje o różnych właściwościach chemicznych substratów i produktów, a zwłaszcza ich reaktywności. Schummer przyjął, że stosowane przez chemików semiotyczne reguły budowania i przekształcania wzorów strukturalnych można przełożyć na właściwości chemiczne. Z punktu widzenia zapisywania mechanizmów reakcji ważne jest to, że wzory strukturalne cząsteczek różnych związków mogą być zarówno tworzone, jak i same mogą uczestniczyć w tworzeniu innych wzorów. Odpowiada to podstawowej właściwości cząsteczek związków chemicznych, która polega na tym, że mogą one być tworzone z cząsteczek innych związków i same mogą uczestniczyć w tworzeniu cząsteczek nowych związków. Tym samym reguły rządzące semiotyką chemiczną, w odniesieniu do zapisywania mechanizmów reakcji chemicznych, mogą być uznawane nie tylko za swoiste reguły myślenia chemicznego, ale również za reguły rządzące podejmowanymi w laboratorium działaniami.

Jeśli założyć, że reguły zapisu i przekształcania wzorów strukturalnych w mechanizmach reakcji chemicznych reprezentują operacje laboratoryjne, to można przyjąć, że z zapisu konkretnego mechanizmu wyprowadza się dyrektywy działania laboratoryjnego, prowadzące do zrealizowania planowanej przemiany. Mamy więc do czynienia z przykładem zastosowania zasady pragmatycznej Peirce’a, choć związek łączący zapisany mechanizm reakcji z normami działania laboratoryjnego nie ma charakteru związku logicznego, a zwłaszcza związku wynikania logicznego.

Mechanizm reakcji chemicznej określonego typu, według którego ma – jak się zakłada – przebiegać projektowana synteza, wyznacza jedynie podstawowe działania laboratoryjne. Określa on: stosunek wagowy substratów, środowisko reakcji, a zwłaszcza charakter rozpuszczalnika, ogólne warunki termodynamiczne oraz rodzaj katalizatora. Na podstawie mechanizmu reakcji nie możemy wnioskować ani o szczegółowych warunkach, w których synteza powinna być przeprowadzona, ani o aparaturze, która powinna być w tym celu użyta, ani o sposobie przeprowadzania wielu czynności laboratoryjnych, choć mechanizm, przynajmniej

w odniesieniu do niektórych z wymienionych kwestii, może „podpowiadać” właściwe rozstrzygnięcia. Kluczowe znaczenie ma jednakże wiedza i umiejętności eksperymentatora, zdobyte przez niego w trakcie długoletniej praktyki laboratoryjnej. Są one decydujące dla sukcesu przeprowadzanej syntezy, to znaczy dla uzyskania możliwie czystego produktu z dużą wydajnością. Jeśli po wielu przeprowadzonych eksperymentach tak rozumiany sukces zostanie osiągnięty, to szczegółowy opis działań eksperymentalnych, które go umożliwiły, będzie opisem preparatyki danego związku chemicznego. Teza mówiąca, że dyrektywy działań laboratoryjnych zawarte w opisie preparatywnym danego związku chemicznego mogą być wyprowadzone w sensie logicznym z mechanizmu reakcji chemicznej, jest zdecydowanie zbyt mocna. Nie wzbudza natomiast kontrowersji stwierdzenie, że przewidywany mechanizm, według którego może zachodzić przeprowadzana reakcja, dostarcza chemikom wielu ważnych wskazówek, które mają istotny wpływ na ich działania laboratoryjne.

Omówiona w tym artykule, a także w innych artykułach zawartych w niniejszym tomie, specyfika praktyki badawczej chemii w zakresie szeroko rozumianego modelowania teoretycznego potwierdza w pełni następujące słowa: „Dla wyjaśnienia zjawisk chemicznych potrzeba [...] kilku dobrych modeli. Takie ‘dobre’ modele są jednak cząstkowe, tłumaczą bowiem tylko wybrane dane, i dlatego właśnie potrzebnych jest kilka modeli. Zależnie od użytych narzędzi teoretycznych, wyłaniają się różne prawdy” [Brock, 1999, s. 330]³². Powyższą konstatację można uzupełnić stwierdzeniem, że „cząstkowe” modele teoretyczne budowane w chemii są również efektywnymi narzędziami, które umożliwiają chemikom nie tylko poszukiwanie teoretycznego uzasadnienia dla podejmowanych badań, lecz również projektowanie pracy laboratoryjnej.

³²Jest to fragment cytatu z pracy doktorskiej R. Paradowskiego pt. *The Structural Chemistry of Linus Pauling*, który przytoczył Brock [1999, s. 330].

XI

O funkcjach metafor w praktyce badawczej chemii

1. Wstęp

W powszechnym przekonaniu przedstawicieli nauk przyrodniczych język opisu świata przyrody jest językiem interpretowanym literalnie, a w przypadku zmatematyzowanego przyrodoznawstwa jego interpretacja jest wyznaczona przez odpowiednie procedury pomiarowe. Jednakże dokonywane współcześnie metodologiczne analizy aparatu pojęciowego stosowanego przez uczonych wykazują, że w naukach przyrodniczych na szeroką skalę wykorzystuje się metafory. Bez metafor nie byłoby możliwe wyjaśnianie i prognozowanie, a zwłaszcza zrozumienie wielu zjawisk badanych przez te nauki. W literaturze metodologicznej analizowano przede wszystkim metaforyczną funkcję modeli teoretycznych, którą tłumaczono albo za pomocą relacji podobieństwa, jaka zachodzi między modelem a modelowanym układem, albo jako rezultat interakcji między pierwotną a wtórną dziedzinami relacji metaforycznej. W kontekście procedury wyjaśniania eksplanans był ujmowany jako metaforyczna redeskrpcja eksplanandum dokonana w języku systemu wtórnego. Powyższe koncepcje znacznie zawężyły – w moim przekonaniu – rolę, jaką metafory odgrywają w praktyce badawczej nauk przyrodniczych.

W artykule zwrócę szczególną uwagę na tzw. kognitywną koncepcję metafory George'a Lakoffa i Marka Johnsona, którzy reprezentują odmienne niż autorzy wcześniej wymienionych koncepcji podejście do metafory, gdyż ujmują zjawisko metaforyzacji jako proces jednokierunkowy. Zakładają oni, że cały język jest w pewnym sensie metaforyczny, a bardziej abstrakcyjne dziedziny dyskursu są nam dostępne pojęciowo, gdyż można je ująć w aparacie pojęciowym bliższym codziennej praktyce życiowej. Powyższą tezę można odnieść również do języka, jakim posługują się przyrodoznawcy. Zawiera on bardzo wiele wyrażen, których znaczenie ukonstytuowała praktyka życia codziennego. Wyrażenia te, użyte do opisu dziedziny docelowej – przedmiotu badania przyrodoznawcy, pełnią funkcję metafor.

Przedmiotem mojej analizy będą metafory budowane w chemii w celu konceptualizacji obiektów i zjawisk mikroświata. Są one formułowane w języku stosowanym do opisu zjawisk makroświata lub posiadają charakter przedstawień ikonicznych. Będę zmierzał do wykazania, że bez udziału tak rozumianych metafor nie można sobie wyobrazić skutecznej praktyki laboratoryjnej chemii. W wymiarze filozoficznym argumentuję na rzecz rezygnacji z przypisywania metaforom konceptualnym funkcji poznawczych. Klasyczne rozumienie prawdziwości w odniesieniu do metaforycznych przedstawień zjawisk mikroświata nie znajduje zadowalającego ujęcia na gruncie semantyki. Metafory budowane w chemii należy uznać przede wszystkim za skuteczne narzędzia umożliwiające ujmowanie danych doświadczenia, projektowanie działań laboratoryjnych i wyjaśnianie uzyskiwanych rezultatów. Do sądów sformułowanych w metaforycznym aparacie pojęciowym można odnieść tzw. doświadczeniową koncepcję prawdy Lakoffa i Johnsona, którą uznaję za wersję pragmatycznej koncepcji prawdy.

2. Literalna *versus* metaforyczna interpretacja języka nauk przyrodniczych

W ramach epistemologicznej i metodologicznej refleksji nad językiem nauki wykluczano, zwłaszcza w obrębie tradycji empiryzmu, możliwość posługiwania się w nauce językiem metaforycznym. Odnosiło się to przede wszystkim do procesu formułowania wyników badań naukowych. Zakładano bowiem, że obowiązuje zasada ich intersubiektywnej sprawdzalności, która z kolei zakłada ich intersubiektywną komunikowalność. Spełnienie tego ostatniego warunku jest możliwe wówczas, gdy język danej dyscypliny empirycznej (język teorii naukowej) posiada jednoznaczną literalną interpretację, co oznacza, że znaczenia zdań są w pełni charakteryzowane przez warunki ich prawdziwości. Inaczej rzecz ujmując, można powiedzieć, że język teorii empirycznej jest jednoznacznie zinterpretowany, gdy posiada jedną (z dokładnością do izomorfizmu) tzw. zamierzoną interpretację jego terminów specyficznych, wyznaczoną za pomocą spójnych zbiorów procedur operacyjnych. Przekonanie o istnieniu jednoznacznej, literalnej interpretacji języka nauk przyrodniczych żywiła większość metodologów i filozofów nauki, a zwłaszcza ci, którzy byli związani z tradycją logicznego empiryzmu. Przekonanie to podzielali, i w znacznej większości do dzisiaj podzielają, sami przyrodznawcy. Jeśli są oni skłonni akceptować występowanie metafor, to jedynie jako narzędzi ułatwiających zrozumienie badanych zjawisk, a więc przede wszystkim w kontekstach: heurystycznym i edukacyjnym. Zakładają oni równocześnie, że każda metafora może być zastąpiona opisem danego zjawiska w języku zinterpretowanym literalnie.

W metodologii nauk empirycznych ostatnich kilkudziesięciu lat sformułowano wiele argumentów podważających możliwość jednoznacznej interpretacji języka

teorii empirycznej rozumianej jako jego interpretacja uniwersalna. Jednakże na trudności napotyka również wyznaczenie jednoznacznej interpretacji języka teorii, w którym buduje się modele teoretyczne, tj. jego interpretacji lokalnej za pomocą spójnego zbioru procedur operacyjnych. Dotyczy to zwłaszcza wyznaczania wartości wielkości charakteryzujących obiekty mikroświata, np. cząsteczki¹. Pomiar mają bowiem zawsze charakter makroskopowy, a wartości wielkości w nich uzyskiwane, np. długości fal, są podstawą wyznaczania wartości wielkości charakteryzujących obiekty mikroświata, np. długości wiązań w cząsteczce. Ponieważ z każdą metodą doświadczalną wiąże się określony sposób transformacji danych z przestrzeni makro do przestrzeni mikro, dlatego interpretacja lokalna języka, w którym buduje się model teoretyczny danej cząsteczki, zależy od zastosowanej procedury pomiarowej.

Powyższe uwagi, dotyczące trudności związanych z literalną interpretacją języka, w którym buduje się teoretyczne modele obiektów mikroświata, odnosiły się do zmatematyzowanego języka teorii naukowych. Jednakże jest to tylko jeden z aspektów posługiwania się językiem przez uczonych w ich praktyce badawczej. Rola języka figuratywnego ujawnia się wówczas, gdy rozpatrujemy cały proces badawczy. Susan Haack, analizując funkcje, jakie metafory mogą pełnić w nauce, wyróżniła szereg etapów w procesie dochodzenia do wiedzy teoretycznej, które następują po fazie inicjującej, polegającej na sformułowaniu ogólnych, nieprecyzyjnych idei. Są to: rozwijanie, artykułowanie, testowanie, modyfikowanie i przedstawianie teorii naukowej. Wszystkie te etapy pracy uczonych posiadają charakter dyskursywny, a język figuratywny, zwłaszcza metaforyczny, odgrywa w nich olbrzymią rolę [Haack, 1994, s. 12]. Jego znaczenie okazuje się jeszcze większe, gdy podda się analizie laboratoryjną praktykę badawczą, której celem nie jest sformułowanie teorii naukowej, lecz wytworzenie nowej substancji lub nowego zjawiska. Metafory, którymi posługują się uczeni w swojej praktyce eksperymentalnej, mają nie tylko charakter językowy, lecz również ikoniczno-symboliczny. Kontrowersyjne zagadnienie uznawania reprezentacji ikoniczno-symbolicznych za metafory krótko omówię w piątym paragrafie artykułu.

3. Klasyczna koncepcja metafory i możliwości jej zastosowania w nauce

Metafora jest uznawana powszechnie za jeden z podstawowych tropów poetyckich i retorycznych stosowanych w szeroko rozumianej komunikacji językowej. Za twórców klasycznej koncepcji metafory uchodzą Arystoteles i Kwintylianus.

¹ Zagadnienie to omówiłem szczegółowo w artykule: [Zeidler, 1999(a)], zawartym również w niniejszym tomie.

Koncepcja ta opiera się na substytucji i porównaniu, które umożliwiają odkrycie podobieństwa między dziedziną pierwotną a dziedziną wtórną metafory². Podobieństwo jest podstawą ustanowienia metafory i uzasadnia użycie słowa w znaczeniu przenośnym. Metafora zatem nie może ustanawiać podobieństwa, a jedynie opisywać podobieństwo, które istnieje obiektywnie. Metafora ma więc swoje uzasadnienie w analogii przedmiotowej, zachodzącej między dziedziną pierwotną a dziedziną wtórną, lecz na płaszczyźnie językowej jest przeniesieniem znaczenia wyrażenia odnoszącego się do dziedziny wtórnej na znaczenie wyrażenia odnoszącego się do dziedziny pierwotnej metafory. Metaforę, zgodnie z ujęciem klasycznym, można zawsze przetłumaczyć, tzn. wyrazić w języku interpretowanym literalnie, za pomocą którego opisujemy dziedzinę pierwotną metafory. Dlatego metafora nie dostarcza nowych informacji o rzeczywistości, a pełni jedynie funkcję emotywną i perswazyjną.

Powyższe rozumienie metafory uzasadniało jej wykluczenie z języka, w którym formułuje się wyniki badań naukowych. Skoro metafora nie jest żadną innowacją semantyczną, skoro zawsze może być przetłumaczona na język literalnie interpretowany, to nie ma żadnej potrzeby, aby się nią posługiwać, a nawet więcej – metafory są szkodliwe w nauce, gdyż prowadzą do braku precyzji i do wieloznaczności. Jeśli więc spełniają jakąś pozytywną rolę, to jedynie na etapie heurystyki, co nie jest istotne z punktu widzenia metodologii i teorii poznania naukowego, które koncentrują się na analizie wytworów wiedzy naukowej.

4. Metafory jako modele teoretyczne

Zasadniczy przełom w podejściu do metafory w nauce dokonał się dopiero w latach sześćdziesiątych XX wieku wraz z pracami Maxa Blacka i Mary Hesse. Ten pierwszy jest uważany za jednego z twórców interakcyjnej koncepcji metafory, zgodnie z którą semantyki wyrażen, odnoszących się do dziedziny pierwotnej i do dziedziny wtórnej metafory, wzajemnie na siebie oddziałują, co prowadzi do ich modyfikacji. Jest to zatem dwukierunkowa koncepcja metafory³. W jaki jednakże sposób dziedzina pierwotna wpływa na wtórną? Czy za pomocą danych empirycznych uzyskanych w badaniu dziedziny pierwotnej? Max Black oraz Mary Hesse powiązali analizę metafor występujących w nauce z analizą modeli teoretycznych za pomocą pojęcia analogii. Ich zdaniem „modele (metafory) rozwijają strategię rozumienia pewnej dziedziny dzięki zastosowaniu dobrze

² Wykorzystuję charakterystykę klasycznej koncepcji metafory, którą można znaleźć w pracach: [Ricoeur, 1989, s. 128] i [Lakoff, Johnson, 1988, s. 181].

³ Olaf Jäkel twierdzi, że aspekty dwukierunkowości zawierała już klasyczna koncepcja metafory [Jäkel, 2003, s. 97].

zrozumiałych pojęć używanych do opisu innej dziedziny, za pomocą analogii wprowadzonej przez te modele (metafory)” [Bailer-Jones, 2002, s. 118]. Jednakże koncepcja Blacka nie wytrzymuje krytyki, gdyż układ modelowany (pierwotny) jest dostępny badaniu dzięki konceptualizacji teoretycznej dokonywanej w aparacie pojęciowym, w którym konstruuje się model (metaforę), a jak wykazała Mary Hesse, również interpretacja danych empirycznych, uzyskanych w wyniku badania układu pierwotnego, jest dokonywana w świetle modelu. Dla Hesse rola metafory w nauce związana jest przede wszystkim ze stosowaniem procedury wyjaśniania: „dedukcyjny model wyjaśniania powinien być zmodyfikowany i uzupełniony przez ujęcie wyjaśniania teoretycznego jako metaforycznej re-deskrypcji dziedziny eksplanandum” [Hesse, 1966, s. 157]. Modele teoretyczne stosowane w nauce są rozwiniętymi w sposób systematyczny metaforami, a wyjaśnienie teoretyczne (zbudowanie modelu) to opisanie czegoś na nowo w sposób metaforyczny.

Choć autorka posługuje się oryginalną koncepcją analogii, to podpada ona pod ujęcie analogii przedmiotowej, które krótko scharakteryzowałem w artykule poświęconym modelowaniu teoretycznemu⁴. Można powiedzieć, że stwierdzenie zachodzenia analogii polega na orzekaniu o pewnych cechach i relacjach przedmiotu pierwotnego (układu modelowanego) na zasadzie jego podobieństwa do przedmiotu wtórnego (modelu), którego odpowiednie cechy i relacje są znane.

Modele teoretyczne mogą być rozumiane jako metafory, gdyż są budowane w celu reprezentowania układu empirycznego (dziedziny pierwotnej) w języku stosowanym do opisu innego układu (dziedziny wtórnej), np. model gazu sformułowany w „języku” kul bilardowych. W przypadku modelu teoretycznego mającego postać układu równań zakładano, że oddaje on strukturę relacyjną układu modelowanego, a więc należy przyjąć, że zachodzi podobieństwo strukturalne między tymi dwoma układami, które może być wykazane przez ich porównanie. Powyższe założenie opiera się na przekonaniu, że zawsze istnieje możliwość literalnego opisu układu modelowanego – pierwotnego przedmiotu metafory. Analiza wielu przykładów, dotyczących zwłaszcza procesów modelowania obiektów i zjawisk mikroświata, wykazuje, że nie jest to możliwe. Bardzo często nie mamy innego, niż metaforyczny, dostępu pojęciowego do badanych układów empirycznych, np. cząsteczek związków chemicznych. Tak więc podstawowym celem budowania modeli teoretycznych (metafor) nie jest ustalenie analogii, lecz umożliwienie dostępu pojęciowego do modelowanego zjawiska, a modele (metafory) pozwalają na zinterpretowanie danych uzyskanych w trakcie jego badania [Bailer-Jones, 2002, s. 113].

⁴ Zobacz artykuł *Metodologiczne i semiotyczne aspekty modelowania teoretycznego w chemii* zamieszczony w niniejszym tomie.

5. Kognitywna koncepcja metafory i możliwości jej zastosowania w nauce

G. Lakoff i M. Johnson są twórcami tzw. konceptualnej koncepcji metafory, która została sformułowana dla metafor występujących w codziennej komunikacji językowej [Lakoff, Johnson, 1988]. Autorzy charakteryzują sposób, w jaki kształtuje się podstawowy aparat pojęciowy, za pomocą którego ludzie opisują swoje doświadczenie⁵. Metafora to, ich zdaniem, „pojmwowanie jednej rzeczy w terminach innej, a jej podstawową funkcją jest rozumienie” [Lakoff, Johnson, 1988, s. 59]. Im jakieś pojęcie jest bardziej abstrakcyjne, tym większa jest rola metafor w nadaniu mu znaczenia. Główną funkcją metafor jest więc udostępnienie pojęciowe abstrakcyjnych dziedzin naszego życia, dzięki któremu możliwe jest ich zrozumienie. Lakoff i Johnson uważają, „że większa część naszego zwyczajnego systemu pojęciowego ma strukturę metaforyczną, co znaczy, że większość pojęć daje się zrozumieć za pośrednictwem innych pojęć” [Lakoff, Johnson, 1988, s.81]. Wiele używanych przez nas pojęć nabiera znaczenia w rezultacie naszego nieustannego doświadczenia przestrzennego, które wyrasta ze współdziałania ze środowiskiem fizycznym. Można więc powiedzieć, że to stopień powiązania z codziennym doświadczeniem decyduje, czy uznajemy dane wyrażenie za interpretowane dosłownie, czy metaforycznie.

Autorzy *Metafor w naszym życiu* uważają, iż: „1) Metafora jest przede wszystkim sprawą myśli i działania, a jedynie wtórnie sprawą języka. 2a) Metafory mogą opierać się na podobieństwach, chociaż w wielu przypadkach, owe podobieństwa same opierają się na metaforach konwencjonalnych, te zaś na podobieństwach się nie opierają [...]. 2b) Chociaż metafora może częściowo opierać się na podobieństwie, istotne podobieństwa rozumiemy jako coś stworzonego przez metaforę [...]. 3) Podstawową funkcją metafory jest dostarczanie częściowego zrozumienia jakiegoś rodzaju doświadczenia w terminach innego rodzaju doświadczenia” [Lakoff, Johnson, 1988, s. 182]. Koncepcja Lakoffa i Johnsona pozostaje w opozycji zarówno do klasycznej koncepcji metafory, jak i do koncepcji Blacka i Hesse, gdyż jest jednokierunkowa. Wtórna dziedzina metafory kształtuje sposób rozumienia wyrażenia, które odnosi się do pierwotnej dziedziny metafory, lecz nie odwrotnie. Dla wielu dziedzin przedmiotowych trudno jest wskazać na język ich literalnego opisu. Dziedziny te mogą być pojęciowo dostępne wyłącznie dzięki zastosowaniu aparatu pojęciowego używanego do opisu dziedziny wtórnej. Za przykład mogą służyć, wspomniane już, obiekty mikroświata, chyba że przyjmiemy, iż to język rachunku prawdopodobieństw jest literalnym językiem ich opisu. Jednakże, gdy posługujemy się funkcją ψ , to nie wystarczy powiedzieć, że jest to funkcja prawdopodobieństwa,

⁵ Omawiając koncepcję metafory Lakoffa i Johnsona oraz jej zastosowanie w nauce, wykorzystuję fragment pracy: [Zeidler, 2011, s. 336-338].

lecz trzeba jej nadać interpretację fizyczną, zgodnie z którą jest to funkcja prawdopodobieństwa znalezienia elektronu w danym punkcie wokół jądra atomu. Pełniejszy fizyczny „wgląd” w sytuację opisaną za pomocą tej funkcji uzyska się wówczas, gdy stwierdzi się, że przedstawia ona rozkład ładunku albo chmurę ładunku, a kwadrat bezwzględnej wartości funkcji falowej reprezentuje gęstość ładunku w danym obszarze wokół jądra atomu. Zazwyczaj metaforyczny opis dziedziny pierwotnej jest uzupełniany o pewne nowe założenia, które nie pochodzą z opisu dziedziny wtórnej, jak to miało miejsce w przypadku modelu atomu wodoru Bohra, w którym porównanie do budowy układu słonecznego zostało uzupełnione o warunki kwantowe. Warunki te, specyficzne do modelowanego obiektu mikroświata, w żaden sposób nie wpływały na semantykę języka, w którym opisywał się Układ Słoneczny. Z powyższego względu interakcyjną koncepcję metafory należy uznać za zasadniczo nieadekwatną. Odnosi się to zwłaszcza do procesu metaforyzacji, który ma miejsce w praktyce badawczej nauk przyrodniczych, gdy opisuje się zjawiska zachodzące w mikroświecie.

Theodor Brown wykorzystał kognitywną koncepcję metafory do analizy praktyki badawczej nauk przyrodniczych, a zwłaszcza ich praktyki laboratoryjnej [Brown, 2003]. Zamierzeniem autora *Making Truth. Metaphor in Science* była charakterystyka różnych aspektów pracy badawczej, a nie tylko analiza tych, które wiążą się z kontekstem uzasadniania wiedzy naukowej. Współczesną filozofię nauki interesuje przede wszystkim to, w jaki sposób uczeni są w stanie, za pomocą swoich teorii i modeli, projektować i przeprowadzać nowatorskie eksperymenty oraz interpretować ich wyniki. Metafory są ujmowane jako podstawowe narzędzie konceptualne służące do formułowania i rozwiązywania problemów badawczych nauk laboratoryjnych. Zastosowanie kognitywnej koncepcji metafory Lakoffa i Johnsona do analizy metafor występujących w nauce opiera się na następujących założeniach: a) uczeni rozumieją świat głównie za pomocą pojęć metaforycznych; b) uczeni w swojej aktywności badawczej wykorzystują ten sam aparat konceptualny, co w innych dziedzinach swojej codziennej aktywności; c) sposób rozumienia podstawowych pojęć jest ukształtowany przez codzienne doświadczenie uczonych, wynikające z fizycznego kontaktu z otaczającym ich światem; d) sposób organizacji i nadawania struktury danym doświadczenia naukowego jest pochodną organizowania danych codziennego doświadczenia we wzory ukształtowane przez interakcję uczonych z otaczających ich światem fizycznym i społecznym [Brown, 2003, s. 50-51]. Z powyższych założeń Brown wyprowadza wniosek, że sposoby rozumowania i komunikowania stosowane w nauce nie różnią się w sposób fundamentalny od tych, które są stosowane w innych formach intelektualnej działalności ludzi.

Podstawowa konsekwencja epistemologiczna kognitywnej koncepcji metafory polega na odrzuceniu stanowiska, które Lakoff i Johnson określają mianem „mitu obiektywizmu”, a które opiera się na idei prawdy absolutnej. Ich zdaniem należy

przyjąć koncepcję prawdy zrelatywizowaną do systemu pojęć, który w dużej mierze określony jest za pośrednictwem metafor, a teoria znaczenia i prawdy powinna być oparta na teorii rozumienia. Metafory to przede wszystkim narzędzia działania i organizowania doświadczenia, a dopiero wtórnie narzędzia poznawania. Jest to zasadniczy powód, dla którego kognitywna koncepcja metafory jest dobrym narzędziem do opisu aparatu pojęciowego stosowanego w praktyce laboratoryjnej chemii. Zauważmy, że podobne stanowisko zajął T. Kuhn, gdy analizował epistemologiczne konsekwencje metaforyzacji języka nauki, choć był zwolennikiem interakcyjnej koncepcji metafory Blacka. Zastanawiając się, „czy sensowniejsze jest mówienie o dostosowywaniu się języka do świata niż o dostosowywaniu się świata do języka?“, doszedł do wniosku, że „to, co nazywamy ‘światem’, jest być może produktem wzajemnego dostosowywania się doświadczenia i języka?” [Kuhn, 2003, s. 190].

Lakoff i Johnson zarysowali koncepcję prawdy, którą określili mianem „mitu doświadczeniowego” [Lakoff, Johnson, 1988, s. 220-220, 254-256]: „Prawda zawsze odnosi się do rozumienia, które opiera się na uniwersalnym systemie pojęciowym” [s. 255]. Rozumienie, ich zdaniem, wymaga oparcia się na doświadczeniu, które wyłania się z nieustannego skutecznego funkcjonowania w otoczeniu fizycznym i kulturowym. Prawda ma charakter koherentny, gdyż zależy od dopasowania do systemu pojęciowego. Pojęcia nie odpowiadają wewnętrznym cechom rzeczy, lecz jedynie cechom interakcyjnym, a ludzie posługujący się różnymi systemami pojęć mogą pojmować świat w sposób zupełnie odmienny od naszego. Z tym ostatnim stwierdzeniem zgodziliby się nie tylko T. Kuhn czy H. Putnam, lecz także inni przedstawiciele szerokiego nurtu relatywizmu pojęciowego.

6. Reprezentacje ikoniczno-symboliczne jako metafory

W ramach praktyki laboratoryjnej zarówno chemii, jak i innych dyscyplin przyrodniczych istotną rolę odgrywają nie tylko metafory językowe, lecz również metafory wizualne (obrazowe)⁶, które od strony semiotycznej mają charakter ikoniczno-symboliczny. Uznanie reprezentacji wizualnych (ikoniczno-symbolicznych) za metafory jest rozstrzygnięciem bardzo kontrowersyjnym. Można jednakże bronić tezy, że są wszelkie dane po temu, aby – zwłaszcza z punktu widzenia podstawowych założeń kognitywnej koncepcji metafory – tego typu reprezentacje uznawać za metafory⁷. Dostęp poznawczy do pierwotnej dziedziny

⁶ O zasadności wyróżniania metafor wizualnych (obrazowych) przekonuje N. Carroll [1994, s. 189-218].

⁷ Ch. S. Peirce zaliczał metafory do znaków ikonicznych. Należy jednak zauważyć, że to podmiot tworzy metafory ikoniczne, wykorzystując w tym celu już istniejące, lub proponując

badania naukowego jest możliwy nie tylko dzięki metaforom językowym. W wielu przypadkach to wykorzystanie odpowiednich metafor ikoniczno-symbolicznych: schematów, diagramów, wykresów i modeli materialnych, umożliwia wyobrażenie sobie, a w konsekwencji – zrozumienie mechanizmu rządzącego danym zjawiskiem. Narysowany za pomocą określonych znaków graficznych lub zbudowany z kul i prętów model DNA jest metaforą mającą reprezentować niektóre aspekty składu i struktury tej cząsteczki, a także umożliwiać wyjaśnienie procesu jej replikacji oraz procesu syntezy białek⁸. Będę utrzymywał, podobnie jak to czyniłem w odniesieniu do ikoniczno-symbolicznych modeli teoretycznych⁹, że wiele metafor wizualnych nie bazuje na podobieństwie dziedziny pierwotnej do dziedziny wtórnej metafory, lecz są jedynie nośnikami informacji o dziedzinie pierwotnej metafory.

Z epistemologicznego punktu widzenia za kluczowe należy uznać pytanie: *czy metafory ikoniczne mogą być nośnikami prawdy?*¹⁰. Laura Perini twierdzi, że jeśli obrazowe reprezentacje – metafory ikoniczne są przesłankami rozumowań sformułowanych w nauce, to mogą być nośnikami prawdy [Perini, 2005, s. 262-285]. Czy jednak znaki ikoniczno-symboliczne mogą występować w rozumowaniach w roli przesłanek? William Goodwin, poddając analizie rolę wzorów strukturalnych w chemii, uważa, że nie mogą, gdyż nie są zdaniem, lecz nazwami [Goodwin, 2009, s. 372-390].

Sądzę, że do metafor ikoniczno-symbolicznych można z powodzeniem odnieść doświadczeniową koncepcję prawdy Lakoffa i Johnsona, która została sformułowana dla metafor językowych. Niezależnie od rozstrzygnięcia powyższej kwestii spornej, można wykazać, że metafory ikoniczno-symboliczne nie tylko ujmują dane doświadczenia, lecz umożliwiają zrozumienie reprezentowanych zjawisk, dzięki czemu mogą być pomocne w ich wyjaśnianiu i przewidywaniu, a także stanowią poręczne narzędzia projektowania działań laboratoryjnych.

nowe, konwencje; są więc one *de facto* znakami ikoniczno-symbolicznymi. Uwzględnienie konwencjonalnego charakteru metafor ikonicznych jest istotne zwłaszcza wtedy, gdy analizuje się praktykę badawczą różnych dyscyplin naukowych, w których nierzadko odgrywają one bardzo ważną rolę w procesie dochodzenia do wiedzy naukowej. Mogą obrazować skład, strukturę lub mechanizm działania przedmiotu pierwotnego metafory, a tym samym mogą być, choć nie zawsze, uznawane za modele teoretyczne.

⁸ Wzory strukturalne i modele materialne struktur cząsteczek związków chemicznych ujmowane jako metafory wizualne analizuje Brown [2003, s. 22-24].

⁹ Zobacz artykuł *Metodologiczne i semiotyczne aspekty modelowania teoretycznego w chemii* zawarty w niniejszej książce.

¹⁰ Zagadnienie to analizowałem w artykule *Prawda i znaczenie w świetle metaforycznego charakteru aparatu konceptualnego nauk empirycznych* [Zeidler, 2011].

7. Metafory w praktyce badawczej chemii

Wśród niewielu analiz poświęconych metaforom w chemii dominowały takie, które odwoływały się do klasycznej koncepcji metafory opartej na analogii lub wykorzystywały interakcyjną koncepcję metafory, dla której relacja analogii również posiada konstytutywny charakter¹¹. W poprzednich paragrafach artykułu argumentowałem na rzecz tezy, że gdy w chemii reprezentuje się zjawiska zachodzące na poziomie mikroskopowym, to można je opisać jedynie w języku stosowanym do opisu zjawisk zachodzących na poziomie makroskopowym. Nie dysponujemy bowiem literalnie interpretowanym językiem opisu procesów zachodzących na poziomie cząsteczkowym, chyba że za taki uzna się język rachunku prawdopodobieństwa. Jednakże ten ostatni nie dostarcza zrozumienia zachodzących zjawisk, które jest istotne zwłaszcza z punktu widzenia eksperymentalnej praktyki badawczej chemii¹². Konsekwencją powyższego stanu rzecz jest również to, że nie można ustanowić podobieństwa między dziedziną pierwotną a dziedziną wtórną metafory, a więc oprzeć metafory na analogii. W paragrafie czwartym starałem się wykazać, że koncepcją, która unika tej trudności, jest kognitywna koncepcja metafory Lakoffa i Johnsona.

Uzasadnienie przekonania, że znaczna część aktywności intelektualnej w teoretycznej i laboratoryjnej praktyce badawczej chemii ma charakter metaforyczny w rozumieniu Lakoffa i Johnsona, wymaga analizy konkretnych przykładów. W artykułach zawartych w niniejszym tomie omówiłem kilka przykładów modeli teoretycznych budowanych w chemii¹³. Modele teoretyczne można uznawać za metafory nie tylko z perspektywy interakcyjnej koncepcji metafory Blacka i Hesse, lecz również z perspektywy kognitywnej koncepcji metafory Lakoffa i Johnsona. Chemicy posługują się metaforami (modelami teoretycznymi), gdy chcą zrozumieć badane przez siebie zjawiska, które zachodzą na poziomie molekularnym. Dlatego budują metafory (modele) układów i procesów mikroskopowych za pomocą pojęć i reprezentacji wizualnych, które mają sens metaforyczny w rozumieniu Lakoffa i Johnsona, gdyż odnoszą się do zjawisk makroskopowych dostępnych w codziennym doświadczeniu.

Wzory strukturalne mogą być uznane za metafory ikonoczno-symboliczne, a ich rola w wyjaśnianiu i przewidywaniu przebiegu procesów chemicznych trudna jest do przecenienia. Przywoływany już kilkakrotnie w tej książce podstawowy

¹¹ Zobacz np. [Rothbart, 1997].

¹² Do podobnego wniosku dochodzą również autorzy artykułu *Metaphorical Models in Chemistry* [Bhushan, Rosenfeld, 1995, s. 578-582].

¹³ Odnosi się to zwłaszcza do artykułów: *O teoretyczności chemii – studium metodologiczne* [Zeidler, 1999(a)] oraz *Metodologiczne i semiotyczne aspekty modelowania teoretycznego w chemii*, zawartych w niniejszej książce.

dogmat chemii głosi, że kształt cząsteczek związku chemicznego o określonym składzie jest ich niezmienną i immanentną właściwością, która decyduje o tożsamości związku chemicznego, a od niego zależą jego własności fizyczne, chemiczne i biologiczne. Jednakże pojęcie kształtu jest pojęciem zaczerpniętym z naszego codziennego doświadczenia życiowego. Jego odniesienie do obiektów mikroświata – cząsteczek znajduje uzasadnienie na gruncie klasycznego modelu budowy cząsteczki, który został uzyskany dzięki przyjęciu szeregu założeń kontrfaktycznych, np. założenia adiabatycznego, Borna-Oppenheimera i założenia jednoelektronowego. W świetle klasycznego, tzw. sztywnego modelu budowy cząsteczki można było ująć wyniki badań spektroskopowych w podczerwieni o relatywnie niewielkiej rozdzielczości.

W latach osiemdziesiątych i dziewięćdziesiątych XX wieku w rezultacie zastosowania bardzo czułych metod pomiaru widm w podczerwieni otrzymano wyniki, których nie można było zinterpretować zgodnie z klasycznym modelem budowy cząsteczki. Zmiana modelu polegała na stopniowym uchylaniu przybliżeń leżących u podstawy modelu klasycznego¹⁴. Sformułowano najpierw semi-sztywny, a później dynamiczny model budowy cząsteczki, w którym kształt cząsteczki jest pochodną jej stanu energetycznego i może ulegać ciągłym zmianom. W świetle modelu dynamicznego pojęcie „kształt cząsteczki”, rozumiane jako jej niezmienna immanentna właściwość, traci swój pierwotny sens, stając się metaforą. Zauważmy jednak, że w odniesieniu do zdecydowanej większości zjawisk opisywanych w chemii, klasyczny model struktury cząsteczki dobrze spełnia swoje eksplanacyjne oraz predyktywne funkcje i umożliwia zrozumienie mechanizmów rządzących przemianami chemicznymi. Bez pojęcia klasycznie rozumianego kształtu cząsteczki nie można sobie wyobrazić praktyki badawczej współczesnej chemii, choć nie jest on właściwością obiektów mikroświata przypisywaną im przez mechanikę kwantową. Jednakże operowaniem kształtami cząsteczek związków chemicznych umożliwia obrazową reprezentację przemian chemicznych i w rezultacie umożliwia ich zrozumienie.

Kluczowe znacznie w tym względzie posiada struktura związków organicznych zdeterminowana przez własności atomu węgla, a dokładniej – przez typ hybrydyzacji, której ulegają orbitale jego powłoki walencyjnej. Hybrydyzacja polega na odpowiednim „mieszaniu” orbitali atomowych węgla, np. hybrydyzacja sp^3 jest hybrydyzacją, która wyznacza tetraedryczny kształt cząsteczki, której atomem centralnym jest atom węgla o takiej hybrydyzacji. Jednakże „hybrydyzacja” jest pojęciem czysto matematycznym, odnoszącym się do określonego sposobu wyznaczenia postaci funkcji falowej, przy której energia stanu podstawowego cząsteczki

¹⁴ Zagadnienie przejścia od sztywnego do dynamicznego modelu struktury cząsteczki związku chemicznego omówiłem szczegółowo w artykule *O teoretyczności chemii – studium metodologiczne* [Zeidler, 1999], zawartym również w niniejszej książce.

będzie zgodna z obserwowaną. Jak zauważają teoretycy chemii, można zaproponować inne postaci funkcji falowej, które również prowadziłyby do wartości energii stanu podstawowego cząsteczki zgodnej z wyznaczoną z pomiarów, lecz nie dostarczałyby reprezentacji umożliwiających wyjaśnienie i przewidzenie tak wielu właściwości związków węgla. Metoda hybrydyzacji orbitali powłoki walencyjnej jest przydatna, gdyż reprezentacje graficzne kształtu cząsteczki oraz rozkładu gęstości ładunku „dostarczają” zrozumienia zachodzących zjawisk.

Jednym z nich jest zjawisko chiralności. „Pod pojęciem chiralności rozumiemy brak identyczności cząsteczki z jej lustrzanym odbiciem. Chiralność cząsteczek sprowadza się zatem do możliwości istnienia dwóch odmian enancjomerycznych cząsteczek i występuje jako cecha ich budowy w każdym przypadku, kiedy dana cząsteczka nie jest identyczna ze swoim odbiciem lustrzanym” [Siemion, 1985, s. 22]. Związkami chiralnymi są na przykład związki, których centralny atom węgla posiada hybrydyzację sp^3 (hybrydyzację tetraedryczną) i jest podstawiony czterema różnymi podstawnikami. Termin „chiralność”, który pochodzi od greckiego słowa *cheir* – ręka, jest metaforą. Relacja, jaka istnieje pomiędzy enancjomerami chiralnego związku chemicznego przypomina relację między prawą i lewą ręką, których nie można na siebie tak nałożyć, aby nakrywały się wszystkie palce obu rąk [Siemion, 1985, s. 22]. Asymetryczny atom węgla o hybrydyzacji sp^3 jest centrum chiralności cząsteczki, jeśli posiada różne podstawniki. Jest tak w przypadku enancjomerów α -aminokwasu przedstawionego na rysunku 1, które są swoimi lustrzanymi odbiciami [Siemion, 1985, s. 23].

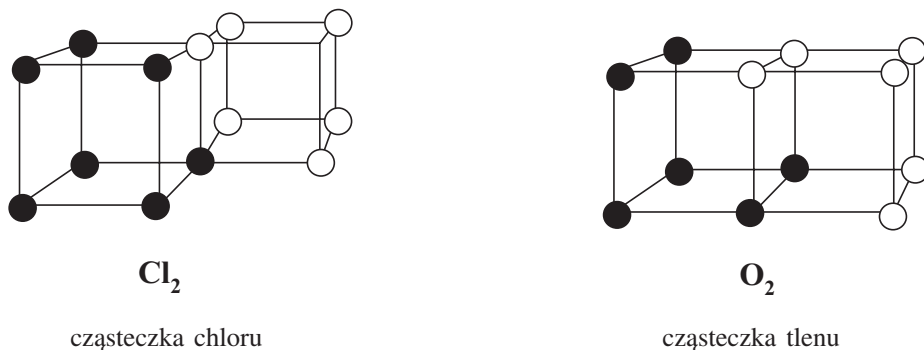


Rys. 1. Izomery konfiguracyjne (enancjomery) α -aminokwasu

Enancjomery można rozróżnić, gdyż w odmiennych kierunkach skręcają płaszczyznę polaryzacji światła. Ponieważ enancjomery danego związku mogą różnić się w sposób istotny właściwościami chemicznymi i biologicznymi, dlatego synteza asymetryczna, prowadząca do otrzymania tylko jednego enancjomeru danego związku, jest jednym z najważniejszych, a zarazem najtrudniejszych wyzwań chemii organicznej.

Innymi metaforami pełniącymi w chemii kluczową rolę są modele wiązania chemicznego, które omówiłem w artykule *Metodologiczne i semiotyczne aspekty modelowania teoretycznego w chemii* zamieszczonym w niniejszej książce. Poglądowa reprezentacja powłoki walencyjnej atomów jako sześciątów, na którego

narożnikach znajdują się statyczne elektrony w ilościach odpowiadających wartościowości atomu danego pierwiastka, umożliwiała zrozumienie powstawania wiązań pojedynczych i podwójnych. Jest ono rezultatem stykania się sześciennych powłok walencyjnych dwóch atomów tworzących wiązanie albo krawędziami, albo ścianami. Na rysunku 2 zobrazowano powstawanie wiązania pojedynczego w cząsteczce Cl_2 i wiązania podwójnego w cząsteczce O_2 zgodnie z oryginalną koncepcją Lewisa. Koła czarne i białe reprezentują elektrony umieszczone na powłokach walencyjnych, odpowiednio: czarne – pierwszego atomu chloru i pierwszego atomu tlenu, białe – drugiego atomu chloru i drugiego atomu tlenu.



Rys. 2

Koncepcja wiązania kowalencyjnego zaproponowana przez G. Lewisa w 1916 roku pozostawała w sprzeczności z modelem budowy atomu wodoru Bohra, w którym elektrony krążyły po orbitach kołowych. Jednakże w ramach teorii Bohra nie można było reprezentować stabilnego wiązania kowalencyjnego ujmowanego jako u Wspólniona para elektronów, znajdująca się między dwoma atomami tworzącymi wiązanie. Z czasem Lewis zrezygnował z przedstawiania powłok walencyjnych pod postacią sześciątów i pozostał przy wzorach, które obecnie noszą nazwę wzorów elektronowych Lewisa. Elektrony, ujmowane jako ładunki punktowe, są reprezentowane przez kropki. Wspólnione elektrony, tworzące wiązanie, uzupełniają powłokę walencyjną każdego atomu do stabilnego oktetu.

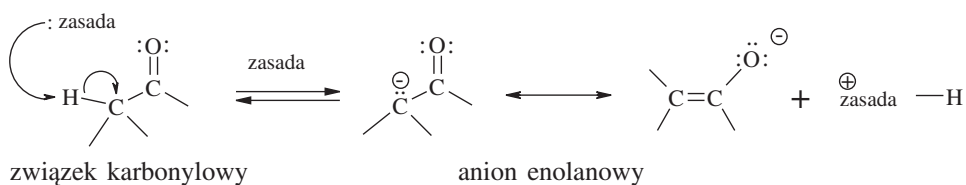


Rys. 3

W praktyce badawczej chemii wiązania kowalencyjne reprezentowane za pomocą metod molekularnej mechaniki kwantowej są często reinterpretowane na

gruncie klasycznej koncepcja wiązania kowalencyjnego Lewisa. Dotyczy to zwłaszcza metody wiązań walencyjnych. Niekiedy dzieje się odwrotnie. Mamy zatem do czynienia z zastępowaniem jednej metaforyki inną, jeśli tylko prowadzi to do lepszego zrozumienia sytuacji problemowej i ułatwia jej rozwiązanie.

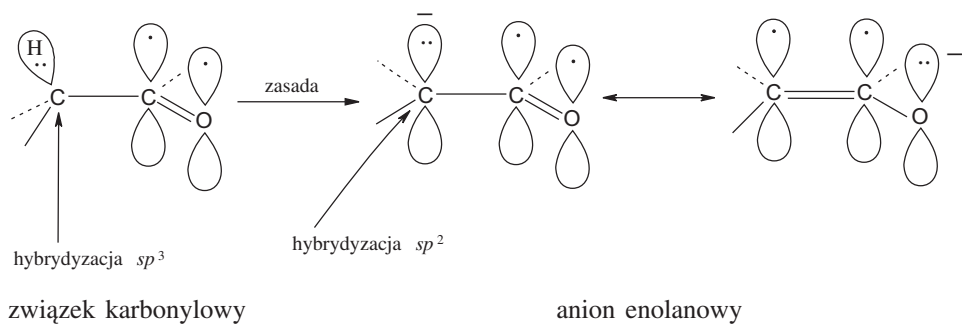
Wzory strukturalne, jak już wielokrotnie stwierdzałem, są ikoniczno-symbolicznymi modelami teoretycznymi, które można uznać za rozwinięte w sposób systematyczny metafory. Są one wykorzystywane w przedstawianiu przebiegu przemian chemicznych. Omówię to zagadnienie na przykładzie reakcji związków karbonylowych z silnymi zasadami, które prowadzą do utworzenia jonu enolanowego. W klasycznym zapisie, wykorzystującym wzory Lewisa, można mechanizm tej reakcji przedstawić w sposób następujący [McMurry, 2003, s. 875]:



Rys. 4

Następuje atak silnej zasady na wiązanie C – H przy atomie węgla α , w wyniku którego dochodzi do rozerwania tego wiązania, oderwania protonu (kwasowego atomu wodoru) i powstania anionu enolanowego. Anion enolanowy występuje w dwóch postaciach rezonansowych. W jednej z nich wolna para elektronów jest zlokalizowana na atomie węgla α względem węgla grupy karbonylowej, a w drugiej na atomie tlenu. Powyższy zapis reakcji jest przedstawiony z wykorzystaniem klasycznej elektronowej koncepcji wiązań chemicznych Lewisa i uzupełniony o komentarz odwołujący się do pojęć wziętych z języka potocznego, takich jak „atak silnej zasady na wiązanie C – H”, „rozerwanie wiązania” czy „oderwanie protonu”. Zgodnie z koncepcją Lakoffa i Johnsona dokonujemy metaforycznej reprezentacji procesu chemicznego za pomocą reprezentacji obrazowych (ikoniczno-symbolicznych) i pojęć wziętych z mniej abstrakcyjnych dziedzin dyskursu. Dzięki temu „uzyskujemy” zrozumienie (wyjaśnienie) badanego zjawiska. Jednakże dla niektórych badaczy jest ono niewystarczające. Stawiają pytanie: „dlaczego związki karbonylowe są słabo kwasowe?” („dlaczego oderwaniu ulegnie atom wodoru przy węglu α ?”). Chcąc odpowiedzieć na to pytanie, należy w inny sposób reprezentować ten sam proces. Wykorzystuje się w tym celu reprezentacje graficzne orbitali atomowych [McMurry, 2003, s. 876].

Opis towarzyszący powyższej graficznej reprezentacji przebiegu tej reakcji jest następujący: „Oderwanie protonu ze związku karbonylowego zachodzi wtedy,



Rys. 5

gdy wiązanie C–H w pozycji α jest zorientowane w przybliżeniu równoległe do orbitali p grupy karbonylowej. Atom węgla α jonu enolanowego ma hybrydyzację sp^2 i ma w związku z tym orbital p, który nakłada się z sąsiednimi orbitalami p grupy karbonylowej. Dzięki temu nakładaniu ładunek ujemny jest zdelokalizowany również na elektroujemny atom tlenu i w ten sposób jon enolanowy jest stabilizowany przez rezonans między dwiema strukturami” [McMurry, 2003, s. 876]. Odpowiedź na postawiony problem badawczy stała się możliwa, gdyż koncepcja orbitali molekularnych wraz z ich reprezentacjami graficznymi umożliwiła zobrazowanie zmiany hybrydyzacji na atomie węgla α z hybrydyzacji sp^3 na sp^2 . Reprezentacja graficzna została uzupełniona o pojęcia wzięte z języka potocznego: „nakłada się”, „zdelokalizowany” czy „stabilizowany”.

Przedstawione powyżej dwa modele teoretyczne – rozwinięte metafory przemiany chemicznej, prowadzącej do powstania jonu enolanowego, wykorzystują różne sposoby reprezentowania przebiegu reakcji chemicznych oparte na odmiennych koncepcjach teoretycznych. Pytanie, który z tych opisów jest prawdziwy w klasycznym sensie tego terminu, pozbawione jest sensu. „Wgląd” w przebieg przemiany chemicznej, jaki umożliwiają różne sposoby reprezentacji, nie posiada charakteru poznawczego. Pojęcie prawdy jest zrelatywizowane do wybranego sposobu reprezentacji, a te nie są równoważne. Reprezentacja za pomocą orbitali atomowych umożliwiła udzielenie odpowiedzi na pytanie, na które nie można było odpowiedzieć na gruncie klasycznej koncepcji wiązań chemicznych Lewisa i związanych z nią sposobów reprezentacji. W artykule *Status ontologiczny orbitali atomowych i molekularnych w kontekście autonomii chemii* [Zeidler, 2007], zamieszczonym również w niniejszej książce, podałem kilka argumentów, które sprawiają, że z teoretycznego punktu widzenia realistyczna interpretacja orbitali jest nie do utrzymania. Jednakże ich użyteczność, a zwłaszcza przydatność graficznych reprezentacji orbitali w praktyce laboratoryjnej chemii, sprawia, że chemicy na ogół traktują orbitale realistycznie. Realistycznie są również skłonni traktować u Wspólnioną parę elektronów stanowiącą wiązanie kowalencyjne na gruncie koncepcji Lewisa. Wydaje się, że zarysowana przez Lakoffa i Johnsona doświadczeniowa

koncepcja prawdy trafnie oddaje sposób, w jaki pojęciem prawdy posługują się sami badacze.

Przykładem metafor konstruowanych i stosowanych w chemii mogą być również modele wyjaśniające widma związków chemicznych, uzyskiwane na przykład w spektroskopii w podczerwieni. Rozpatrując widma oscylacyjne, zakładamy model oscylatora harmonicznego, dodając do niego jedynie warunek kwantowania energii¹⁵. Molekuła n -atomowa ma $3n - 6$ lub, jeśli jest liniowa, $3n - 5$ stopni swobody oscylacji, a więc drgań własnych oscylatora. Ruchy atomów w cząsteczce, które realizują się jednocześnie, trzeba rozłożyć na składowe, gdyż drgania własne mają różne częstości. Przyjmując, że drgania własne są ortogonalne, a więc niezależne od siebie, można mówić o drganiach normalnych, które porządkuje się według ich formy. Jednym z kryteriów podziału drgań normalnych są zmiany w wiązaniach lub kątach walencyjnych. Jeśli w wyniku drgania zmieniają się głównie długości wiązań, to mówimy o drganiach rozciągających, a jeśli zmieniają się kąty między wiązaniami walencyjnymi, to mówimy o drganiach zginających lub deformacyjnych [Kęcki, 1975, s. 58-68]. Pasma w widmie oscylacyjnym danego związku chemicznego są interpretowane jako przejścia między energetycznymi poziomami oscylatorów i są wykorzystywane do identyfikacji określonych grup funkcyjnych występujących w cząsteczkach tego związku.

Oscylator harmoniczny, który jest wykorzystany do interpretacji widm oscylacyjnych substancji, może być uznany za metaforyczny model przedstawiający zjawisko absorpcji promieniowania o określonej energii przez obiekty mikroświata – cząsteczki związków chemicznych. Jest on modelem (metaforą) w ujęciu modelu teoretycznego Achinsteina, gdyż z praw mechaniki klasycznej, uzupełnionych o warunek skwantowania energii, możemy wyznaczyć częstości odpowiednich drgań, które odpowiadają częstościom fal światła podczerwonego rejestrowanym w widmie. Jest to również metafora w świetle kognitywnej koncepcji metafory, gdyż dzięki temu, że drgania rozciągające, zginające i drgania innego typu mogą być reprezentowane graficznie, uzyskujemy wyobrazeniowy wgląd w zjawiska zachodzące na poziomie molekularnym.

Richard Boyd zaproponował podział wszystkich metafor na naukowe, wprowadzane w ramach koncepcji teoretycznych oraz metafory „edukacyjne”. Te pierwsze służą do konceptualizacji badanych zjawisk i odgrywają istotną rolę w rozumowaniach przeprowadzanych w trakcie badań naukowych. Te drugie są wykorzystywane do wyjaśniania i ilustrowania zjawisk, lecz nie posiadają twórczego charakteru i nie mogą być stosowane w argumentacjach na rzecz określonych tez [Boyd, 1993, s. 485-456]. Zdaniem Boyda metafory edukacyjne są zawsze

¹⁵Widma rejestrowane w podczerwieni są widmami rotacyjno-oscylacyjnymi, jeśli cząsteczki substancji mogą wykonywać rotację. Interpretacja tego typu widm jest znacznie bardziej skomplikowana niż interpretacja samych widm oscylacyjnych.

przekładalne na metafory naukowe. Można by sądzić, że metafory użyte w omówionym przykładzie są metaforami „edukacyjnymi”, które ułatwiają zrozumienie zachodzących przemian dzięki temu, że ilustrują za pomocą wzorów strukturalnych oraz reprezentacji graficznych orbitali (metafor ikonoczno-symbolicznych) ich przebieg i ułatwiają zrozumienie, gdyż posługują się pojęciami pochodzącymi z mniej abstrakcyjnych dziedzin dyskursu. Jaki zatem byłby wyłącznie teoretyczny opis badanych przemian? Otóż okazuje się, że taki opis nie istnieje, przynajmniej opis, który pozwalałby na zrozumienie reprezentowanych procesów. Metafory umożliwiające zrozumienie badanych przemian, np. wzory strukturalne czy reprezentacje graficzne orbitali, posiadają interpretację teoretyczną, choć interpretacja ta, jak już wyżej wspomniałem, nie jest poprawna na gruncie współczesnych koncepcji molekularnej mechaniki kwantowej¹⁶. Również takie metafory, jak: „rozerwanie wiązania”, „przeniesienie ładunku” lub „nakładanie się orbitali”, umożliwiają konceptualizację badanej przemiany, a zarazem jej zrozumienie. Należy zatem zgodzić się z Susanne Knudsen, że podział na oryginalne metafory naukowe i metafory „edukacyjne” nie znajduje uzasadnienia [Knudsen, 2003, s. 1247-1263]¹⁷. Metafory, które podpadają pod pojęcie „metafor edukacyjnych”, są ważnym konceptualnym narzędziem, jakim dysponują chemicy eksperymentatorzy w swojej praktyce laboratoryjnej. Bez nich nie byłoby w stanie nie tylko rozumieć badanych zjawisk, lecz również projektować syntez prowadzących do otrzymania nowych substancji. Ponieważ metaforyczne przedstawienia przebiegu reakcji chemicznych mogą być uznane za modele teoretyczne, dlatego – podobnie jak to było w przypadku tych ostatnich – możemy odnieść do nich zasadę pragmatyczną Peirce’a¹⁸. Reguły zapisu i przekształcania wzorów strukturalnych w mechanizmach reakcji chemicznych reprezentują podstawowe operacje laboratoryjne, które umożliwiają „wyprowadzenie” dyrektyw kierujących działaniami laboratoryjnymi, prowadzącymi do zrealizowania planowanej przemiany.

¹⁶ Powyższą tezę uzasadniłem w artykułach: *Spór o status ontologiczny orbitali atomowych i molekularnych w kontekście zagadnienia autonomii chemii oraz Czy można zaobserwować orbitale? O problemie obserwowalności i realności przedmiotów teoretycznych*, które są zawarte w niniejszym tomie.

¹⁷ S. Knudsen analizowała powyższe zagadnienie na przykładzie metafor stosowanych w biologii molekularnej w odniesieniu do terminów, za pomocą których opisujemy proces syntezy białka. Metafory wzięte ze słownika odnoszącego się do opisu języka: „słowo”, „litera”, „tłumaczenie” i wiele innych są niezbędne nie tylko wówczas, gdy przybliżamy idee genetyki szerokiej publiczności, lecz również wtedy, gdy prowadzimy badania naukowe [Knudsen, 2003, s. 1247-1263].

¹⁸ Zagadnienie zastosowania pragmatycznej zasady Peirce’a do mechanizmów reakcji chemicznych, traktowanych jako modele teoretyczne, omówiłem w artykule *Metodologiczne i semiotyczne aspekty modelowania teoretycznego w chemii* zawartym w niniejszym tomie.

XII

Wyjaśnianie genetyczno-teoretyczne a praktyka eksplanacyjna w chemii organicznej

1. Wstęp

Śledząc dzieje praktyki badawczej nauk empirycznych, nietrudno wskazać na takie fakty i prawidłowości, których próby wyjaśnienia antagonizowały środowiska uczonych, co w konsekwencji przyczyniało się do rozwoju tych nauk. Niewątpliwie, w tym kontekście, istotne jest pytanie, czy próby te, a zatem sam proces wyjaśniania, podlegają określonym regułom. W książce *Wyjaśnianie i wyjaśnienie. Zarys teorii eksplanacji* Waław Mejbbaum stawia hipotezę, że przebieg epistemicznego procesu wyjaśniania nie podlega żadnemu niezmiennemu zestawowi reguł. Jest więc, zdaniem tego autora, procesem niestacjonarnym w tym sensie tego terminu, że istotne parametry tego procesu zmieniają się w czasie w sposób nieprzewidywalny¹.

Celem, który stawiam sobie w niniejszym artykule, nie jest bynajmniej próba podważenia powyższej tezy w jej ogólnym brzmieniu. Sądę bowiem, że nie jest to po prostu możliwe, gdyż każdy podany zestaw zasad może zostać podważony przez przyszłe dzieje wyjaśniania określonych faktów i prawidłowości. Jeśli zaakceptujemy argumentację Karla Poppera, wymierzoną w możliwość formułowania praw ściśle ogólnych w naukach historycznych, to można ją odnieść także do prób formułowania bezwyjątkowych zasad rządzących procesem wyjaśniania w nauce². Nie oznacza to jednak – również w zgodzie z Popperem – iż śledząc zmagania uczonych, zmierzające do podania satysfakcjonujących wyjaśnień, nie można zaobserwować pewnych tendencji wyraźnie obecnych w tym procesie. Jednakże i to zadanie jest, jak sądę, trudne do zrealizowania, gdyż wymaga bardzo

¹ Zobacz [Mejbbaum, 1995, s. 21].

² Zobacz np. [Popper, 1999].

rozbudowanych studiów historycznych nad praktyką eksplanacyjną różnych dyscyplin naukowych. Ograniczę się więc do tego, co możliwe do wykonania w ramach tego artykułu – czyli do przedstawienia i analizy dziejów wyjaśniania konkretnego typu faktów szczegółowych i prawidłowości.

W niniejszym opracowaniu będę się odwoływał do podawanych w literaturze przedmiotu wyjaśnień tych właściwości związków chemicznych, które decydują o ich reaktywności chemicznej. Mam na myśli, bardzo rozpowszechnioną w praktyce badawczej chemii, procedurę ich wyjaśniania, w której kluczową rolę odgrywają modele struktur cząsteczek związków chemicznych, tzw. wzory strukturalne. Będę więc próbował uchwycić sens sloganu, zgodnie z którym: „struktura związku chemicznego umożliwia wyjaśnianie i przewidywanie chemicznych, fizycznych i biologicznych właściwości związków chemicznych”, choć z przyczyn praktycznych ograniczę się wyłącznie do tych pierwszych właściwości. Zagadnienie to, jak sądzę, jest interesujące również z punktu widzenia teorii samego wyjaśniania. W eksplanansie wyjaśnień tego typu kluczową rolę odgrywa model teoretyczny, choć nie będę utożsamiał modelu teoretycznego z eksplanansem w koncepcji wyjaśniania Hempla-Oppenheima³. Sądzę, że typ wyjaśnień, który zamierzam analizować, podpada – z pewnymi zastrzeżeniami – pod genetyczno-teoretyczny model wyjaśniania, przedstawiony przez Wacława Mejbauma w przywoływanej już książce *Wyjaśnianie i wyjaśnienie*. Co więcej, zawarta w niej krytyka nomologiczno-dedukcyjnego modelu wyjaśniania Hempla-Oppenheima zwraca uwagę na takie własności tego modelu, które sprawiają, że większości przykładów eksplanacji wziętych z praktyki badawczej chemii – nawet „na upartego” – nie można zrekonstruować zgodnie z propozycją tych autorów. Dlatego rozpocznę od skrótowego przedstawienia podstawowych argumentów wymierzonych w nomologiczno-dedukcyjny model wyjaśniania Hempla-Oppenheima.

2. Co sprawia, że model wyjaśniania Hempla-Oppenheima jest wadliwy?

Na postawione w tytule tego paragrafu pytanie odpowiedź wydaje się być bardzo prosta. Większość wyjaśnień podawanych w praktyce badawczej nauk przyrodniczych, a szerzej – empirycznych, nie podpada, nawet po uprzednim ich zrekonstruowaniu, pod zaproponowany przez Hempla i Oppenheima model wyjaśniania nomologiczno-dedukcyjnego względnie pod model wyjaśniania probabilistycznego⁴.

³ Taką koncepcję modelu teoretycznego rozwija T. Grabińska w książce *Teoria, model, rzeczywistość* [1993].

⁴ Śledząc literaturę przedmiotu, można dojść do przekonania, że zasadniczo tylko w zmatematyzowanych naukach empirycznych, a przede wszystkim w fizyce teoretycznej, można

Już od prawie pięćdziesięciu lat liczni autorzy wskazują na to, że poszczególne warunki nakładane przez twórców tej koncepcji wyjaśniania na jego eksplanans są zbyt mocne, gdyż nie znajdują uzasadnienia w praktyce eksplanacyjnej nauk empirycznych. Dokonana przez Mejbauma krytyczna analiza modelu wyjaśniania Hempla-Oppenheima (dalej – modelu H-O) tylko w pewnym stopniu posiada nowatorski charakter. Sądzę jednak, iż podane przez niego argumenty zasługują na skrótowe przedstawienie co najmniej z dwóch powodów. Niektóre z omówionych przez Mejbauma wad modelu H-O są odpowiedzialne za to, że – jak już wspominałem – bardzo rzadko może być on stosowany do rekonstrukcji praktyki eksplanacyjnej chemii, a przede wszystkim nie może być użyty do rekonstrukcji wyjaśniania przebiegu reakcji chemicznych. Ważnym argumentem jest również to, że wskazane przez niego „słabości” modelu H-O stanowiły odniesienie dla konstrukcji jego własnej koncepcji wyjaśniania, tzw. wyjaśniania genetyczno-teoretycznego⁵. Centralną rolę odgrywają w tej koncepcji próby ustalenia sekwencji przyczynowo-skutkowych, prowadzących do zjawiska wyjaśnianego, co na poziomie opisu eksplanacyjnego sprowadza się do podania odpowiedniej sekwencji dedukcyjnej.

Nie sposób nie zgodzić się z Mejbaumem, że podany przez Hempla słynny przykład wyjaśnienia przez Semmelweisa gorączki połogowej nie spełnia – wbrew przekonaniu autora *Filozofii nauk przyrodniczych* – modelu H-O [Mejbaum, 1995, s. 125-131]. Zdania składające się na eksplanans użyty w tym wyjaśnieniu nie były nie tylko zdaniem prawdziwymi, ale nawet dobrze potwierdzonymi. Należy więc przyjąć, że były hipotezami *ad hoc*. Eksplanans nie zawierał również żadnego zdania, które można by uznać za prawo ściśle ogólne. Tym samym nie mógł zostać spełniony warunek, zgodnie z którym w wyjaśnianiu nomologiczno-dedukcyjnym, w ujęciu Hempla i Oppenheima, eksplanandum powinno wynikać logicznie z eksplanansu, zawierającego co najmniej jedno prawo ściśle ogólne.

próbować rekonstruować praktykę eksplanacyjną w sposób, który spełnia przynajmniej podstawowe wymogi modelu Hempla-Oppenheima związane z nomologicznością i dedukcyjnością wyjaśniania. Jednakże i w tych wypadkach proponuje się odpowiednie modyfikacje i uzupełnienia tego modelu. Zobacz np. pracę Grabińskiej [1993], w której rozwijana jest koncepcja wyjaśniania teoretycznego, respektująca podstawowe założenia modelu H-O, a także koncepcja wyjaśniania za pomocą *causal story*, w której schemat H-O odgrywa niewielką rolę. W dalszych rozważaniach pomijam schemat wyjaśniania probabilistycznego Hempla, gdyż – zdaniem autora *Wyjaśniania i wyjaśnienia* – nie znajduje on „rzeczywistych zastosowań ani w procedurach eksplanacyjnych, ani prognostycznych” [Mejbaum, 1995, s. 132].

⁵ Zdaniem Mejbauma wyróżnić należy trzy rodzaje wyjaśniania: wyjaśnianie genetyczne, wyjaśnianie genetyczno-teoretyczne i wyjaśnianie teoretyczne. W interesującym nas kontekście uwzględnić wystarczy jedynie wyjaśnianie genetyczno-teoretyczne, gdyż wyjaśnianie genetyczne zakłada w „tle” jedynie „wiedzę powszechną” (w rozumieniu autora), a wyjaśnianie, które jest zazwyczaj określane mianem teoretycznego, nie należy do zakresu teorii eksplanacji w przyjętym przez niego znaczeniu tego terminu. Zobacz [Mejbaum, 1995, s. 220-221].

Jeśli jednak założyć, że w eksplanansie byłoby prawo spełniające ten warunek, to przebadania wymagałby operator konsekwencji logicznej decydujący o dedukcyjności związku między eksplanansem a eksplanandum.

Zdaniem Mejbauma również niefortunna, bo zasadniczo niezgodna z danymi ustalonymi przez historyków nauki, była rekonstrukcja wyjaśnienia zależności długości słupka rtęci w barometrze od wysokości, na której dokonuje się pomiaru. Eksperyment Périera nie miał na celu wyjaśnienia wcześniej ustalonego faktu, lecz stanowił próbę weryfikacji teorii, pod którą on podpadał [Mejbaum, 1995, s. 127-128]. Zaproponowane wyjaśnienie jest więc już konstrukcją samego Hempela, a nie rekonstrukcją pewnego historycznego przykładu wyjaśniania. Zauważmy jednakże, iż lektura odpowiednich fragmentów tekstu *Filozofii nauk przyrodniczych* nie uprawnia do wyciągnięcia wniosku, że Hempel nie był świadomy powyższych faktów. Należy raczej zwrócić uwagę na to, że prawa użyte w eksplanansie tego wyjaśniania są prawami o niskim poziomie ogólności (w terminologii N. Cartwright są tzw. prawami fenomenologicznymi) i nie spełniają wszystkich warunków ścisłej ogólności, choć dedukcyjność wnioskowania prowadzącego od eksplanansu do eksplanandum nie ulega wątpliwości.

Rozważania nad podanymi przez Hempela rekonstrukcjami przykładów wyjaśniania kończy konstatacja autora, że model H-O „jest konstrukcją czysto spekulatywną, narzucającą naukowcom normy postępowania, do których ani się oni nie stosowali, ani nie zamierzali stosować” [Mejbaum, 1995, s. 127]. Oczywiście z faktu, że Hempel niepoprawnie zrekonstruował wyjaśnienie Semmelweisa, jak i z dyskusyjności wyjaśnienia zależności długości słupka rtęci w barometrze od wysokości, na której dokonuje się pomiaru, nie wynika, że model H-O nie może trafnie oddawać przynajmniej niektórych właściwości wyjaśniania teoretycznego na przykład w fizyce. Rozstrzygnięcie tej kwestii nie jest jednak przedmiotem rozważań zawartych w tym artykule. Istotne jest natomiast to, że – wskazane przez autora książki *Wyjaśnianie i wyjaśnienie* – zasadnicze odstępstwa przykładów wyjaśniania, analizowanych przez Hempela, od modelu H-O w pełni odnoszą się do większości wyjaśnień, stosowanych w praktyce badawczej chemii. Można do niej również odnieść, wypływające z tej krytyki, „pozytywne” propozycje Mejbauma, owocujące koncepcją wyjaśniania genetyczno-teoretycznego.

3. Wyjaśnianie genetyczno-teoretyczne jako podstawowy rodzaj wyjaśniania w naukach przyrodniczych

W opozycji do modelu H-O Mejbaum rozwija koncepcję wyjaśniania, którą wprowadza od Epikura i charakteryzuje za pomocą następujących postulatów: „(i) dla każdego zjawiska można wskazać wiele alternatywnych wyjaśnień; (ii) każde dopuszczalne wyjaśnienie winno unikać ‘konfliktu ze zjawiskami’; (iii) różne

alternatywne wyjaśnienia uzupełniają się nawzajem przy założeniu, że to samo zjawisko może być wywoływane przez różnorodne ‘przyczyny’; (iv) upieranie się przy jednym wyjaśnieniu – w wypadku, gdy możliwe jest ich wiele – jest przejawem nieskromności poznawczej, ‘pragnieniem poznania tego, co jest niemożliwe do poznania’ [Mejbaum, 1995, s. 124]. Z punktu widzenia możliwości zastosowania tej koncepcji do wyjaśniania przebiegu procesów chemicznych najważniejsze jest stwierdzenie, że wyjaśnianie oparte na tych założeniach zmierza i zmierzać powinno „do odkrycia warunków, w których badane zjawisko może (choć nie musi) zaistnieć, stąd też wszelkie wyjaśnienie jest hipotetyczne” [Mejbaum, 1995, s. 124]. Wyjaśnianie jest więc rozpoznawane jako rozumowanie odkrywcze, redukcyjne i regresywne⁶, które zmierza do odkrycia regularności pod postacią hipotezy typu (α): „**jeżeli $S(x)$, to $R(x)$ wtw $W(x)$** ”, gdzie $S(x)$ podaje przyczynę, która sprawia, że przy wystąpieniu warunków $W(x)$ zajdzie skutek $R(x)$ ⁷. Ważną rolę odgrywają warunki **W**, bez spełnienia których podana hipoteza nie jest falsyfikowalna. Dookreślanie warunków **W** jest jednym z podstawowych czynników determinujących proces wyjaśniania w praktyce badawczej nauk empirycznych, gdyż ich wystąpienie umożliwia zajście określonych związków przyczynowo-skutkowych.

Dla Mejbauma „Wszelkie wyjaśnianie genetyczno-teoretyczne ma charakter kauzalny, w tym sensie, że wyjaśnianie takie zakłada istnienie powiązań kauzalnych w strukturze bazowej względem poziomu rzeczywistości, na którym usytuowane są fakty stwierdzone w eksplanandum” [Mejbaum, 1995, s. 170]. Wyjaśnianie genetyczno-teoretyczne, w przeciwieństwie do wyjaśniania genetycznego, które odwołuje się tylko do zdarzeń, zawiera opisy zdarzeń i prawa teoretyczne [Mejbaum, 1995, s. 171]. Teoretyczny aspekt wyjaśniania genetyczno-teoretycznego zawiera się przede wszystkim w pojęciu tła teoretycznego, na gruncie którego dokonuje się eksplanacji. Pojęcie tła teoretycznego, choć wprowadzone przez Mejbauma na podstawie wyników analizy przykładów wyjaśniania wziętych z fizyki, w jeszcze większym stopniu oddaje, w moim przekonaniu, naturę wyjaśniania genetyczno-teoretycznego w chemii. Będzie to przedmiotem rozważań w dalszych paragrafach tego artykułu. Tło teoretyczne rzadko można utożsamiać z jedną konkretną teorią naukową, tym bardziej że pod to miano – zdaniem Mejbauma – podpadają tylko „wielkie” teorie z nauk przyrodniczych i społecznych, w intuicyjnym sensie tego określenia” [Mejbaum, 1995, s. 183]. Tło teoretyczne wyjaśniania mogą stanowić zarówno teorie zakładane w celu opracowania danych obserwacyjnych, jak i teorie wykorzystywane do konstrukcji modelu wyjaśnianego zjawiska oraz teorie, na bazie których

⁶ Mejbaum nawiązuje w tym zakresie do podziału wnioskowań zaproponowanego przez T. Czeżowskiego, który za „rozumowanie regresywne” uważał takie rozumowanie, „w którym punktem wyjścia jest następstwo, celem racja” [Mejbaum, 1995, s. 134].

⁷ Zobacz [Mejbaum, 1995, s. 130]. W zapisie hipotezy (α) warunki, po spełnieniu których zachodzi zależność o postaci okresu warunkowego „jeżeli $S(x)$, to $R(x)$ ”, oznaczyłem za pomocą litery „W”. Literę „C” zachowuję dla oznaczenia atomów węgla.

formułuje się warunki umożliwiające zajście wyjaśnianego zjawiska. Niektóre elementy tła teoretycznego wchodzi *explicite* do eksplanansu, a niektóre tylko pośrednio, np. decydują o podjęciu określonych wyborów związanych z aparatem pojęciowym, w którym dokonujemy konceptualizacji wyjaśnianego zjawiska. Nie musimy natomiast zakładać, jak to czynił Hempel, że teorie wchodzące w skład tła są prawdziwe. Wystarczy założyć, że mogą być prawdziwe [Mejbaum, 1995, s. 220]. Tło teoretyczne, łącznie z przyjęciem określonych rozstrzygnięć ontologicznych, stanowi tło epistemiczne, którego presumpcja rozpoczyna wszelkie postępowanie eksplanacyjne. Skoro jednak „ludzie mogą się różnić swoimi presumpcjami ontologicznymi i teoretycznymi, to należy oczekiwać, że będą też się różnić co do proponowanych eksplanacji tych samych zjawisk” [Mejbaum, 1995, s. 188].

Szczególną rolę w koncepcji Mejbauma odgrywa tzw. opis eksplanacyjny, którego struktura jest drzewem zbudowanym z opisów partykularnych, dotyczących zdarzeń lub zjawisk⁸. Ostatnim elementem opisu jest eksplanandum. Definiuje się następnie relację częściowego wyjaśniania, która zachodzi, gdy z koniunkcji wszystkich opisów występujących na poziomie wyższym wynika entymematycznie, ze względu na presuponowane tło, opis z poziomu niższego. Koniunkcja wszystkich eksplanansów częściowych wyjaśnień będzie stanowiła pełną eksplanację wyjaśnianego stanu rzeczy. Szczegółowe przedstawienie opisu eksplanacyjnego, składającego się na genetyczno-teoretyczny model wyjaśniania, nie jest możliwe, gdyż wymagałoby wprowadzenia licznych pojęć z zakresu, zaproponowanej przez Mejbauma, rekonstrukcji wiedzy powszechnej i wiedzy naukowej. Odsyłam więc do tekstu książki *Wyjaśnianie i wyjaśnienie*, nadmieniając, że sam autor – w konstrukcji genetyczno-teoretycznego modelu wyjaśniania – nie wykorzystuje tych pojęć w sposób konsekwentny.

Należy również odnotować, że Mejbaum nie odnosi swojej koncepcji wyjaśniania genetyczno-teoretycznego do innych współczesnych ujęć wyjaśniania, a przede wszystkim wyjaśniania przyczynowego takich autorów, jak W. Salmon, B. C. van Fraassen czy N. Cartwright. Jednakże określenie, w jakiej relacji pomysły Mejbauma dotyczące wyjaśniania pozostają do pomysłów tych i wielu innych autorów, nie jest przedsięwzięciem poznawczo zajmującym. Interesujące jest natomiast ustalenie przydatności poszczególnych koncepcji wyjaśniania do rekonstrukcji postępowania eksplanacyjnego, zmierzającego do wyjaśnienia przemian przeprowadzanych w chemii organicznej. Zagadnienie to było przedmiotem licznych prac Ewy Zielonackiej-Lis⁹. Dlatego rozważania zawarte w tym artykule

⁸ Zobacz [Mejbaum, 1995, s. 217-222].

⁹ Zobacz np. Zielonacka-Lis [1981, 1994, 1996, 1999]. Spis prac tej autorki poświęcony wyjaśnianiu w chemii oraz zagadnieniom pokrewnym, które ukazały się do 1999 roku, można znaleźć w: [Sobczyńska, Zeidler, 1999, s. 211-212]. Jednakże nie ma wśród nich analiz poświęconych zastosowaniu koncepcji wyjaśniania przyczynowego N. Cartwright i I. Hackinga. O wyjaśnianiu w chemii zobacz również w: [Sobczyńska, 1984, s. 45-69].

można uważać za dopełnienie analiz tej autorki w tym sensie, że poszerzają ich zakres o kolejną koncepcję wyjaśniania naukowego.

4. O specyfice wyjaśniania naukowego w chemii

Jedna z bardziej rozpowszechnionych definicji chemii podaje, że jest to nauka, która bada strukturę i skład materii oraz jej przemiany¹⁰. W rozważaniach nad przedmiotem chemii jedni uczeni kładą nacisk na badanie struktury i składu materii, inni – i ci są chyba w większości – na badanie przemian, mając zapewne na uwadze fakt, że głównym praktycznym celem chemii jest uzyskanie nowych związków chemicznych o określonych właściwościach¹¹. Praktyka eksperymentalna chemii wiąże się ściśle z obiema dziedzinami, choć badania składu i struktury substancji chemicznych następują na ogół po przeprowadzeniu ich analizy bądź syntezy. To właśnie wyjaśnianie przebiegu przemian chemicznych sprawia samym chemikom, jak i metodologom próbującym ustalić zasady, na których powinno się ono opierać, szczególne trudności.

W praktyce laboratoryjnej chemii znajomość metod i technik eksperymentalnych jest ściśle powiązana z wiedzą teoretyczną. Bez któregośkolwiek z tych składników właściwie nie mogłaby mieć ona miejsca. Wiedza z obu zakresów jest nie tylko niezbędna do zaplanowania odpowiedniej sekwencji eksperymentów, które mają doprowadzić do uzyskania określonych produktów, lecz umożliwia również wyjaśnienie przebiegu przeprowadzonej syntezy. Dlatego scharakteryzujemy niektóre elementy tej działalności na przykładzie praktyki eksperymentalnej chemika organika, dążącego do syntezy związku chemicznego, który – zgodnie z jego zamierzeniem – powinien posiadać określone właściwości chemiczne, a w konsekwencji również fizyczne i biologiczne, np. określoną aktywność przeciwwirusową. Powyższa analiza pozwoli uzasadnić wyrażone już wcześniej przekonanie, że krytyka modelu H-O przeprowadzona przez Mejbauma odnosi się również do prób wyjaśnień przebiegu przemian chemicznych w ramach tego modelu.

Gdy chemik organik planuje syntezę jakiegoś związku chemicznego o przewidywanych właściwościach, musi odwołać się do literatury przedmiotu i sprawdzić, jakiego typu struktury chemiczne wykazywały podobne właściwości i w jaki sposób były one uzyskiwane. Wykorzystuje w tym celu, obok ogólnej wiedzy o charakterze teoretycznym, specyficzne cechy klasyfikacji związków chemicznych oraz samych przemian chemicznych. Dzięki temu może: ustalić, jakich substratów

¹⁰ W tym paragrafie wykorzystuję ustalenia, które poczyniłem w pracy *O teoretyczności chemii – studium metodologiczne* [Zeidler, 1999(a), s. 57-63], zawartej również w niniejszej książce.

¹¹ Niektóre spotykane w literaturze przedmiotu definicje chemii podają J.van Brakel i H. Vermeeren [1981, s. 1416-1418].

należy użyć; przewidzieć strukturę produktów; określić – przynajmniej w przybliżeniu – podstawowe warunki planowanej syntezy; opisać reakcję pod względem kinetycznym i ilościowym. Odpowiednia wiedza, o charakterze faktualnym i teoretycznym, umożliwia więc chemikowi zaplanowanie syntezy związku docelowego, a następnie – po jej eksperymentalnym zrealizowaniu – umożliwia zidentyfikowanie uzyskanych produktów i wyjaśnienie „faktycznego” przebiegu reakcji – czyli podanie jej mechanizmu. Wyjaśnienie przebiegu reakcji chemicznej jest istotne szczególnie wtedy, gdy odbiega on od przewidywanego.

Zmierzając do ustalenia, jaki jest charakter wiedzy teoretycznej (tła teoretycznego) niezbędnej do realizacji powyższych zadań, wystarczy sięgnąć po jakiś, odpowiednio obszerny, podręcznik chemii organicznej, np. *Chemię organiczną. Reakcje, mechanizmy, budowa* J. Marcha [1975] lub *Mechanizmy reakcji organicznych* P. Tomasika [1998]. W podręczniku Marcha wiedza ta jest wyłożona w pierwszej jego części i obejmuje: podstawowe informacje o wiązaniach chemicznych, sformułowane zarówno na gruncie elektronowej teorii wiązań, jak i molekularnej mechaniki kwantowej, podstawowe wiadomości z zakresu stereochemii, instrumentalne metody określania budowy cząsteczek organicznych, podstawowe typy mechanizmów reakcji i metody ich ustalania, podstawowe wiadomości o kwasach i zasadach Brönsteda oraz Lewisa, wpływ budowy cząsteczek na reaktywność i podstawowe wiadomości o cząsteczkach organicznych, w których wartośćowość atomu węgla wynosi tylko dwa lub trzy. Zdaniem tego autora jest ona niezbędna po to, aby analizować szczegółowo różnorodne mechanizmy reakcji chemicznych, którym jest poświęcona druga część książki [March, 1975, s. 1-216].

Należy zauważyć, że wiedza ta nie stanowi żadnej spójnej teorii reaktywności chemicznej. Jest to raczej zestaw pojęć, reguł i podstawowych informacji, z których pewne są – w odpowiedni sposób uproszczonymi – bardziej ogólnymi teoriami chemicznymi (np. koncepcje wiązań chemicznych, teorie kwasów i zasad), inne są uogólnieniami empirycznymi (np. zasady określające wpływ budowy cząsteczek na reaktywność) albo stanowią opis metod eksperymentalnych (np. instrumentalne metody określania budowy cząsteczek). Wszystkie one mają być pomocne w planowaniu i wykonywaniu eksperymentu oraz wyjaśnianiu jego rezultatów, a szereg z nich można zapisać jako odpowiednie reguły sterujące praktyką eksperymentalną (np. reguła wiązania reagującego, reguła solwatacji itp.). Reguły te nie posiadają jednak charakteru praw ściśle ogólnych, a co najwyżej podpadają pod formułę typu α scharakteryzowaną w poprzednim paragrafie. Są one niezbędne do budowania opisów eksplanacyjnych w sensie Mejsbauma, a więc należą do tła teoretycznego, choć wszystkie one są formułowane na bazie bardziej podstawowych koncepcji teoretycznych.

Metodologowi zajmującemu się naukami przyrodniczymi jeszcze bardziej „zaskakujący” musi się wydać pierwszy rozdział podręcznika P. Tomasika zatytułowany „Ogólne teorie chemii organicznej”. Zawiera on przede wszystkim omówienie

podstawowych czynników wpływających na reaktywność chemiczną i to zarówno w ujęciu jakościowym, jak i ilościowym, wraz z tabelami podającymi konkretne wartości liczbowe, np. długości wiązań C–C i C–H w węglowodorach, stałe Hammetta czy wybrane stałe Tafta. W rozdziale tym można również znaleźć, ważne z eksperymentalnego punktu widzenia, klasyfikacje, np. twardych i miękkich kwasów i zasad według Pearsona itp. [Tomasik, 1998, s. 13-76].

Wprowadzenia teoretyczne obu podręczników nie zawierają więc teorii rozumianych jako zbiór dobrze potwierdzonych praw, lecz dostarczają eksperymentatorowi aparatu pojęciowego potrzebnego do artykulacji problemu badawczego, umożliwiają „konceptualną” kontrolę przeprowadzanego eksperymentu i wyjaśnienie jego przebiegu, a także wprowadzają podstawowy aparat matematyczny potrzebny do kalkulacji. Pełnią one jeszcze inną ważną rolę. Uczą semiotyki chemicznej, tzn. umiejętności czytania wzorów strukturalnych, kojarzenia struktur określonych cząsteczek z ich właściwościami makroskopowymi oraz ogólnych zasad pisania mechanizmów reakcji, które stanowią podstawowy przedmiot obydwu książek. Chemicy posługują się dwoma językami: symbolicznym i obrazkowym (ikonicznym). W pisaniu mechanizmów reakcji chemicznych niezwykle ważną rolę odgrywa język obrazkowy. Mechanizmy z semiotycznego punktu widzenia mogą być potraktowane jako możliwe sposoby przekształcania elementów języka obrazkowego (wzorów strukturalnych). Na ogół przyjmuje się, że interpretacja semantyczna języka obrazkowego jest inna niż języka symbolicznego, która może być opisana regułami dobrze znanymi z semantyki logicznej. Wzory strukturalne – elementy języka obrazkowego odnoszą się wprost do swoich przedmiotów, które należy ujmować jako całości, lecz nigdy nie obrazują ich w sposób wyczerpujący¹². Choć wzory strukturalne odnoszą się do przedmiotów mikroświata – reprezentują cząsteczki o określonej strukturze, to wraz z językiem symbolicznym umożliwiają wyciąganie wniosków dotyczących makroskopowych właściwości związków chemicznych. Język obrazkowy pełni więc istotną rolę we wnioskowaniach chemicznych. Natomiast, „aby sprawdzić trafność przewidywań, należy po prostu przełożyć reguły semiotyczne na reguły laboratoryjne” [Schummer, 1999, s. 196]. Jeśli wzory strukturalne występujące w opisie eksplanacyjnym przemiany chemicznej uznawać za ikony, to wtedy rekonstrukcja logiczna takiego wyjaśnienia napotyka na zasadnicze trudności.

¹²Powyższe, skrótowo przedstawione, ujęcie semiotyki chemicznej zawiera praca E. Groszholz i R. Hoffmanna [2000]. Pewne elementy tego stanowiska można znaleźć w: [Hoffmann, Laszlo, 1994, s. 133-174] oraz [Hoffmann, 1995]. W odmienny sposób niż wymienieni autorzy analizowałem semiotyczny status wzorów strukturalnych w: [Zeidler, 2001, s. 119-140]. Starłem się wykazać, że zastosowanie sztywnej teorii oznaczania do analizy semantycznej wzorów strukturalnych napotyka na poważne trudności. Żeby nie komplikować nadmiernie prowadzonych analiz, rezygnuję w tym artykule z dyskusowania tej złożonej kwestii i przyjmuję obiegową opinię na temat statusu semiotycznego wzorów strukturalnych.

Dyskusyjne staje się wówczas uznanie ciągu tworzącego opis eksplanacyjny za ciąg „w zasadzie” dedukcyjny.

Zawarte we wprowadzeniach obu książek prawa chemiczne nie są – jak już wspomniałem – prawami ściśle ogólnymi, lecz są na ogół prawami fenomenologicznymi niższego poziomu, które są hipotezami empirycznymi o ciągle dookreślonym zakresie stosowalności. Wyjaśnienia bazujące na tak scharakteryzowanej wiedzy chemicznej nie spełniają, w sposób oczywisty, warunków nakładanych na wyjaśnienia w modelu H-O. Mają one raczej charakter *causal story* i – jak postaram się wykazać – podpadają pod genetyczno-teoretyczny model wyjaśniania.

W dwudziestowiecznej praktyce badawczej chemii organicznej opracowano kilkadziesiąt typów mechanizmów reakcji chemicznej. Należą do nich różnego rodzaju mechanizmy reakcji podstawiania, przyłączania, eliminacji, przegrupowania, utleniania i redukcji. Stwierdzenie, że przeprowadzona w laboratorium reakcja chemiczna przebiega według określonego mechanizmu, jest postawieniem hipotezy badawczej. Może ona stanowić podstawowy składnik eksplanansu wyjaśnienia, dlaczego doszło do powstania określonego produktu. Zaproponowany mechanizm jest hipotezą, której zakres stosowalności jest ciągle dookreślany przez codzienną praktykę laboratoryjną. Niewątpliwie – w zgodzie z propozycją Mejsbauma – dookreślenie warunków **W** ma na celu przekształcenie hipotezy o postaci α w prawo, choć proces dookreślenia nie jest nigdy zakończony, co jest czynnikiem uniemożliwiającym podciągnięcie danego mechanizmu pod prawo ściśle ogólne. Warunki **W** mogą ulec zmianie wraz z kolejnym zastosowaniem określonego mechanizmu do wyjaśnienia danego typu przemiany chemicznej. Zagadnienie to poddam dokładniejszej analizie w ostatnim paragrafie artykułu. Klasyfikacja w chemii nie dotyczy zresztą wyłącznie pierwiastków i związków chemicznych, lecz również reakcji chemicznych. Reguły semiotyczne pozwalają wyróżnić wiele typów mechanizmów, które reprezentują całe klasy reakcji. Dzięki tej klasyfikacji można zarówno prognozować zajście określonych przemian chemicznych, jak i próbować wyjaśnić przemiany, które się już dokonały.

W ustaleniu mechanizmu reakcji mogą pomóc odpowiednie kalkulacje, dokonywane na przykład w kontekście badania kinetyki reakcji. Polegają one na znalezieniu równania szybkości reakcji na podstawie wyników uzyskanych z pomiarów, a następnie na ustaleniu rzędu reakcji względem związków biorących w niej udział i wyznaczeniu stałej szybkości reakcji [Schwetlick, 1975, s. 34]. W obu przypadkach chemik musi zastosować złożone metody rachunkowe. Dokonuje również obliczeń dotyczących termodynamiki przeprowadzonej reakcji, na podstawie których może na przykład wnioskować o trwałości uzyskanych produktów. Przy wyznaczaniu dróg reakcji może także wykorzystać metody chemii kwantowej, obliczając na przykład zmiany energii potencjalnej w trakcie reakcji według założonego schematu. „Uzyskane profile zmian energii potencjalnej pozwalają wybrać jako najbardziej prawdopodobną tę ścieżkę reakcji, w której zmiany energii potencjalnej są najmniejsze” [Tomasik, 1998, s. 75].

O tym, jaki mechanizm zostanie zaproponowany w celu wyjaśnienia przebiegu przemiany chemicznej, decyduje bardzo wiele czynników. Autorzy artykułu *Brzytwy Ockhama i chemia* twierdzą, że „mechanizm reakcji jest konstrukcją logiczną opartą z konieczności na ograniczonym zestawie faktów eksperymentalnych, które następnie ludzie interpretują w ramach aktualnych, modnych i efemerycznych modeli teoretycznych” [Hoffmann, Minkin, Carpenter, 1999, s. 24-25]. Sformułowanie to należy rozumieć, jak sądzę, w ten sposób, że proponowany mechanizm konkretnej przemiany jest budowany w oparciu o tło teoretyczne, na które składa się wiedza o typach mechanizmów przemian chemicznych z uwzględnieniem dostępnych danych empirycznych. Natomiast użyty w tym cytacie termin „konstrukcja logiczna” posiada, jak podejrzewam, sens jedynie metaforyczny. W artykule cytowanych autorów najważniejsze jest stwierdzenie, że na wybór właściwego mechanizmu (wyjaśnienia) przebiegu danej reakcji, jeśli istnieje kilka mechanizmów alternatywnych, mogą wpływać przeświadczenia o charakterze metodologicznym, takie jak np. zasada najmniejszej zmiany, będąca wersją brzytwy Ockhama zastosowaną do analizy mechanizmów reakcji¹³. Zauważmy, że – w ich opinii – chemicy zawsze zmierzają do najlepszego wyjaśnienia, co pozostawałoby w opozycji do jednego z podstawowych założeń „epikurejskiej” koncepcji wyjaśniania Mejbaua.

Niewątpliwie eksplanacyjna i przewidywająca rola postulowanych mechanizmów reakcji chemicznych nie podlega dyskusji. Natomiast przypisanie mechanizmom także funkcji opisowej – co się na ogół czyni – przesądza o ich realistycznym ujęciu. Zauważyć należy, że doświadczalne badanie mechanizmów reakcji pozwala, co najwyżej, określić zakres ich stosowalności. Lecz czy z faktu adekwatności empirycznej danego mechanizmu chemik wyciągnie wniosek, że reprezentuje on rzeczywisty przebieg reakcji chemicznej, to już zależy od jego odwagi poznawczej albo od stopnia sceptycyzmu. Jednakże kwestia statusu poznawczego mechanizmów jest zagadnieniem bardzo złożonym i wymaga odrębnej dyskusji¹⁴. Wiąże się ona ściśle z problemem statusu poznawczego wzorów strukturalnych stosowanych w mechanizmach reakcji chemicznych. Zauważmy, że choć wzory strukturalne występują w opisie zależności przyczynowo-skutkowych, to wcale nie muszą być interpretowane realistycznie¹⁵. Dlatego przyjmowane przez Mejbaua założenie, że w badaniu przyczynowości trzeba założyć nie tylko istnienie obiektów materialnych, ale także ich stanów, wydaje się zbyt mocne [Mejbaum, 1995, s. 143-146].

Każdy, kto śledzi praktykę badawczą chemii, zauważy, iż znaczącą rolę odgrywają w niej wyjaśnienia przyczynowe. Nawet gdy w drugiej połowie XIX wieku

¹³Zagadnienie to jest przedmiotem rozważań R. Hoffmanna, V. I. Minkina i B. K. Carpentera [1999, s. 13-44].

¹⁴Zagadnienie statusu poznawczego mechanizmów reakcji chemicznych w chemii organicznej było przedmiotem rozważań E. Zielonackiej-Lis [1994, s. 483-498].

¹⁵Zobacz na ten temat [Zeidler, 2000(b), s. 17-34].

próbowano formułować mechanistyczne wyjaśnienia reaktywności niektórych związków chemicznych, nie były to eksplanacje, które podpadałyby pod schemat wyjaśniania H-O. Analizy wykazują, że mechanicyzm w chemii był raczej typem redukcji pojęciowej, w której dążyło się do definiowania pojęć z zakresu chemii za pomocą pojęć znanych z mechaniki. Badacze tego zagadnienia wykazują, że tak pojęty mechanicyzm miał w chemii zakres bardzo ograniczony¹⁶. Z metodologicznego punktu widzenia istotny jest fakt, że eksplikacja pewnych koncepcji chemii w aparacie pojęciowym mechaniki klasycznej nadawała tym koncepcjom charakter teoretyczny i umożliwiała przyczynowe wyjaśnianie zjawisk.

W metodologii i filozofii nauk empirycznych – jak już stwierdziliśmy – istnieje wiele koncepcji wyjaśniania przyczynowego. Zanim przejdziemy do zastosowania w chemii genetyczno-teoretycznego modelu wyjaśniania Mejbauma, spróbujmy – w największym zarysie – odnieść do eksperymentalnej praktyki badawczej chemii koncepcję wyjaśniania przyczynowego Cartwright [1983], która współgra z koncepcją przedmiotów teoretycznych Hackinga [1983]. Równocześnie, pod pewnymi względami, pozostaje ona w opozycji do propozycji Mejbauma.

Jak wiadomo, zdaniem Hackinga przedmioty teoretyka mogą stać się przedmiotami eksperymentatora, jeśli – odwołując się do ich przyczynowych właściwości – będziemy mogli za ich pomocą interweniować w świat, wywołując nowe zjawiska. Cartwright przeciwstawia wyjaśnianie przyczynowe wyjaśnianiu teoretycznemu. W przypadku wyjaśniania przyczynowego dąży się do ustalenia właściwej przyczyny lub właściwych przyczyn danego zjawiska. Wyjaśnienia przyczynowe w nauce ze sobą konkurują – „właściwe” (prawdziwe?) jest tylko jedno. Można wykazać które, przeprowadzając odpowiednie badania eksperymentalne. Cartwright przyjmuje słabsze kryterium istnienia przedmiotów teoretycznych niż Hacking. Wystarczy, jej zdaniem, wykazać, odwołując się do przyczynowych właściwości przedmiotów teoretycznych, że są one odpowiedzialne za zajście danego zjawiska. Wchodzące w grę związki przyczynowo-skutkowe są wyrażane w prawach fenomenologicznych – w terminologii Cartwright – i są prawami „niskiego” poziomu, choć ich sformułowanie wymaga posłużenia się językiem teoretycznym. Aby jednak przekonanie, że ustalona przyczyna jest właściwa, było dobrze uzasadnione, należy przeprowadzić eksperymenty w kontrolowanych warunkach. Świetnym przykładem takich eksperymentów w chemii są reakcje stereospecyficzne, np. reakcje Dielsa-Aldera. Uzyskanie w wyniku takich reakcji produktów o określonej strukturze stanowi w wielu wypadkach rozstrzygający argument na rzecz tezy, że w reakcji, której mechanizm się ustala, powstaje jako produkt pośredni związek o strukturze, która jest przyczynowo odpowiedzialna za powstawanie produktów końcowych. Wyjaśnianie przyczynowe odgrywa szczególnie ważną rolę wtedy, gdy reakcja nie doprowadziła do przewidywanych produktów. Chemik

¹⁶ Zobacz na ten temat [Synowiecki, 1974, s. 91-143].

poszukuje wówczas przyczyn mogących spowodować zmianę mechanizmu reakcji. Odpowiednio manipulując warunkami reakcji, jest w stanie, choć nie zawsze, znaleźć te przyczyny i zaproponować zupełnie nowy bądź zmodyfikowany mechanizm wyjaśnianej reakcji. Z interesującego nas punktu widzenia istotne jest przekonanie Cartwright, że wyjaśnianie przyczynowe, w przeciwieństwie do wyjaśniania teoretycznego, powinno być interpretowane realistycznie, a alternatywność proponowanych opisów eksplanacyjnych posiada jedynie czasowy charakter.

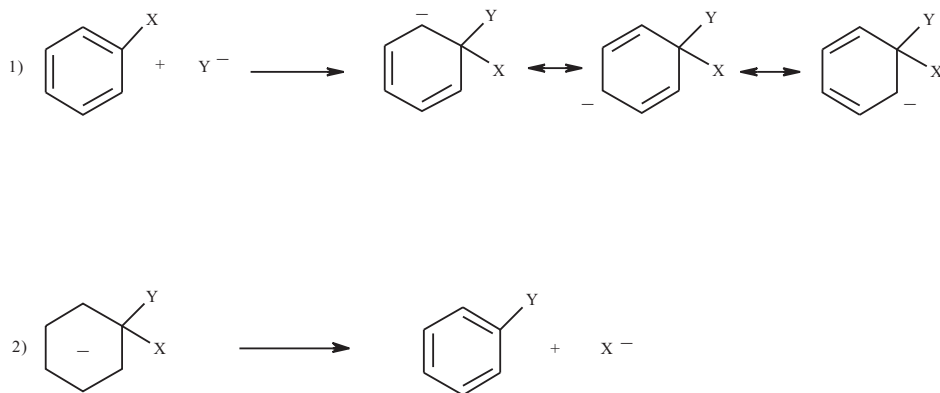
Na zakończenie powyższych rozważań, wskazujących na specyfikę wyjaśniania w praktyce badawczej chemii, zwróćmy jeszcze uwagę na charakter budowanych w niej modeli kauzalnych. Chemicy zakładają, że przebieg reakcji chemicznych jest wyznaczony przez zależności o charakterze kauzalnym. Zgodnie z propozycją Mejbauuma dotyczącą modeli kauzalnych [Mejbaum, 1995, s. 146-150] każda reakcja może być przedstawiona za pomocą schematu podmiotowo-przedmiotowego. Podmiot sterujący (niekoniecznie człowiek) „wymusza” przebieg reakcji chemicznej. Jednakże powyższy model nie jest – jak zakładał Mejbbaum – matematyczną „formą” opisu układu materialnego. Reprezentację matematyczną może posiadać jedynie kinetyka rozpatrywanej reakcji chemicznej. Związki przyczynowe istotne dla rozpatrywanego układu reakcyjnego oddaje sam mechanizm reakcji chemicznej wraz z podanymi warunkami jej przebiegu. Założenie przyjęte przez Mejbbaum, iż „klasyfikacja modeli kauzalnych pokrywa się z klasyfikacją równań różniczkowych”, nie wytrzymuje krytyki [Mejbaum, 1995, s. 147]. Nie jest natomiast wykluczony opis przebiegu syntezy chemicznej wykorzystujący teorię grafów. Pozwala on wyznaczyć możliwe drogi przejścia od stanu początkowego (substratów) do stanu końcowego (produktów) danej syntezy chemicznej.

5. Rekonstrukcja wyjaśniania przebiegu reakcji chlorobenzenu z amidkiem potasu

Dla filozofa nauk empirycznych, prowadzącego badania nad wyjaśnianiem typu *case studies*, interesujący jest zarówno sam proces wyjaśniania danego zjawiska, jak i przyjmowane aktualnie jego wyjaśnienie(-nia). Wyjaśnianie to „procedura badawcza złożona z różnego rodzaju czynności eksperymentalnych i schematów dedukcyjnych” [Mejbaum, 1995, s. 169]. Wyjaśnienie to końcowy efekt stosowania tej procedury. Przedstawię wyjaśnianie przebiegu reakcji chlorobenzenu z amidkiem potasu zwięzłone, powszechnie obecnie akceptowanym, jej wyjaśnieniem, które zrekonstruuje w duchu genetyczno-teoretycznej koncepcji wyjaśniania¹⁷.

¹⁷Użyłem wyrażenia „w duchu” genetyczno-teoretycznej koncepcji wyjaśniania, gdyż Mejbbaum nie podał jej szczegółowej charakterystyki, lecz skoncentrował się na rekonstrukcji konkretnych przykładów wyjaśniania.

Analizowana reakcja jest zaliczana do reakcji typu podstawienia nukleofilowego, w których „odczynnik nukleofilowy (nukleofil) dostarcza pary elektronów cząsteczce substratu, a grupa odszczepiająca się odchodzi wraz z parą elektronową”¹⁸. Reakcja chlorobenzenu z amidkiem potasu prowadząca do powstania aniliny jest reakcją aromatycznego podstawienia nukleofilowego, której przebieg wyjaśnia się zazwyczaj albo za pomocą mechanizmu polegającego na tworzeniu się **kompleksu przejściowego**, albo według klasycznego mechanizmu reakcji substytucji oznaczanego symbolem S_N1 ¹⁹. W pierwszym przypadku atakująca grupa nukleofilowa (jest to grupa o charakterze zasadowym) tworzy z substratem wiązanie, co prowadzi do powstania związku przejściowego, od którego odrywa się następnie grupa odchodząca. Według tego mechanizmu przebiega większość reakcji aromatycznego podstawienia nukleofilowego.



Rys. 1

Mechanizm tej reakcji jest więc dwuetapowy. Pierwszy etap, w którym zazwyczaj reakcja przebiega wolno, polega na powstaniu związku przejściowego. Atakująca grupa nukleofilowa Y^- tworzy z substratem kompleks przejściowy, charakteryzujący się obecnością wiązania $X-C-Y$. W wyniku rozerwania się wiązania $C-X$ grupa X^- odszczepia się (etap zachodzący szybko) i powstaje produkt reakcji.

Według mechanizmu S_N1 (podstawienie nukleofilowe jednocząsteczkowe) reakcja przebiega również w dwóch etapach. „Pierwszy etap jest powolną jonizacją substratu, określającą szybkość reakcji. Drugi etap jest szybką reakcją pomiędzy

¹⁸Zobacz [March, 1975, s. 222]. Książka Marcha dostarcza również materiału, który stanowi podstawę rekonstrukcji rozważanej reakcji [s. 431-437].

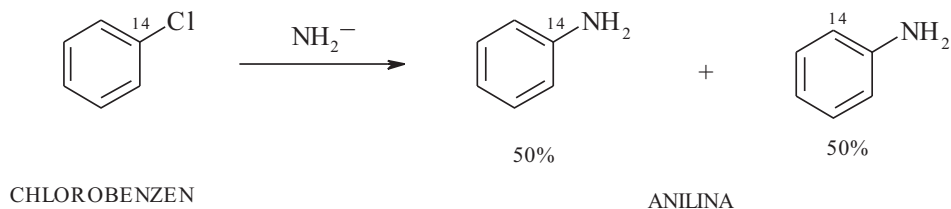
¹⁹Przykład ten analizowałem razem z D. Sobczyńską w kontekście rozważań nad manipulacyjnym kryterium istnienia Hackinga. Zobacz [Zeidler, Sobczyńska, 1995/1996, s. 531-533].

przejściowym karbokationem a odczynnikiem nukleofilowym. Obecność rozpuszczalnika ułatwia jonizację” [March, 1975, s. 225]. Jednakże przeprowadzone badania eksperymentalne wykazały, że halogenki aryłowe (a do nich zalicza się chlorobenzen) nie ulegają reakcjom przebiegającym według mechanizmu typu S_N1 . Można więc pominąć ten mechanizm w dalszych rozważaniach.

Mechanizmowi polegającemu na tworzeniu się kompleksu przejściowego można nadać postać formuły (α): *jeżeli cząsteczka naładowana obojętnie lub naładowana ujemnie (odczynniki nukleofilowy Y) zaatakują obojętną lub obdarzoną ładunkiem dodatnim cząsteczkę RX (substrat), to dojdzie do utworzenia wiązania C–Y i powstanie związek przejściowy posiadający układ X–C–Y, od którego oderwie się grupa X wtedy i tylko wtedy, gdy będą spełnione określone warunki W*. Warunki W nie mogą być jednak – jak już stwierdziliśmy – określone w sposób ogólny dla wszystkich reakcji, zachodzących zgodnie z tym mechanizmem. Dla poszczególnych klas zastosowań tego mechanizmu warunki te mogą ulegać zmianie. Ich dookreślenie następuje w trakcie empirycznego testowania prób wyjaśniania za jego pomocą konkretnych przemian chemicznych. Formuła α „rości sobie pretensję” do tego, by być prawem ściśle ogólnym, lecz ze względu na warunki W nigdy nie osiągnie takiego statusu. Jest prawem niskiego poziomu ogólności. Można więc powiedzieć, że wyjaśnienie przebiegu danej przemiany polega na znalezieniu takiego mechanizmu, pod który dana reakcja będzie podpadać, względnie wymyśleniu nowego mechanizmu (prawa) o postaci schematu α .

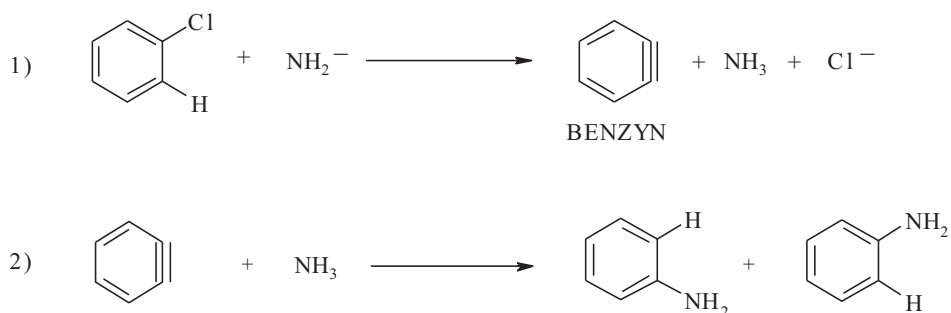
Stwierdzenie, że reakcja pomiędzy określonymi substratami podpada pod określony mechanizm (prawo teoretyczne typu α), jest hipotezą, która może być testowana eksperymentalnie. W podanym przykładzie mechanizmu aromatycznego podstawiania nukleofilowego, który polega na tworzeniu się kompleksu przejściowego, mogą o tym świadczyć na przykład: wyodrębnienie związku przejściowego, badania wpływu podstawników na szybkość reakcji oraz badania wpływu grupy odszczepiającej się na przebieg reakcji [March, 1975, s. 428]. Zauważmy, że kluczową rolę w rozważanym mechanizmie pełnią związki o charakterze przyczynowo-skutkowym, które są ustalane w aparacie pojęciowym, tworzącym tło teoretyczne omówione w poprzednim paragrafie. Jednakże niektóre z reakcji aromatycznego podstawiania nukleofilowego nie podpadają pod ten mechanizm. W rozważanym przypadku wykazano, że należy zaproponować inne wyjaśnienie. W trakcie wyjaśniania przebiegu tej reakcji przeprowadzono reakcję 1- ^{14}C -chlorobenzenu z amidkiem potasu i wykazano, że połowa wszystkich cząsteczek powstającego produktu (aniliny) jest znaczone w pozycji 1 (pozycja, przy której znajduje się grupa NH_2), a połowa – w pozycji 2 (pozycja sąsiadująca z pozycją 1) (rys. 2).

Wynik tego eksperymentu, a także kilku innych, wykazał, że rozpatrywana reakcja nie zachodzi według mechanizmu polegającego na tworzeniu się kompleksu



Rys. 2

przejściowego. Można więc powiedzieć, że wyjaśnienie opierające się na tym mechanizmie (prawie o postaci formuły α) zostało sfalsyfikowane. Zaproponowano następujący mechanizm rozpatrywanej syntezy, zgodnie z którym przebiega ona na drodze dwóch kolejnych reakcji – eliminacji i przyłączenia.



Rys. 3

„W celu ustalenia mechanizmu etapu pierwszego badano wpływ grup odszczepiających się na przebieg reakcji. Umożliwiło to rozstrzygnięcie, który z dwóch atomów – wodór czy chlorowec – odrywa się pierwszy. Udowodniono, że najpierw odrywa się proton, a następnie jon halogenkowy” [March, 1975, s. 432]. W drugim etapie reakcji azot może atakować każdą z dwóch reaktywnych pozycji symetrycznego związku przejściowego nazwanego benzynem i dlatego połowa cząsteczek aniliny otrzymanej z promieniotwórczego chlorobenzenu jest znaczone w pozycji sąsiedniej do węgla ¹⁴C (w pozycji 2).

Zapisy przebiegu reakcji oznaczone odpowiednio przez 1) i 2) są elementami opisu eksplanacyjnego stanowiącego rdzeń eksplanansu wyjaśnienia tej reakcji. Stanowią one odpowiedź na pytanie (eksplanandum): „dlaczego w wyniku reakcji 1-¹⁴C-chlorobenzenu z amidkiem potasu otrzymano po 50% cząsteczek aniliny o wzorach przedstawionych na rysunku 2?”. Na tej podstawie można sformułować mechanizm reakcji podstawienia nukleofilowego halogenków arylowych.

Odpowiednia formuła (α) będzie miała postać: *jeżeli cząsteczka naładowana ujemnie (odczynnik nukleofilowy Y) zaatakuje cząsteczkę halogenku arylowego RX (substrat), to dojdzie do utworzenia cząsteczki benzynu zawierającej wiązanie potrójne (reakcja eliminacji), a następnie do przyłączenia się w miejscu wiązania potrójnego odczynnika nukleofilowego wtedy i tylko wtedy, gdy będą spełnione określone warunki W*²⁰. Mechanizm ten zaproponowano, pomimo że związek przejściowy benzyn był wtedy (w momencie proponowania tego mechanizmu) jedynie przedmiotem teoretycznym, który dopiero w wyniku dalszych badań stał się przedmiotem eksperymentatora²¹. Jednakże ten teoretyczny przedmiot był ważnym ogniwem pośrednim w łańcuchu przyczynowo-skutkowym, prowadzącym do otrzymania aniliny, a jego reaktywność była tłumaczona „napięciami, które występują w sześcioczłonowym pierścieniu zawierającym wiązanie potrójne” [March, 1975, s. 432]. Hipoteza zakładająca powstanie benzynu została pośrednio uzasadniona eksperymentalnie w stereospecyficznych reakcjach Dielsa-Aldera. Założono, że reaktywne wiązanie potrójne, występujące w cząsteczkach benzynu, będzie czynnikiem „przyczynowo” odpowiedzialnym za powstawanie określonych produktów w stereospecyficznych reakcjach, w których hipotetyczny benzyn pełniłby funkcję dienofilu. Po przeprowadzeniu tych reakcji otrzymano produkty o strukturach zgodnych z zakładanymi. Tym samym potwierdzono eksperymentalnie hipotezę, że reakcje, takie jak np. reakcja chlorobenzenu z amidkiem potasu, przebiegają z wytworzeniem związków, których cząsteczki zawierają reaktywne wiązanie potrójne.

Próby wyjaśnienia przebiegu reakcji chlorobenzenu z amidkiem potasu doprowadziły do sformułowania tzw. mechanizmu benzynowego. Zakres jego stosowalności był ustalany w trakcie kolejnych badań eksperymentalnych i uległ rozszerzeniu na niektóre inne związki aromatyczne, a nawet na niektóre niearomatyczne związki pierścieniowe [March, 1975 s. 432]. Odpowiednia formuła typu (α) wyrażająca mechanizm benzynowy będzie ulegała modyfikacjom wraz z rozszerzaniem stosowalności tego mechanizmu i dookreślaniem warunków W przebiegu reakcji według tego mechanizmu.

Zauważmy, że zgodnie z koncepcją wyjaśniania genetyczno-teoretycznego Mejsbauma, zrekonstruowany przykład uzasadnia przekonanie, iż wyjaśnianie ma charakter odkrywczy. Prawa teoretyczne użyte w wyjaśnianiu są prawami o niskim poziomie ogólności, a zakres ich stosowania ulega ciągłym modyfikacjom wraz z rozwojem badań eksperymentalnych. Hipotetyczny mechanizm wyjaśniający przebieg reakcji chemicznej podaje zależności o charakterze przyczynowo-skutkowym i podlega empirycznemu testowaniu. Można by wykazać, że poszczególne

²⁰ Powyższa formuła została uproszczona, gdyż np. reakcjom zachodzącym według tego mechanizmu nie ulegają halogenki arylove zawierające podstawniki aktywujące.

²¹ Szczegółowo na ten temat w: [Zeidler, Sobczyńska, 1995/1996, s. 531-533].

elementy opisu eksplanacyjnego powiązane są ze sobą związkami dedukcyjnymi, choć niektóre założenia są przyjmowane na podstawie wnioskowań indukcyjnych.

Określenie stopnia, w jakim – zaproponowany przez Mejbauma – model wyjaśniania genetyczno-teoretycznego oddaje specyfikę wyjaśniania przebiegu reakcji chemicznych, wymagałoby rekonstrukcji większej liczby przykładów²². Jednak nawet powyższa jednostkowa rekonstrukcja przekonuje, że większość uchwyconych w tym modelu właściwości wyjaśniania charakteryzuje zarówno proces wyjaśniania, jak i same wyjaśnienia przebiegu reakcji chemicznych w chemii organicznej.

²² Na pewno nie sprawiłoby trudności znalezienie przykładów reakcji chemicznych, które uzasadniałyby przekonanie, że bardzo często ich przebiegi mogą być wyjaśniane za pomocą alternatywnych mechanizmów. Zainteresowany czytelnik znajdzie je chociażby w książce Marcha [1975].

XIII

Spór o stabilność praktyki badawczej nauk empirycznych

1. Wstęp

„Ustalone podejście” do teorii naukowych, do sposobów ich empirycznego sprawdzania, a także do wzajemnych relacji pomiędzy następującymi po sobie teoriami z danej dziedziny wiedzy, wytworzyło wizerunek nauk empirycznych, zgodnie z którym charakteryzują się one znacznym stopniem stabilności zarówno w zakresie ciągłości ich rozwoju teoretycznego, jak i zasadniczej niezmienności stosowanych metod badawczych. W narastającej od początku lat sześćdziesiątych XX wieku krytyce powyższego neopozytywistycznego ideału nauki poczytne miejsce zajmują przede wszystkim tzw. analizy *Weltanschauungen*, dokonywane przez takich autorów, jak: N. R. Hanson, S. Toulmin, T. Kuhn i P. K. Feyerabend. W literaturze z zakresu filozofii nauki centralną pozycję w historyczno-socjologiczno-psychologicznym nurcie badań nad nauką przypisuje się zazwyczaj Kuhnowi, który – mając za prekursora L. Flecka – doszedł do rezultatów, z których wyłonił się zasadniczo odmienny od neopozytywistycznego i Popperowskiego obraz jej dziejów. Charakteryzują się one, w ujęciu autora *Struktury rewolucji naukowych*, występującymi co pewien czas okresami zasadniczych zmian w zakresie stosowanych teorii i metod rozwiązywania podstawowych problemów. Zerwanie „logicznej” ciągłości postępu naukowego i zakwestionowanie teoretycznej i metodologicznej stabilności nauki było przedmiotem bardzo wielu analiz i polemik, które miały miejsce przede wszystkim w latach sześćdziesiątych i siedemdziesiątych ubiegłego wieku. W latach osiemdziesiątych, gdy temperatura dyskusji wokół koncepcji Kuhna i poglądów innych przedstawicieli *Weltanschauungen* wyraźnie opadła, została wypracowana kolejna perspektywa badań nad praktyką badawczą nauk empirycznych, określana mianem *nowego eksperymentalizmu*. Jej zwolennicy,

podobnie jak przedstawiciele nowych nurtów w socjologii wiedzy, skoncentrowali swoją uwagę na praktyce eksperymentalnej nauk empirycznych.

Ian Hacking, twórca podstawowych założeń tego kierunku, uważał, podobnie jak Kuhn, że obowiązkiem filozofa nauki jest analiza rzeczywistej praktyki badawczej nauki. Jednakże, jego zdaniem, do uchwycenia istotnych cech tej praktyki nie prowadzą kolejne analizy tych samych kilkunastu przykładów z nauk empirycznych nawet wtedy, gdy odegrały one kluczową rolę w ich dziejach. Hacking proponuje zastąpienie historii nauki analizą codziennej praktyki badawczej uczonych, a ta prowadzi go do wniosku, że centralną rolę w naukach empirycznych odgrywa eksperymentalna, a zwłaszcza laboratoryjna praktyka badawcza uczonych, a nie ich działalność teoretyczna. Nauka, w ujęciu Hackinga, nie tyle wytwarza wiedzę o świecie (*science-as-knowledge*), lecz przede wszystkim jest praktyką zmieniającą świat (*science-as-practice*). Opis nauk empirycznych opierający się na tym założeniu jest w wielu kwestiach odmienny od tego, jaki wyłaniał się z badań przedstawicieli nurtu historyczno-socjologiczno-psychologicznego. Dotyczy to zwłaszcza, postulowanej przez tych ostatnich, niestabilności praktyki badawczej nauk empirycznych. Powyższa kwestia będzie przedmiotem rozważań zawartych w tym artykule.

Choć Hacking jest skłonny odwoływać się, na ogół w trybie polemicznym, przede wszystkim do poglądów Kuhna, to uważam, iż teza o niestabilności teoretycznej i metodologicznej nauki posiada znacznie mocniejsze uzasadnienie w pracach Paula K. Feyerabenda. Dla autora *Jak być dobrym empirystą* oraz *Przeciw metodzie* teoretyczna i metodologiczna niestabilność nauki jest/powinna być jej immanentną cechą, podczas gdy dla Kuhna charakteryzuje ona jedynie okresy rewolucyjnych zmian w nauce. Z tego względu to właśnie stanowisko Feyerabenda będzie punktem odniesienia dla analiz prowadzonych w tym artykule.

Moim zamierzeniem nie jest jedynie krytyka tez sformułowanych przez Feyerabenda w świetle poglądów głoszonych przez Hackinga i innych przedstawicieli nowego eksperymentalizmu. Będę dążył do wykazania, że – utrzymywana przez Hackinga – teza o stabilności nauk laboratoryjnych, którą zasadniczo jestem skłonny akceptować, wymaga istotnego przeformułowania. Ponieważ w różnych naukach laboratoryjnych wyraźnie odmienny jest stosunek praktyki teoretycznej do praktyki eksperymentalnej, dlatego nie można utrzymywać, jak sądzę, jednolitego sformułowania tej tezy, które odnosiłoby się do wszystkich nauk laboratoryjnych. Uzasadnienie powyższego przekonania będzie miało, ze względu na ograniczone ramy tego artykułu, jedynie charakter szkicowy. W paragrafie trzecim wskażę na te cechy praktyki laboratoryjnej chemii, które sprawiają, że jest ona odmienna od praktyki laboratoryjnej fizyki, która stanowi podstawowy przedmiot analiz Hackinga. Ze względu na tę odmienność stabilność praktyki badawczej chemii jest znacznie większa niż stabilność fizyki.

2. Niestabilność nauk empirycznych w świetle poglądów Paula K. Feyerabenda

Poglądy Feyerabenda na naukę mają ustaloną rangę w tradycji filozofii nauki; były przedmiotem wielu analiz i kontrowersji także w polskiej literaturze przedmiotu. Można wspomnieć chociażby prace takich autorów, jak: K. Zamiara [1978], K. Jodkowski [1984, 1986] lub W. Sady [2000]. Z tego względu ograniczę się jedynie do przypomnienia tych podstawowych wyznaczników jego stanowiska, które są istotne dla diskutowanego w tym artykule problemu stabilności/niestabilności nauki. Wskażę również na te założenia koncepcji Feyerabenda, które zdeterminowały, moim zdaniem, jego poglądy w powyższej kwestii.

W literaturze poświęconej analizie poglądów Feyerabenda wyróżnia się zazwyczaj dwie fazy ich rozwoju – umiarkowaną i radykalną. Ta pierwsza znalazła swój wyraz przede wszystkim w artykułach opublikowanych w latach sześćdziesiątych, a druga, zwana anarchizmem metodologicznym, została wypracowana w pierwszej połowie lat siedemdziesiątych i zwieńczona książką *Przeciw metodzie*. Stanowisko w niej zawarte uległo dalszej radykalizacji w kolejnych publikacjach pochodzących z lat osiemdziesiątych. Jednakże poglądy Feyerabenda z tego okresu, kwalifikowane często jako *anarchistyczno-dadaistyczne*, nie będą przedmiotem mojego zainteresowania, choć promował on, w końcowej fazie swojej filozoficznej ewolucji, skrajną niestabilność nie tylko nauki, lecz również innych form kultury. Ich rozwój powinien być podporządkowany wyłącznie jednej naczelnej wartości, jaką był dla niego rozwój jednostki, prowadzący ją do osiągnięcia szczęścia. Jednakże te radykalne poglądy należą już do zakresu filozofii społecznej, a moim celem jest analiza dyskursu o stabilności/niestabilności praktyki badawczej nauk empirycznych w ramach filozofii nauki.

Niestabilność nauk empirycznych wyłania się zarówno z dokonanej przez Feyerabenda krytyki niektórych składników „ustalonego podejścia” do teorii naukowych, jak i z proponowanych przez niego dyrektyw uprawiania nauki. Ważną rolę w kontekście tezy o niestabilności nauki odgrywa przede wszystkim odrzucenie przekonania o stabilności znaczeń terminów i zdań języka obserwacyjnego. Stało się ono możliwe wraz z odrzuceniem dychotomicznego podziału słownika języka na słownik obserwacyjny i teoretyczny oraz idei neutralnego języka obserwacyjnego. To nie terminy obserwacyjne determinują znaczenie terminów teoretycznych, lecz te ostatnie określają znaczenie terminów obserwacyjnych. W myśl kontekstualnej teorii znaczenia, znaczenia wszystkich terminów są zdeterminowane przez teorię, a wraz ze zmianą teorii następuje zmiana ich znaczeń. Tym samym zdania obserwacyjne nie mogą pełnić funkcji niezmienniczej bazy nauk empirycznych.

Zdaniem Feyerabenda rozwój wiedzy teoretycznej nie następuje ani według schematu redukcji interteoretycznej, zaproponowanej w tradycji neopozytywistycznej,

ani nawet według schematu Poppera. Kumulatywizm i monizm teoretyczny zostają zastąpione ideą pluralizmu teoretycznego, a więc ideą współistniejących i konkurujących ze sobą niewspółmiernych koncepcji teoretycznych. Z ideą zmiany teoretycznej ściśle wiąże się także postulat realistycznego podejścia do wiedzy naukowej. „Realista [w przeciwieństwie do instrumentalisty – P.Z.] musi pozbyć się [w ujęciu Feyerabenda – P.Z.] także swego starego sposobu wyjaśniania świata; musi radykalnie zmienić swój punkt widzenia i przyjąć ontologiczną nieciągłość między tymi dwoma ujęciami świata” [Jodkowski, 1986, s. 239]. Tym samym upada również idea względnej autonomii faktów. Niektóre fakty mogą być wykryte tylko wtedy, gdy wytworzymy nową teorię. Jeśli w nauce występuje okres zgodności stanowisk, to powinien być on waloryzowany negatywnie, gdyż świadczy o tym, że nie wymyślono żadnych nowych poglądów. Ustawiczny konflikt pomiędzy koncepcjami teoretycznymi i brak konsensusu wśród uczonych to pożądane – zdaniem Feyerabenda – cechy praktyki badawczej. Ma je zapewnić przestrzeganie zasady proliferacji, czyli poszukiwania nowych teorii niezgodnych z powszechnie akceptowanymi oraz zasady uporczywości, polegającej na obronie teorii wcześniej odrzuconych, które powinny, jego zdaniem, być włączone do zbioru teorii alternatywnych.

Radykalizacja powyższych idei polegała na propagowaniu koncepcji anarchizmu metodologicznego, a co za tym idzie – epistemologicznego. W książce *Przeciw metodzie* Feyerabend twierdzi, że istnieje tylko jedna zasada, której można bronić we wszystkich okolicznościach i która „pomaga w osiągnięciu postępu w każdym sensie, jaki zechce się wybrać” [Feyerabend, 1996, s. 26]. Jest to zasada: *wszystko się przyda*¹. Poglądy Feyerabenda wyrażone w *Przeciw metodzie* były często interpretowane w sposób skrajny, zwłaszcza przez filozofów zaliczanych do nurtu postmodernistycznego. Jean-François Lyotard w książce *Kondycja postmodernistyczna* wykorzystał je do uzasadnienia tezy, iż w nauce ponowoczesnej uczonych nie cechuje dążenie do uzyskania *consensusu*, a ciągle kwestionowanie reguł postępowania badawczego i odrzucanie uniwersalnych kryteriów racjonalności prowadzi do permanentnej niestabilności i niepewności nauki². Jednakże, w przeciwieństwie do Lyotarda, Feyerabend nie twierdzi, że niezgodność, rywalizacja i konflikt miałyby stanowić cele nauki; nie uważa również, iż *consensus* jest w nauce niemożliwy do osiągnięcia. Twierdzi natomiast, że ze względu na to, iż uczeni mogą realizować różnorodne cele, a środki ku nim prowadzące nie są, zgodnie

¹ W literaturze polskiej poświęconej anarchistycznym poglądom Feyerabenda proponowano różne sposoby przekładu terminu „anything goes”. Wybór odpowiedniego przekładu zależy od kontekstu problemowego, w którym termin ten jest przez Feyerabenda stosowany. Ponieważ interesuje mnie wąski aspekt jego użycia, ograniczony do kwestii stosowania dowolnych metod prowadzących do postępu poznawczego, dlatego przyjmuję tłumaczenie: *wszystko się przyda* – w znaczeniu: przydatna może być każda metoda prowadząca do sukcesu poznawczego.

² Zobacz na ten temat szerzej w: [Zeidler, 1992, s. 63-71].

z zasadą *wszystko się przyda*, ograniczone żadną historycznie niezmienną zasadą racjonalności, nie będzie on nigdy trwały. Feyerabend niejednokrotnie występował przeciwko błędnym interpretacjom swoich poglądów, zaznaczając, że przyjęcie zasady *wszystko się przyda* oznacza jedynie odrzucenie istnienia ponadhistorycznego kryterium, według którego dokonano by podziału na racjonalne i nieracjonalne postępowanie w nauce. Jednakże, choć w jego opinii nie istnieje specyficznie naukowa działalność, to wszystkie usiłowania prowadzące do zmiany naszej wiedzy powinny być oceniane z punktu widzenia ich wkładu w postępek ludzkości³.

Choć krytykowane przez Feyerabenda neopozytywistyczna i Popperowska filozofie nauki różnią się pod bardzo wieloma względami od jego własnego pozytywnego programu filozoficznego, to łączy je uznawanie *teorii naukowej* za centralną kategorię pojęciową, za pomocą której opisują praktykę badawczą nauk empirycznych. Owo zorientowanie na teorie naukowe dotyczy nawet w większym stopniu oryginalnych propozycji Feyerabenda, które – wyrażone za pomocą odpowiednich dyrektyw skutecznego uprawiania nauki – odnoszą się w większości do teorii naukowych lub teoretycznych aspektów praktyki badawczej. Jest rzeczą istotną, że wspomniany powyżej normatywny składnik koncepcji Feyerabenda znalazł w jego pracach mocne uzasadnienie w dogłębnych, choć często bardzo kontrowersyjnych, analizach wielu przykładów z dziejów nauki. Jednakże to przede wszystkim „teoretycystyczne” założenia wyjściowe, na których bazowały jego analizy historyczno-metodologiczne, determinowały rezultaty tych analiz, a także treść wyprowadzanych z nich konstatacji normatywnych. Feyerabend, tak krytycznie nastawiony do filozoficznej tradycji, przyjął za niepodlegające dyskusji przekonanie Poppera, iż „nauki empiryczne są systemami teorii” [Popper, 1977, s. 53], a także rozwinął jego tezę mówiącą, iż eksperyment jest „zaplanowanym działaniem, gdzie każdy krok kierowany jest przez teorię” [Popper, 1977, s. 224]. Z tego względu wyłaniający się z jego rozważań obraz niestabilności praktyki badawczej nauk empirycznych jest rezultatem niestabilności ich praktyki teoretycznej i metodologicznej.

Należy również zauważyć, iż w miejsce odrzuconego *ustalonego podejścia* do teorii empirycznych Feyerabend nie zaproponował żadnej alternatywnej koncepcji teorii naukowej. Można przyjąć, że był w tym zakresie skłonny zdać się, przynajmniej w okresie umiarkowanym, na opinię samych uczonych, którzy najlepiej wiedzą, jakie wytwory swoich badań określać tym mianem. Wraz z postępującą radykalizacją poglądów autora *Przeciw metodzie* na miano teorii zaczęły zasługiwać, w jego mniemaniu, wszystkie ogólne koncepcje i idee. Skoro nie ma niezmiennych standardów metodologicznych, to nie można nakładać kryteriów na to, co nazywa się teorią naukową. Anarchizm metodologiczny, wytwarzający niestabilność

³ Pojęcie „postępu”, odgrywające w pracach Feyerabenda tak ważną rolę, nie zostało przez niego zdefiniowane.

praktyki badawczej nauki, jest anarchizmem w sferze idei, który niejako automatycznie, ze względu na teoretyczny charakter wszystkich aspektów praktyki badawczej, pociąga za sobą przekonanie o niestabilności praktyki eksperymentalnej. Z tym przekonaniem Feyerabenda można jednakże skutecznie polemizować, gdyż przykłady, które miały je potwierdzać, zostały dobrane przez niego bardzo wybiórczo – właśnie z perspektywy preferującej analizę teoretycznych i poznawczych aspektów nauki. Stanowisko *nowego eksperymentalizmu*, którego ukonstytuowanie jest kojarzone przede wszystkim z pracami I. Hackinga, powstało w istocie w opozycji do powyższej perspektywy. Zmiana sposobu widzenia i analizowania *rzeczywistej* praktyki badawczej nauk empirycznych, a zwłaszcza laboratoryjnych, skutkuje odmiennym przekonaniem w kwestii stabilności/niestabilności tych nauk.

3. Iana Hackinga idea stabilności praktyki badawczej nauk laboratoryjnych

Nowy eksperymentalizm jest, jak zauważył Hacking, terminem, który powinien odnosić się do szerokiego zakresu badań historycznych, filozoficznych i socjologicznych nad praktyką eksperymentalną nauk empirycznych, zainicjowanych na początku lat osiemdziesiątych XX wieku, i nie należy go wiązać z jakąkolwiek konkretną filozoficzną ideologią, np. realistyczną czy antyrealistyczną [Hacking, 1995/1996, s. 538]⁴. Kontynuując powyższą myśl Hackinga, należy stwierdzić, że *nowi eksperymentalisci* nie wypracowali żadnej spójnej koncepcji metodologicznej, ani praktyki teoretycznej nauk empirycznych ani ich praktyki eksperymentalnej. Niewątpliwie najbardziej nowatorskie były propozycje sformułowane przez Hackinga w jego książce *Representing and Intervening* [Hacking, 1983, s. 210-219]⁵, w której postulował zastąpienie rozważań nad zrekonstruowanymi teoriami naukowymi analizami teoretycznych czynności badawczych, które odgrywają ważną rolę w trakcie projektowania i przeprowadzania badań eksperymentalnych oraz opracowywania ich wyników. Nauka jest, w jego ujęciu, aktywnością polegającą na rozwiązywaniu problemów, które powstają w trakcie – dominującej w naukach empirycznych – praktyki eksperymentalnej. Do ich rozwiązania niezbędna jest teoretyczna aktywność uczonych, będąca ważnym składnikiem świadomego ingerowania uczonych w świat. Filozof nauki powinien interesować się przede wszystkim właśnie tak

⁴ Poglądy Hackinga były w polskiej literaturze przedmiotu analizowane przede wszystkim w kontekście sporu o realizm. Zobacz np. [Giza, 1990] oraz [Zeidler, Sobczyńska, 1995/1996, s. 517-535]. Marek Sikora przedstawił poglądy Hackinga na nauki laboratoryjne w odniesieniu do zagadnienia interpretacji [Sikora, s. 1997, 91-122].

⁵ Poglądy innych czołowych *nowych eksperymentalistów* na kwestię relacji teorii do eksperymentu, a zwłaszcza poglądy Galisona i Franklina, różnią się w wielu kwestiach dość istotnie od poglądów Hackinga.

rozumianą działalnością teoretyczną badaczy, a mniej uwagi poświęcać temu, w jaki sposób teorie naukowe reprezentują świat. Należy więc odejść od dominujących w filozofii nauki badań, które koncentrują się na analizie języków teorii naukowych i ich interpretacji empirycznej albo na analizie struktur pozajęzykowych, które mają reprezentować teorie naukowe w ich nie-zdaniowych ujęciach. Odejść należy również od stereotypowego ujęcia roli praktyki eksperymentalnej, ograniczającego ją do sytuacji, w których dokonuje się wyboru pomiędzy rywalizującymi teoriami lub do procedur weryfikacji teorii naukowych. Taka zmiana podejścia do nauk eksperymentalnych sprawia, że poznawczy aspekt nauki staje się, dla autora *Representing and Intervening*, drugorzędny, a aktywistyczne ujęcie praktyki badawczej nie ogranicza się jedynie do analizowania procesów wytwarzania i sprawdzania wiedzy. To, co wyróżnia nauki empiryczne, a przede wszystkim laboratoryjne, to możliwość kreowania przez badaczy nowych zjawisk, a postulat ingerowania w świat nabiera, w ujęciu Hackinga, sensu techniczno-operacyjnego.

Zwrócenie uwagi na konieczność rozszerzenia kultury naukowej o jej aspekty ujawniane w trakcie analizy praktyki eksperymentalnej nauk empirycznych – zwłaszcza laboratoryjnych – nie jest jedyną zasługą Hackinga. Pod wpływem jego analiz zmienił się, do pewnego stopnia, obraz dwóch podstawowych kultur nauki: teoretycznej i eksperymentalnej. Autor *Representing and Intervening* postulował ich względną autonomiczność, dążąc do wykazania, że praktyka eksperymentalna daje niezależny wkład w rozwój nauki, a przede wszystkim ma znaczący udział w zmienianiu otaczającego nas świata. Jednakże przeprowadzona przez Hackinga analiza praktyki eksperymentalnej wykazuje, jak istotna jest rola myślenia teoretycznego w badaniach laboratoryjnych, choć bardzo często myślenie to nie bazuje na dobrze ukonstytuowanych teoriach fundamentalnych. Konstatacja ta zachowuje swoją ważność, pomimo że Hacking problematyzuje powszechnie akceptowane w filozofii nauki przekonanie o teoretycznym obciążeniu każdej obserwacji i każdego eksperymentu. Dzieje się tak dlatego, że w ujęciu Hackinga, jak również Galisona, pod pojęcie „teorii” – w kontekście badań eksperymentalnych – nie podpada jedynie usystematyzowany zbiór twierdzeń na temat danej dziedziny przedmiotowej, lecz zbiór najróżniejszego typu przekonań i założeń o zróżnicowanym stopniu ogólności, pochodzących z różnych dyscyplin naukowych, a często należących do tak zwanej wiedzy potocznej. Dla Hackinga i innych *nowych eksperymentalistów* nie ulega wątpliwości, że współczesna praktyka eksperymentalna nauk laboratoryjnych jest uzależniona od szeroko rozumianej wiedzy teoretycznej badaczy, choć przeprowadzenie wielu eksperymentów nie zależy od żadnej teorii systematycznej. Im większa jest niezależność praktyki eksperymentalnej od teorii fundamentalnych (systematycznych), tym praktyka badawcza nauk laboratoryjnych jest bardziej stabilna.

Teza o stabilności nauk laboratoryjnych została uzasadniona przez Hackinga w artykule: *The Self-Vindication of the Laboratory Science* [Hacking, 1992(a),

s. 29-64], który stanowi rozwinięcie i uszczegółowienie wielu idei zawartych w *Representing and Intervening*⁶. Analizował w nim te nauki empiryczne, których praktyka eksperymentalna jest realizowana głównie w laboratorium, gdyż to właśnie w laboratorium można stwarzać warunki, które nie występują w przyrodzie lub przynajmniej nie występują w niej w postaci „nie-zaburzonej”, a których wytworzenie umożliwia kreowanie nowych zjawisk. Ten ostatni – kreacyjny – aspekt praktyki laboratoryjnej odgrywa, jak już wspominałem, centralną rolę w jego ujęciu praktyki eksperymentalnej. Tym samym poza obszarem zainteresowania Hackinga znalazły się nauki społeczne, np. psychologia, choć niekiedy jej praktyka posiada charakter laboratoryjny, a także takie nauki przyrodnicze, jak np. astrofizyka, kosmologia lub niektóre dyscypliny zaliczane do biologii. Hacking ograniczył więc zakres sporu o stabilność/niestabilność nauk empirycznych do nauk laboratoryjnych i podjął polemikę z tymi filozofami nauki, dla których ustawiczne zmiany stosowanych w nauce teorii, reguł metodologicznych i aparatury badawczej stanowią jej istotną właściwość, wpływającą w decydującym stopniu na rozwój wiedzy, lecz zarazem wywołującą permanentną niestabilność praktyki badawczej. Przeciwwstawiał się, wraz z Peterem Galisonem, rozpowszechnionemu przekonaniu, że radykalne zmiany koncepcji teoretycznych, skutkujące zasadniczą niewspółmiernością paradygmatów, determinują całą praktykę badawczą – również laboratoryjną. Galison wykazał, że w każdej nauce laboratoryjnej obecnych jest kilka różnych tradycji, takich jak: teoretyczna, eksperymentalna, tradycja stosowania określonej aparatury badawczej, tradycja interpretacji wyników badań eksperymentalnych i inne, które nie muszą być ze sobą ściśle związane, a zmiana tradycji teoretycznej na ogół nie prowadzi do szybkich i zasadniczych zmian, na przykład w sposobach wykonywania czynności laboratoryjnych [Galison, 1987, s. 243-262]. Zdaniem Hackinga to właśnie praktykę badawczą nauk laboratoryjnych cechuje wysoki stopień stabilności, dzięki któremu można mówić o samouwiarygodnianiu się tych nauk. Stabilność, o której mowa, nie powinna być ujmowana normatywnie, lecz uznawana za fakt, który trzeba wyjaśnić [Hacking, 1992(a), s. 38]. Dążąc do scharakteryzowania elementów praktyki laboratoryjnej, które o owej stabilności przesądzają, wyróżnia trzy ich podstawowe grupy. Pierwszą stanowi szeroko rozumiane teoretyczne (myślowe) „zaplecze” eksperymentu, druga obejmuje przedmiotowe składniki praktyki laboratoryjnej, a trzecia odnosi się do wyników eksperymentów⁷.

⁶ Przedstawiona w tym paragrafie charakterystyka składników nauki laboratoryjnej I. Hackinga zawarta jest również w artykule *Miejsce filozofii chemii w filozofii przyrodznawstwa*, który otwiera niniejszą książkę. Jednakże ze względu na kluczową rolę, jaką odgrywa ona w uzasadnieniu tezy o stabilności praktyki badawczej nauk laboratoryjnych, zdecydowałem się na jej powtórzenie.

⁷ Zaproponowana przez Hackinga *taksonomia* elementów składających się na praktykę laboratoryjną nie spełnia podstawowych kryteriów metodologicznych nakładanych na klasyfikację

Intelektualne składniki praktyki eksperymentalnej to: pytania, wiedza podstawowa, teoria systematyczna, hipotezy lokalne (fenomenologiczne) oraz modelowanie aparatury badawczej. W dyscyplinach laboratoryjnych pytania dotyczą przede wszystkim samej praktyki laboratoryjnej, rzadziej odnoszą się do jej zaplecza teoretycznego, a jeszcze rzadziej zadawane są pytania, stawiane najczęściej przez filozofów nauki, które dotyczą oceny konkurujących teorii w świetle wyników badań laboratoryjnych. Do elementów stanowiących „zaplecze” teoretyczne eksperymentu należy również wiedza podstawowa, do której Hacking zalicza nieusystematyzowane przekonania eksperymentatorów, bez których przeprowadzenie eksperymentów nie byłoby możliwe. Bardziej wyczerpująca charakterystyka tej wiedzy nie wydaje się możliwa i uczony rezygnuje z jej przedstawienia. Można jedynie podjąć się prób jej rekonstrukcji wówczas, gdy rozważa się konkretne przypadki z zakresu praktyki laboratoryjnej. Ważne jest w tym kontekście stwierdzenie, że wiedza ta może pochodzić z różnych dziedzin nauki, a nawet z praktyki życia codziennego. Trzeci składnik zaplecza intelektualnego eksperymentatora stanowią ogólne i zarazem najczęściej stosowane prawa teorii naukowej, choć należy w tym kontekście mówić o teoriach naukowych, gdyż eksperymentowanie bardzo często zakłada prawa podstawowe – fundamentalne w rozumieniu Cartwright – należące do różnych teorii. Prawa te mogą nie posiadać same przez się eksperymentalnych konsekwencji, lecz dostarczają uzasadnienia teoretycznego dla przypuszczalnego przebiegu planowanego eksperymentu. Najbardziej złożony i niejednoznaczny charakter posiada ten element teoretycznego „zaplecza” eksperymentatora, który Hacking określił mianem *topical hypotheses*. Zalicza do nich hipotezy lokalne o charakterze fenomenologicznym, które mają wiązać prawa ogólne systematycznej teorii ze zjawiskami. W tradycji neopozytywistycznej były to *reguły korespondencji* Carnapa, choć Hacking odwołuje się w tym kontekście do *praw pomostowych* Hempela i *słownika* Campbella. Ponieważ, podobnie jak inni współcześni zwolennicy tradycji empiryzmu, autor *The Self-Vindication of the Laboratory Science* rezygnuje z dychotomii: terminy teoretyczne – terminy obserwacyjne, dlatego utożsamia ten element teoretycznego „zaplecza” eksperymentu ze zbiorem procedur aproksymowania i modelowania, które są przedmiotem analiz Cartwright [Hacking, 1992(a), s. 45]. W najbardziej ogólnym sensie elementy tej grupy mają podpadać pod to, co Kuhn nazwał *artykulacją* teorii w celu powiązania jej z doświadczeniem. Ten zmienny element myślowej aktywności eksperymentatorów posiada dla praktyki laboratoryjnej znaczenie decydujące, gdyż to właśnie on, a nie systematyczne teorie, decyduje, zdaniem Hackinga, o jej przebiegu. Ostatnim

i może być uznana co najwyżej za próbę ich pogrupowania. Również nazwy stosowane przez Hackinga na ich oznaczenie są bardzo mylące. Dlatego w niektórych przypadkach rezygnuję z próby ich dosłownego tłumaczenia, dążąc jedynie do przybliżenia tych składników jego charakterystyki nauk laboratoryjnych, które oddają wpływ myślenia teoretycznego na stabilność tych nauk.

elementem o charakterze teoretycznym jest modelowanie stosowanej aparatury, w którym wykorzystuje się teorie opisujące sposób zachowywania się aparatury i jej oddziaływanie z przedmiotami, z którymi lub na których się eksperymentuje.

Do przedmiotowych składników praktyki laboratoryjnej Hacking zalicza wszystkie te elementy, które podpadają pod kategorię rzeczy. Należą do niej nie tylko obiekty, na których się eksperymentuje, lecz również cała aparatura laboratoryjna, a także sami eksperymentatorzy. Wybór przedmiotów eksperymentowania jest w sposób oczywisty zależny od stawianych pytań. Natomiast aparatura badawcza, która służy do detekcji lub przetwarzania (modyfikowania) obiektów, jest uzależniona od różnorodnych założeń teoretycznych, opisujących oddziaływanie tej aparatury z badanymi obiektami. To samo dotyczy tzw. „generatorów” danych, którymi mogą być odpowiednie urządzenia, lecz także sami badacze. Trzecią grupę elementów stanowią dane (wyniki) eksperymentów, a dokładniej – wszystkie operacje, jakie mogą być na nich dokonywane. Oprócz otrzymywania danych (wyników), są to: oszacowanie danych, ich redukowanie, analizowanie i wreszcie ich interpretacja. Operacje te w różnym stopniu wymagają zastosowania określonych elementów teoretycznych należących do grupy pierwszej. Choć Hacking zdaje sobie sprawę, że w laboratorium wyniki badań eksperymentalnych nie są dane, lecz uzyskiwane, a nawet – można powiedzieć – wytwarzane, to wyróżnia dane jako względnie a-teoretyczne przedstawienia wyników badań: odczyty przyrządów pomiarowych, wykresy, fotografie, tabele itp. Można zgodzić się z jego analizą danych jedynie wtedy, gdy pod pojęciem *teoretycznego ujęcia wyników badań* będziemy rozumieli ich interpretację w świetle teorii. Jednakże, nawet gdy abstrahujemy od faktu pominięcia w przeprowadzonej analizie teorii „zamrożonych” w urządzeniach pomiarowych, wystarczy zauważyć, że wyniki badań laboratoryjnych są przedstawiane przez urządzenia odczytujące jako wielkości wymiarowe, co już zakłada odpowiednie prawa teorii. Jeśli przedstawienie wyników przybiera postać wykresu lub tabeli, to udział założeń teoretycznych, należących do różnych elementów tworzących pierwszą grupę, jest niewątpliwy. Większość z wymienionych przez Hackinga sposobów przedstawiania danych wymaga przeprowadzenia operacji, które autor *The Self-Vindication of the Laboratory Science* zaliczył do trzeciej grupy. Z elementów tej grupy należy podkreślić rolę analizy danych, która zależy, zdaniem Hackinga, od wybranych pytań, lokalnych hipotez, sposobów modelowania aparatów i innych elementów „myślowego” zaplecza eksperymentu. Oczywiście w największym stopniu uwikłana teoretycznie jest interpretacja danych, choć – w przeciwieństwie do Hackinga – będę twierdził, że jest ona dokonywana zazwyczaj w świetle modeli teoretycznych, a nie teorii systematycznej lub podstawowych założeń teoretycznych. Tak więc elementy teoretyczne są istotne nie tylko podczas projektowania i przeprowadzania eksperymentu, lecz również podczas uzyskiwania danych i ich szeroko rozumianej analizy.

Szczegółowe przedstawienie wzajemnych zależności zachodzących pomiędzy poszczególnymi elementami praktyki laboratoryjnej wykracza poza zakres rozważań prowadzonych w tym artykule. Zwróćmy natomiast uwagę, że Hacking zakłada, iż wszystkie elementy jego taksonomii praktyki laboratoryjnej mogą ulegać zmianie w jej trakcie i wzajemnie te zmiany warunkować. Dopasowując się do siebie, tworzą one samo-uwiarygodniającą się strukturę, która decyduje o stabilności nauk laboratoryjnych⁸.

Z punktu widzenia analizy intelektualnego „zaplecza” praktyki laboratoryjnej istotny jest również problem interpretacji języka, w którym sformułowane są poszczególne elementy teoretyczne zakładane i wykorzystywane w tej praktyce. Problem interpretacji języka teorii jest ściśle związany ze sporem o realizm prowadzonym na płaszczyźnie semantycznej. W odniesieniu do teorii fundamentalnych, należących do kultury teoretycznej nauki, Hacking przyjął stanowisko antyrealistyczne, odrzucając, podobnie jak czyniła to Cartwright, możliwość reprezentowania przez teorie „obiektywnej rzeczywistości”, tzn. tych dziedzin przedmiotowych, które są dostępne w badaniach eksperymentalnych. Jest więc tak, jak to *implicite* wyraża stanowisko Feyerabenda, że określone rozstrzygnięcie sporu o status poznawczy teorii naukowych wpływa na rozstrzygnięcie sporu o stabilność praktyki badawczej nauki.

Hacking uważa, iż terminy stosowane w danej dyscyplinie laboratoryjnej, również terminy teoretyczne, nabierają realistycznej interpretacji dopiero wtedy, gdy za ich pomocą projektuje się eksperymenty i przedstawia ich rezultaty. Jego zdaniem powinny one posiadać określone stałe denotacje, które nie zależą od zmieniających się koncepcji teoretycznych, w których występują. Wymaga tego, wspomniana powyżej, stabilność praktyki laboratoryjnej. Dla autora *Representing and Intervening* szczególne znaczenie, jak już kilkakrotnie stwierdziłem, posiadają te eksperymenty, w trakcie których kreuje się nowe przedmioty (zjawiska). Rezultaty tych eksperymentów są zasadniczo powtarzalne, a więc nie zależą od zmian koncepcji teoretycznych. Pozytywny przebieg eksperymentów tego typu świadczy o istnieniu przedmiotów, za pomocą których dokonywaliśmy manipulacji. W tym przekonaniu wyraża się, bronione przez Hackinga, a także przez Galisona, stanowisko realizmu eksperymentalnego. Na płaszczyźnie semantycznej koncepcją, która w największym stopniu pozwala zachować wyrażone powyżej intuicje, jest – zdaniem Hackinga – przyczynowa (sztywne) teoria oznaczania. Niezmiennosc denotacji jest tym aspektem analizowanej koncepcji, który przyczynia się do zachowania stabilności przez praktykę eksperymentalną nauk laboratoryjnych i jej względnej niezależności od zmieniających się koncepcji teoretycznych.

⁸ Zagadnieniem niewątpliwie istotnym dla kwestii stabilności nauk laboratoryjnych, które – ze względu na jego szeroki zakres – nie będzie poruszane w tym artykule, jest rozszerzenie tezy Duhema, które jest możliwe dzięki rozbudowanej taksonomii Hackinga. Można wskazać na wiele elementów praktyki badawczej nauk laboratoryjnych, których zmiana lub modyfikacja umożliwia „ratowanie” hipotezy teoretycznej.

Na zakończenie tej części rozważań zwróćmy uwagę, że wszystkie elementy praktyki laboratoryjnej, analizowane przez Hackinga w *The Self-Vindication of the Laboratory Science*, posiadają charakter wewnętrzny względem tej praktyki i nie uwzględniają czynników zewnętrznych, które są przedmiotem zainteresowania socjologów wiedzy. Uwzględnienie czynników socjologiczno-instytucjonalnych, ekonomicznych i politycznych zmienia perspektywę badawczą, z której rozpatruje się zagadnienie rozwoju nauki i problem stabilności jej praktyki badawczej. Czynniki te, choć w ograniczonym zakresie, zostały uwzględnione przez Hackinga w kontekście jego analizy „stylu” uprawiania nauki [Hacking, 1992(b), s. 1-20]. Nawiązując do poświęconych temu zagadnieniu prac A. C. Crombiego, wyróżnia on *styl laboratoryjny*, który charakteryzuje się zarówno eksperymentowaniem w celu sprawdzania postulatów teoretycznych oraz w celu poznawania przez obserwację i pomiar, jak i tworzeniem hipotecznych modeli teoretycznych, a zwłaszcza modeli opisujących funkcjonowanie aparatury badawczej. *Styl laboratoryjny* dominuje w naukach, które nastawione są na *manipulowanie* i *interweniowanie*, w przeciwieństwie do nauk preferujących *styl Galileusza*, które nastawione są na reprezentowanie [Hacking, 1992(b), s. 7]. Każdy styl, a więc także *styl laboratoryjny*, zmierza do samostabilizacji, a techniki, które do tego prowadzą, mają z konieczności charakter społeczny.

Nauki laboratoryjne to nauki, w których dominuje *styl laboratoryjny*. Powyższa oczywista teza, wypływająca z lektury przywoływanych powyżej dwóch artykułów Hackinga, które ukazały się w 1992 roku, jest bardzo dyskusyjna, jeśli odnieść ją, zgodnie z intencją autora, do wszystkich nauk laboratoryjnych.

4. Uwagi o koncepcji stabilności nauk laboratoryjnych Iana Hackinga

Celem poniższych uwag jest krytyczna ocena koncepcji nauk laboratoryjnych zaproponowanej przez Hackinga, która będzie dokonana przez jej odniesienie do praktyki badawczej nauk, które uznaje on za laboratoryjne. Uzasadnienie sformułowanych w tym paragrafie hipotez wymagałoby szeroko zakrojonych badań nad konkretnymi naukami laboratoryjnymi i powinno być przedmiotem oddzielnego obszernego opracowania. Z tego względu ograniczę się w tym miejscu jedynie do ich szkicowego przedstawienia.

Swoje rozważania na temat stabilności praktyki badawczej nauk laboratoryjnych Hacking odnosił do wszystkich nauk laboratoryjnych, choć przecież różnią się one między sobą pod względem metodologicznym. Poszczególne elementy tworzące samouwiarygodniającą się strukturę w różnych naukach laboratoryjnych odgrywają odmienną rolę, a ich wzajemne relacje mogą być znacznie zróżnicowane. Dotyczy to zwłaszcza elementów teoretycznych, stanowiących „myślowe” zaplecze

wykonywanych eksperymentów, które w największym stopniu, zgodnie z analizami Feyerabenda, mogłyby wpływać na niestabilność nauk laboratoryjnych.

W fizyce teorie fundamentalne (systematyczne) odgrywają niewątpliwie znacznie większą rolę niż w chemii lub w niektórych działach biologii, a badania laboratoryjne są często podporządkowane dążeniu do potwierdzenia ogólnej teorii. Co więcej, w fizyce rola rozważań teoretycznych jest tak duża, a badania teoretyczne posiadają znaczną autonomię względem badań eksperymentalnych, że trudno uznać fizykę za naukę laboratoryjną w sensie Hackinga. Jest tak dlatego, iż fizyka jest ciągle jeszcze bardzo często ujmowana i rozumiana jako nauka wytwarzająca wiedzę o świecie, a więc jako *science-as-knowledge*. Uzasadnione więc wydaje się oddzielenie fizyki teoretycznej od laboratoryjnej, przy założeniu, że w tej pierwszej przeważa *styl Galileusza*, podczas gdy w drugiej dominuje *styl laboratoryjny*. Jednakże, wspomniany już, zazwyczaj istotny, wpływ rozważań teoretycznych na przeprowadzane w fizyce eksperymenty sprawia, że fizyka laboratoryjna jest znacznie mniej stabilna niż na przykład chemia laboratoryjna, na którą systematyczne teorie wpływają w znacznie mniejszym stopniu i łatwiej w jej obrębie może powstać samouwiarygodniająca się struktura.

Wydaje się, że wiele argumentów sformułowanych przez Feyerabenda, które przemawiają na rzecz tezy o niestabilności nauki, nie może być w sposób przekonujący odrzuconych, jeśli teza ta będzie odniesiona do fizyki. Jak już stwierdziłem, fizykę trudno uznać za naukę laboratoryjną w sensie Hackinga, a odrębnie analizowana fizyka laboratoryjna nie wytwarza tak stabilnej, samouwiarygodniającej się struktury, jak to postuluje autor *The Self-Vindication of the Laboratory Science*. Wydaje się, że zarówno zorientowana na teorie naukowe perspektywa Feyerabenda, jak i skoncentrowana na analizie pracy laboratoryjnej koncepcja Hackinga są, w odniesieniu do fizyki, zbyt jednostronne.

Odmienne rzecz ma się w przypadku chemii, w której – inaczej niż w fizyce – jest bardzo niewiele teorii fundamentalnych. Oczywiście stosuje się w niej aparat pojęciowy i twierdzenia takich teorii, jak na przykład mechanika kwantowa lub termodynamika. Nie są to jednak fundamentalne teorie chemii, lecz fizyki. Te pierwsze posiadają węższy zakres stosowalności i są ściśle powiązane z praktyką laboratoryjną, co sprawia, że autonomiczność chemii teoretycznej jest bardzo ograniczona. Wyłącznie teoretyczne badania, niezwiązane z konkretną praktyką eksperymentalną, stanowią niewielki odsetek wszystkich badań z zakresu szeroko rozumianej chemii. Ważne jest również to, że przeważająca część eksperymentów chemicznych przebiega w warunkach, które nie występują w przyrodzie, a mogą być wytworzone jedynie w laboratorium. Chemia jest zatem w znacznie większym stopniu praktyką zmieniającą świat (*science-as-practice*) niż nauką reprezentującą świat za pomocą swoich wytworów (*science-as-knowledge*). Tak więc metodologiczna charakterystyka chemii sprawia, że to właśnie ona zasługuje w znacznie większym stopniu na miano nauki laboratoryjnej niż fizyka.

Chemicy posiłkują się w trakcie badań laboratoryjnych przede wszystkim hipotezami lokalnymi i hipotezami modelującymi działanie aparatury, a także odwołują się do wiedzy podstawowej. Większość czynności teoretycznych podejmowanych przez chemików jest ściśle związana z czynnościami laboratoryjnymi, w których zaangażowane są elementy zaliczane przez Hackinga do przedmiotowych składników praktyki laboratoryjnej. Uzyskane w laboratorium chemicznym dane podlegają następnie operacjom, które składają się na trzecią grupę elementów wyróżnioną przez autora *The Self-Vindication of the Laboratory Science*. Niewątpliwie to elementy z drugiej i trzeciej grupy odgrywają centralną rolę w zachowaniu stabilności praktyki badawczej chemii.

Zaproponowana przez Hackinga siatka pojęciowa ułatwia opis chemii od strony podejmowanych w niej czynności laboratoryjnych. Niewątpliwie czynności eksperymentalne odgrywają wśród nich centralną rolę. Zestrojenie założeń teoretycznych ze stosowaną aparaturą i metodami opracowywania uzyskanych danych jest stale obecne w tej praktyce. Gwałtowny rozwój nowej aparatury badawczej, będący konsekwencją zastosowania nowych hipotez ją modelujących, wpływa na rozwój elementów teoretycznych i umożliwia wyjaśnienie wyników uzyskiwanych za pomocą tej aparatury. Często musi się również zmienić sposób analizy tych wyników. Niekiedy to nowe koncepcje teoretyczne z zakresu chemii wymuszają poszukiwanie nowej aparatury, która umożliwi wykonanie projektowanych eksperymentów i przeanalizowanie ich wyników. W chemii mówi się dość często o rewolucji naukowej związanej z gwałtownym rozwojem aparatury badawczej, który doprowadził do powstania chemii instrumentalnej⁹ [Sobczyńska, 1999, s. 96-109]. Jednakże, zgodnie z poglądami Hackinga, nie jest to rewolucyjna zmiana wiedzy chemicznej, lecz praktyki eksperymentalnej chemii. Jeśli nawet z tradycyjnego epistemologicznego punktu widzenia ta ostatnia prowadzi do znacznego przyrostu wiedzy, to jest on konsekwencją produkcji (syntezy) nowych związków chemicznych.

Pomimo że w chemii zarówno w zakresie teoretycznych podstaw projektowania eksperymentów, jak i stosowanej aparatury laboratoryjnej oraz metod detekcji, analizowania i interpretowania uzyskiwanych wyników dochodzi niekiedy do istotnych zmian, to nie wywołują one niestabilności praktyki laboratoryjnej chemii, jeśli o jej stabilności ma przesądzać, zgodnie z ujęciem Hackinga, proces wytwarzania nowych związków chemicznych i nowych zjawisk. Choć metody ich uzyskiwania oraz sposoby opisu i wyjaśniania zmieniają się, czasem nawet radykalnie, to ich synchronizacja w samouwiarygodniającą się strukturę decyduje o stabilności praktyki laboratoryjnej chemii.

⁹ Mówiąc o rewolucji spowodowanej rozwojem aparatury badawczej, należy wykorzystać inne niż Kuhnowskie pojęcie rewolucji naukowej, np. J. B. Cohena lub I. Hackinga. Zobacz na ten temat [Sobczyńska, 1999, s. 96-109].

Bibliografia

- Achinstein P.**, 1968, *Concepts of Science*, Johns Hopkins Press, Baltimor.
- Alder R. W., Baker R., Brown J. M.**, 1977, *Mechanizmy reakcji w chemii organicznej*, PWN, Warszawa.
- Amann A.**, 1992, *Must a Molecule Have a Shape?* „South Africa Journal of Chemistry”, vol. 45 (2/3), s. 29-38.
- Amann A.**, 1993, *The Gestalt Problem in Quantum Theory: Generation of Molecular Shape by the Environment*, „Synthese”, vol. 97, no. 1, s. 125-156.
- Amann A.**, 1996, *Individual Interpretation of Quantum Mechanics and Quantum Theory of Molecular Shape*, w: *Philosophers in the Laboratory*, V. Mosini (ed.), Euroma, Modena, s. 21-48.
- Atkins P. W.**, 1974, *Molekularna mechanika kwantowa*, PWN, Warszawa.
- Aykroyd W. R.**, 1970, *Three Philosophers*, Greenwood Press, Westport.
- Bailer-Jones D. M.**, 2002, *Models, Metaphors and Analogies*, w: *The Blackwell Guide to the Philosophy of Science*, P. Machamer, M. Silberstein (eds.), Blackwell Publishers, Oxford, s. 108-127.
- Bantz D.**, 1980, *The Structure of Discovery: Evolution of Structural Accounts of Chemical Bonding*, w: *Scientific Discovery: Case Studies*, T. Nickles (ed.), Reidel Publishing Company, Dordrecht, Boston, London, s. 291-329.
- Baracca A.**, 1996, *Chemistry's Leading Role in the Scientific Revolution at the Turn of the Century*, w: *Philosophers in the Laboratory*, V. Mosini (ed.), Euroma, Modena, s. 61-80.
- Barrow G. M.**, 1973, *Chemia fizyczna*, PWN, Warszawa.
- Bechtel W.**, 1992, *Fermentation Theory: Empirical Difficulties and Guiding Assumptions*, w: *Scrutinizing Science*, A. Donovan, L. Laudan, R. Laudan (eds.), Johns Hopkins University Press, Baltimore, London, s. 163-180.
- Beckermann A.**, 1992, *Supervenience, Emergence, and Reduction*, w: *Emergence or Reduction? Essays on the Prospect of Nonreductive Physicalism*, A. Beckermann, H. Flohr, J. Kim (eds.), Walter de Gruyter, Berlin, s. 94-118.
- Berg J. M., Tymoczko J. L., Stryer L.**, 2005, *Biochemia*, PWN, Warszawa.
- Bergandy W.**, 1997, *Od alchemii do chemii kwantowej*, WN UAM, Poznań.
- Bhaskar R. A.**, 1997, *A Realist Theory of Science*, Verso, London.
- Bhushan N., Rosenfeld S.**, 1995, *Metaphorical Models in Chemistry*, „Journal of Chemical Education”, vol. 72, nr 7, s. 578-582.
- Black M.**, 1962, *Models and Metaphors*, Cornell University Press, Ithaca, New York.
- Blackburn S.**, 1997, *Oksfordzki słownik filozoficzny*, Książka i Wiedza, Warszawa.
- Bojarski Z., Gigla M., Stróż K., Surowiec M.**, 2008, *Krystalografia*, PWN, Warszawa.

- Boniolo G.**, 2000, *What does it Mean to Observe Physical Reality? w: The Reality of Unobservable. Observability, Unobservability and Their Impact on the Issue of Scientific Realism*, E. Agazzi, M. Pauri (eds.), Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Boston, London, s. 177-190.
- Boniolo G.**, 2007, *On Scientific Representations. From Kant to a New Philosophy of Science*, Palgrave Macmillan, New York.
- Boyd R. N.**, 1984, *The Current Status of Scientific Realism*, w: *Scientific Realism*, A. Lepin (ed.), University of California Press, Berkeley, Los Angeles, London, s. 41-82.
- Boyd R.**, 1993, *Metaphor and Theory Change: What is 'Metaphor' a Metaphor for? w: Metaphor and Thought*, A. Ortony (ed.), Cambridge University Press, Cambridge, s. 481-533.
- Brock W. H.**, 1999, *Historia chemii*, Prószyński i Spółka, Warszawa.
- Brown T. L.**, 2003, *Making Truth. Metaphor in Science*, University of Illinois Press, Urbana, Chicago.
- Buchler J. W.**, 2004, *Chemistry Seen as Molecular Architecture with a Note on the German Term „Stoff”*, w: *Chemistry in the Philosophical Melting Pot*, D. Sobczyńska, P. Zeidler, E. Zielonacka-Lis (eds.), Peter Lang, Frankfurt am Main, s. 73-97.
- Buczyńska-Garewicz H.**, 1994, *Semiotyka Peirce'a*, Polskie Towarzystwo Semiotyczne, Warszawa.
- Carroll N.**, 1994, *Visual Metaphor*, w: *Aspects of Metaphor*, J. Hintikka (ed.), Kluwer, Dordrecht, Boston, London, s. 189-218.
- Cartwright N.**, 1983, *How the Laws of Physics Lie*, Oxford University Press, Oxford.
- Cartwright N.**, 1999, *Models and the Limits of Theory: Quantum Hamiltonians and the BCS Models of Superconductivity*, w: *Models as Mediators*, M. Morrison, M. Morgan M. (eds.), Cambridge University Press, Cambridge, s. 241-281.
- Cartwright N., Shomar T., Suarez M.**, 1995, *The Tool-box of Science*, w: *Theories and Models in Scientific Processes*, W. E., Herfel, W. Krajewski, I. Niiniluoto, R. Wójciki (eds.), Rodopi, Amsterdam, Atlanta, s. 137-149.
- Causey R. L.**, 1977, *Unity of Science*, Reidel, Dordrecht.
- Chwedeńczuk B.**, 1984, *Spór o naturę prawdy*, PIW, Warszawa.
- Clapp L. B.**, 1957, *Chemistry of the Covalent Bond*, W. H. Freeman and Company, San Francisco, London.
- Clark S.**, 2001, *Defensible Territory for Entity Realism*, „British Journal for Philosophy of Science”, vol. 52, s. 701-722.
- Coffey P.**, 2008, *Cathedrals of Science. The Personalities and Rivalries that Made Modern Chemistry*, Oxford University Press, Oxford, New York.
- Coulson C. A.**, 1976, *Kształt i budowa cząsteczek*, PWN, Warszawa.
- Crasnow S. L.**, 2000, *How Natural Can Ontology Be?* „Philosophy of Science”, vol. 67, s. 114-132.
- Crombie A. C.**, 1960, *Nauka średniowieczna i początki nauki nowożytnej*, t. I, Instytut Wydawniczy PAX, Warszawa.
- Crombie A. C.**, 1994, *Style myśli naukowej w początkach nowożytnej Europy*, IFiS PAN, Warszawa.
- Cross C. B.**, 1991, *Explanation and the Theory of Questions*, „Erkenntnis”, vol. 34, s. 237-260.
- Czarnocka M.**, 1986, *Kryteria istnienia w naukach przyrodniczych*, Ossolineum, Wrocław.

- Czarnocka M.**, 1994, *Koncepcja eksperymentalizmu Allana Franklina. Nowy eksperymentalizm na rozdrożu?* w: *Nowy eksperymentalizm – teoretycyzm reprezentacja*, D. Sobczyńska, P. Zeidler P. (red.), WN IF UAM, Poznań, s. 109-122.
- Davidson D.**, 1980, *Mental Events*, w: idem, *Essays on Actions and Events*, Oxford University Press, Oxford, s. 207-225 [przekład polski: Davidson, 1992].
- Davidson D.**, 1984, *Inquiries into Truth and Interpretation*, Clarendon Press, Oxford.
- Davidson D.**, 1992, *Zdarzenia mentalne*, w: idem, *Eseje o prawdzie, języku i umyśle*, PWN, Warszawa, s. 163-193.
- Dąbbska I.**, 1962, *O metodzie analogii*, w: idem, *Dwa studia z teorii naukowego poznania*, TNT, Prace Wydziału Filozoficzno-Historycznego, t. 12, z. 1, Toruń, s. 7-64.
- Del Re G.**, 1996, *The Specificity of Chemistry and the Philosophy of Science*, w: *Philosophers in the Laboratory*, V. Mosini (ed.), Euroma, Modena, s. 11-19.
- Del Re G.**, 1998, *Ontological Status of Molecular Structure*, „An International Journal for the Philosophy of Chemistry”, vol. 4, no. 2, s. 81-103.
- Del Re G.**, 2000, *Models and Analogies in Science*, „Hyle”, vol. 6, s. 5-15.
- Devitt M.**, 1984, *Realism and Truth*, Princeton University Press, Princeton.
- Diamond JR. A. M.**, 1992, *The Polywater Episode and the Appraisal of Theories*, w: *Scrutinizing Science*, A. Donovan, L. Laudan, R. Laudan (eds.), Johns Hopkins University Press, Baltimore, London, s. 181-198.
- Feyerabend P. K.**, 1979, *Jak być dobrym empirystą*, PWN, Warszawa.
- Feyerabend P. K.**, 1996, *Przeciw metodzie*, Siedmiogród, Wrocław.
- Fierz-David H. E.**, 1985, *Historia rozwoju chemii*, PWN, Warszawa.
- Fine A.**, 1984, *The Natural Ontological Attitude*, w: *Scientific Realism*, J. Leplin (ed.), University of California Press, Berkeley, Los Angeles, London, s. 83-107
- Franklin A.**, 1986, *The Neglect of Experiment*, Cambridge University Press, Cambridge.
- Franklin A.**, 1990, *Experiment, Right or Wrong*, Cambridge University Press, Cambridge.
- Franklin A.**, 1999, *Can that Be Right? Essays on Experiment, Evidence, and Science*, Kluwer Academic Publisher, Dordrecht, Boston, London.
- Galison P.**, 1987, *How Experiments End?*, University of Chicago Press, Chicago.
- Giere R.**, 1985, *Constructive Realism*, w: *Images of Science*, P. M. Churchland, C. Hooke (eds.), University of Chicago Press, Chicago, London, s. 75-98.
- Giere R.**, 1988, *Explaining Science*, University of Chicago Press, Chicago.
- Giere R.**, 2004, *How Models Are Used to Represent Reality*, „Philosophy of Science”, vol. 71, s. 742-752.
- Giza P.**, 1990, *Realizm Iana Hackinga a konstruktywny empiryzm Basa C. van Fraassena*, Wydawnictwo UMCS, Lublin.
- Goodwin W.**, 2009, *Visual Representations in Science*, „Philosophy of Science”, vol. 76, s. 372-390.
- Grabińska T.**, 1993, *Teoria, model, rzeczywistość*, Wyd. Politechniki Wrocławskiej, Wrocław.
- Grobler A.**, 2000, *Prawda i względność*, Aureus, Kraków.
- Grosholz E. R., Hoffmann R.**, 2000, *How Symbolic and Iconic Languages Bridge the Two Worlds of the Chemist. A Case Study from Contemporary Bioorganic Chemistry*, w: *Of Minds and Molecules. New Philosophical Perspectives on Chemistry*, N. Bhushan, S. Rosenfeld (eds.), Oxford University Press, Oxford, s. 230-247.

- Haack S.**, 1994, 'Dry Truth and Real Knowledge'. *Epistemologies of Metaphor and Metaphors of Epistemology*, w: *Aspects of Metaphor*, J. Hintikka (ed.), Kluwer, Dordrecht, Boston, London, s. 1-22.
- Hacking I.**, 1983, *Representing and Intervening*, Cambridge University Press, New York, Cambridge.
- Hacking I.**, 1992(a), *The Self-Vindication of the Laboratory Sciences*, w: *Science as Practice and Culture*, A. Pickering (ed.), The University of Chicago Press, Chicago, London, s. 29-64.
- Hacking I.**, 1992(b), 'Style' for Historians and Philosophers, „Stud. Hist. Phil. Sci.”, vol. 23, no. 1, s. 1-20.
- Hacking I.**, 1995/1996, *Scientific Realism about Some Chemical Entities. Comments on Zeidler & Sobczykńska's Paper*, „Foundations of Science”, vol. 1, no. 4, s. 537-542.
- Hajduk Z.**, 2004, *Filozofia przyrody. Filozofia przyrodoznawstwa. Metakosmologia*, Towarzystwo Naukowe Katolickiego Uniwersytetu Lubelskiego, Lublin.
- Hall R.**, 1966, *Rewolucja naukowa 1500-1800*, Instytut Wydawniczy PAX, Warszawa.
- Hempel C. G.**, 2001, *Filozofia nauk przyrodniczych*, Aletheia, Warszawa.
- Hendry R. F.**, 1995, *Models and Approximations in Quantum Chemistry*, w: *Theories and Models in Scientific Processes*, W. E. Herfel, W. Krajewski, I. Niiniluoto, R. Wójciki (eds.), Rodopi, Amsterdam, Atlanta, s. 123-142.
- Hendry R. F.**, 1999, *Molecular Models and the Question of Physicalism*, „Hyle”, vol. 5, no. 2, s. 143-160.
- Hesse M.**, 1966, *Models and Analogies in Science*, University of Notre Dame Press, Notre Dame.
- Hoffmann R.**, 1995, *The Same and Not the Same*, Columbia University Press, New York.
- Hoffmann R., Laszlo P.**, 1994, *Reprezentacja w chemii*, w: *Nowy eksperymentalizm – teoretycystym – reprezentacja*, D. Sobczykńska, P. Zeidler (red.), WN IF UAM, Poznań, s. 87-108.
- Hoffmann R., Minkin V. I., Carpentier B. K.**, 1999, *Brzytwa Ockhama i chemia*, w: *Chemia: laboratorium myśli i działań*, D. Sobczykńska, P. Zeidler (red.), WN IF UAM, Poznań, s. 13-44.
- Horgan T.**, 1982, *Supervenience and Microphysics*, „Pacific Philosophical Quarterly”, vol. 63, s. 29-43.
- Humphreys C. J.**, 1999, *Electrons Seen in Orbit*, „Nature”, vol. 401, s. 21-22.
- Jackson R. J.**, 2007, *Mechanizmy reakcji organicznych*, PWN, Warszawa.
- Jacob C.**, 2004, *The Use of Philosophy in Chemistry: Logical Aspects of Scientific Arguments in Everyday Research*, w: *Chemistry in the Philosophical Melting Pot*, D. Sobczykńska, P. Zeidler, E. Zielonacka-Lis (eds.), Peter Lang, Frankfurt am Main, s. 117-139.
- Jäkel O.**, 2003, *Metafory w abstrakcyjnych dziedzinach dyskursu*, Universitas, Kraków.
- Jenkins Z.**, 2003, *Do You Need to Believe in Orbitals to Use Them? Realism and the Autonomy of Chemistry*, „Philosophy of Science”, vol. 70, s. 1052-1062.
- Jodkowski K.**, 1984, *Teza o niewspółmierności w ujęciu Thomasa S. Kuhna i Paula K. Feyerabenda*, Wyd. UMCS, Lublin.
- Jodkowski K.**, 1986, *Nauka w oczach Feyerabenda*, w: *Czy sprzeczność może być racjonalna*, K. Jodkowski (red.), Wyd. UMCS, Lublin, s. 227-270.
- Jodkowski K.**, 1990, *Wspólnoty uczonych, paradygmaty i rewolucje naukowe*, Wyd. UMCS, Lublin.

- Jodkowski K.**, 1995, *Czy kauzalna teoria referencji jest lekarstwem na ontologiczną niewspółmierność*, w: *Między logiką a etyką. Prace ofiarowane profesorowi Leonowi Kojowi*, Wyd. UMCS, Lublin, s. 211-222.
- Kaluszyńska E.**, 1998, *Reductionism in Contemporary Science; Unity of Nature, Variety of Events*, „Foundations of Science”, vol. 3, no. 1, s. 133-150.
- Karpenko V.**, 2004, *The Chemical Background of Alchemical Recipes – Problems and Analysis*, w: *Chemistry in the Philosophical Melting Pot*, D. Sobczyńska, P. Zeidler, E. Zielonacka-Lis (eds.), Peter Lang, Frankfurt am Main, s. 315-347.
- Kazibut R.**, 2003, *Eksperymentalna praktyka badawcza nauki a zasada intersubiektywnej sprawdzalności*, w: *Homo experimentator*, D. Sobczyńska, P. Zeidler (red.), WN IF UAM, Poznań, s. 189-210.
- Keller E. F.**, 2000, *Models Of and Models For: Theory and Practice in Contemporary Biology*, „Philosophy of Science”, vol. 67, s. 72-86.
- Kęcki Z.**, 1975, *Podstawy spektroskopii molekularnej*, PWN, Warszawa.
- Klein U.**, 1999, *Techniques of Modeling and Paper-Tools in Classical Chemistry, w: Models as Mediators*, M. Morrison, M. Morgan (eds.), Cambridge University Press, Cambridge, s. 146-167.
- Klein U. (ed.)**, 2001, *Tools and Modes of Representation in the Laboratory Science*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Boston, Londyn.
- Kmita J.**, 1997, *Wizja świata nie odwołująca się do pojęcia odniesienia przedmiotowego, w: Od logiki do estetyki*, R. Kubicki, P. Zeidler (red.), Wydawnictwo Fundacji Humaniora, Poznań.
- Knorr Cetina K.**, 1981, *The Manufacture of Knowledge: An Essay on the Constructivist and Contextual Nature of Science*, Pergamon, Oxford.
- Knorr Cetina K.**, 1992, *The Couch, the Cathedral, and Laboratory: On Relationship between Experiment and Laboratory in Science*, w: *Science as Practice and Culture*, A. Pickering (ed.), The University of Chicago Press, Chicago, London.
- Knudsen S.**, 2003, *Scientific Metaphors Going Public*, „Journal of Pragmatics”, vol. 35, no. 8, s. 1247-1263.
- Kołos W.**, 1975, *Chemia kwantowa*, PWN, Warszawa.
- Kołos W., Sadlej J.**, 2007, *Atom i cząsteczka*, Wydawnictwa Naukowo-Techniczne, Warszawa.
- Komendziński T.**, 1996, *Znak i jego ciągłość. Semiotyka C. S. Peirce'a między precepcją i recepcją*, Wydawnictwo UMK, Toruń.
- Konarski J.**, 1984, *Czy cząsteczka chemiczna naprawdę ma kształt?*, „Wiadomości Chemiczne”, vol. 38, z. 8, s. 621-633.
- Konarski J.**, 1994, *Dynamiczny model cząsteczki*, „Wiadomości Chemiczne”, vol. 48, z. 11-12, s. 705-717.
- Konarski J.**, 1999, *Co dzisiaj wiemy o kształcie cząsteczki*, w: *Chemia: laboratorium myśli i działań*, D. Sobczyńska, P. Zeidler (red.), WN IF UAM, s. 137-141.
- Konarski J.**, 1999, *Kryzys redukcjonizmu?*, w: *Chemia: laboratorium myśli i działań*, D. Sobczyńska, P. Zeidler (red.), WN IF UAM, Poznań, s. 143-148.
- Kopczyński W., Trautman A.**, 1981, *Czasoprzestrzeń i grawitacja*, PWN, Warszawa.
- Kotarbińska J.**, 1990, *Pojęcie znaku*, w: idem, *Z zagadnień teorii nauki i teorii języka*, PWN, Warszawa, s. 152-244.

- Kowalewski M.**, 1988, *Uwagi do dyskusji 'Co to jest cząsteczka chemiczna'*, opublikowanej w *Wiadomościach Chemicznych* 3-4/1985, „Wiadomości Chemiczne”, vol. 42, z. 11-12, s. 939-945.
- Krajewski W.**, 1974, *Mechanicyzm i redukcjonizm*, w: *Z dziejów mechanicyzmu w fizyce i w chemii*, W. Krajewski (red.), Wydawnictwo im. Ossolińskich, Wrocław, Warszawa, Kraków, Gdańsk, s. 7-25.
- Krajewski W.**, 1995, „*Reprezentacjonizm i realizm*”, *Filozofia Nauki* nr 3 (11), s. 79-83.
- Kripke S.**, 1988, *Nazywanie a konieczność*, Instytut Wydawniczy PAX, Warszawa.
- Kuhn T. S.**, 1985, *Tradycje matematyczne a tradycje eksperymentalne w rozwoju nauk fizycznych*, w: idem, *Dwa bieguny*, PIW, Warszawa, s. 67-112.
- Kuhn T. S.**, 1991, *Możliwe światy w historii nauki*, „Literatura na Świecie”, nr 5 (238), s. 120-155.
- Kuhn T. S.**, 2001, *Struktura rewolucji naukowych*, Aletheia, Warszawa.
- Kuhn T.**, 2003, *Metafora w nauce*, w: idem, *Droga po 'Strukturze'*, Wydawnictwo Sic!, Warszawa.
- Lakoff G., Johnson M.**, 1988, *Metafory w naszym życiu*, PIW, Warszawa.
- Laudan L.**, 1984(a), *Explaining the Success of Science: Beyond Epistemic Realism and Relativism*, w: *Science and Reality: Recent Work in the Philosophy of Science*, J. T. Cushing, C. F. Delaney, G. M. Gutting (eds.), University of Notre Dame Press, Notre Dame, s. 83-105.
- Laudan L.**, 1984(b), *A Confutation of Convergent Realism*, w: *Scientific Realism*, J. Lepplin (ed.), University of California Press, Los Angeles, London, Berkeley, s. 218-249.
- Laudan R., Laudan L., Donovan A.**, 1992, *Testing Theories of Scientific Change*, w: *Scrutinizing Science*, A. Donovan, L. Laudan, R. Laudan (eds.), Johns Hopkins University Press, Baltimore, London, s. 3-44.
- Leatherdale W. H.**, 1974, *Analogy, Model and Metaphor in Science*, North-Holland Publishing Company, Amsterdam, Oxford.
- Lipton P.**, 1991, *Inference to the Best Explanation*, Routledge, London.
- Liotard J. F.**, 1997, *Kondycja ponowoczesna*, Aletheia, Warszawa.
- Ławniczak W.**, 1971(a), *Uwagi o pojęciu znaku ikonicznego*, „Studia Semiotyczne”, t. 2, s. 65-76.
- Ławniczak W.**, 1971(b), *O uzasadniającej roli analogii na przykładzie wnioskowań z zakresu historii sztuki*, Wydawnictwo Naukowe UAM, Poznań.
- Manzelli P.**, 1996, *To What Extent do we Understand Chemical Reactions?* w: *Philosophers in the Laboratory*, V. Mosini (ed.), Euroma, Modena, s. 133-142.
- March J.**, 1975, *Chemia organiczna. Reakcje, mechanizmy, budowa*, Wyd. Naukowo-Techniczne, Warszawa.
- Maxwell G.**, 1962, *The Ontological Status of Theoretical Entities*, w: *Minnesota Studies in the Philosophy of Science*, vol. III, H. Felgi, G. Maxwell (eds.), University of Minnesota Press, Minneapolis, s. 3-27.
- McKinney W. J.**, 1991, *Experimenting on and Experimenting with: Polywater and Experimental Realism*, „The British Journal for the Philosophy of Science”, vol. 42, s. 295-307.
- McMurry J.**, 2003, *Chemia organiczna*, PWN, Warszawa.
- McWeeny R.**, 1987, *Coulsona wiązania chemiczne*, PWN, Warszawa.
- Mejbaum W.**, 1995, *Wyjaśnianie i wyjaśnienie. Zarys teorii eksplanacji*, Biblioteka „Nowej Krytyki”, Szczecin.

- Merricks T.**, 1998, *Against the Doctrine of Microphysical Supervenience*, „Mind”, vol. 107, s. 59-71.
- Mierzecki R.**, 1985, *Historyczny rozwój pojęć chemicznych*, PWN, Warszawa.
- Morrison M., Morgan M.**, 1999, *Models as Mediating Instruments*, w: *Models as Mediators*, M. Morrison, M. Morgan (eds.), Cambridge University Press, Cambridge, s. 11-37.
- Mosini V.**, 1996, *Chemical Properties, Inherent Relations and the Structure of Science*, w: *Philosophers in the Laboratory*, V. Mosini (ed.), Euroma, Modena, s. 107-121.
- Mulckhuysen J. J.**, 1961, *Molecules and Models*, w: *The Concept and the Role of the Model in Mathematics and Natural and Social Sciences*, H. Freudenthal (ed.), Reidel Publishing Company, Dordrecht, s. 133-151.
- Musgrave A.**, 1989, *Noa's Ark – Fine for Realism*, „The Philosophical Quarterly”, vol. 39, s. 383-398.
- Muszyński Z.**, 2000, *Komunikacja i znaczenie. Semantyczny aspekt komunikacji*, Wyd. UMCS, Lublin.
- Nagel E.**, 1970, *Struktura nauki*, PWN, Warszawa.
- Nalewajski R.F.**, 2001, *Podstawy i metody chemii kwantowej*, PWN, Warszawa.
- Needham P.**, 2000, *What is Water? „Analysis”*, vol. 60, no. 1, s. 13-21.
- Newman W. R.**, 2006, *Atom and Alchemy: Chymistry and the Experimental Origins of the Scientific Revolution*, The Chicago University Press, Chicago.
- Nye M. J.**, 1993, *From Chemical Philosophy to Theoretical Chemistry*, University of California Press, Berkeley, Los Angeles, London.
- Ogilvie J.**, 1990, *The Nature of the Chemical Bond – 1990*, „Journal of Chemical Education”, vol. 67, s. 280-289.
- Oleś A.**, 1998, *Metody doświadczalne fizyki ciała stałego*, Wydawnictwa Naukowo-Techniczne, Warszawa.
- Pałubicka A.**, 1999, *Percepcja a kultura nowożytna*, w: *Tropem Nietzscheańskiego kłamstwa słów*, J. Kmita (red.), WN IF UAM, Poznań, s. 97-126.
- Pałubicka A.**, 2006, *Myślenie w perspektywie poręczności a pojęciowa konstrukcja świata*, Oficyna Wydawnicza Epigram, Bydgoszcz.
- Pascual J. I., Gómez-Herrero J., Rogero C., Baró A. M., Sánchez-Portal D., Artacho E., Ordejón P., Soler J. M.**, 2000, *Seeing Molecular Orbitals*, „Chemical Physics Letters”, vol. 321, s. 78-82.
- Patrick G.**, 2002, *Chemia organiczna*, PWN, Warszawa.
- Pauling L.**, 1960, *The Nature of the Chemical Bond* (third edition), Cornell University Press, Ithaca, New York.
- Pauling L.**, 1992, *The Nature of the Chemical Bond – 1992*, „Journal of Chemical Education”, vol. 69, s. 519-521.
- Pauling L., Pauling P.**, 1998, *Chemia*, PWN, Warszawa.
- Pelc J.**, 1982, *Wstęp do semiotyki*, Wiedza Powszechna, Warszawa.
- Perini L.**, 2005, *The Truth in Pictures*, „Philosophy of Science”, vol. 72, s. 262-285.
- Piela L.**, 2003, *Idee chemii kwantowej*, PWN, Warszawa.
- Pietruska-Madej E.**, 1975, *Metodologiczne problemy rewolucji chemicznej*, PWN, Warszawa.
- Plesch P. H.**, 1999, *On the Distinctness of Chemistry*, „Foundations of Chemistry”, vol. 1, no. 1, s. 6-15.

- Popper K.**, 1977, *Logika odkrycia naukowego*, PWN, Warszawa.
- Popper K.**, 1992, *Wiedza obiektywna*, PWN, Warszawa.
- Popper K.**, 1996, *Wszechświat otwarty. Argument na rzecz indeterminizmu*, Wydawnictwo Znak, Kraków.
- Popper K.**, 1999, *Nędz historycyzmu*, PWN, Warszawa.
- Primas H.**, 1983, *Chemistry, Quantum Mechanics and Reductionism. Perspectives in Theoretical Chemistry*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, Tokyo.
- Primas H.**, 1991, *Reductionism: Palaver without Precedent*, w: *The Problems of Reductionism in Science*, E. Agazzi (ed.), Kluwer, Dordrecht, s. 161-172.
- Pulaczewska H.**, 1999, *Aspects of Metaphor in Physics*, Max Niemeyer Verlag, Tübingen.
- Putnam H.**, 1984, *What is Realism? w: Scientific Realism*, J. Leplin (ed.), University of California Press, Los Angeles, London, Berkeley, s. 140-153.
- Putnam H.**, 1992, *Is it Necessary that Water is H₂O?* w: *The Philosophy*, A. J. Ayer, L. E. Hahn (eds.), Open Court, La Salle, Illinois, s. 429-454.
- Putnam H.**, 1998(a), *Wyjaśnianie i odniesienie przedmiotowe*, w: idem, *Wiele twarzy realizmu i inne eseje*, PWN, Warszawa, s. 61-92.
- Putnam H.**, 1998(b), *Znaczenie wyrazu „znaczenie”*, w: idem, *Wiele twarzy realizmu i inne eseje*, PWN, Warszawa, s. 93-184.
- Putnam H.**, 1998(c), *Dlaczego świat nie jest wyrobem gotowym*, w: idem, *Wiele twarzy realizmu i inne eseje*, PWN, Warszawa, s. 225-262.
- Putnam H.**, 1999, *Pragmatyzm. Pytania otwarte*, Aletheia, Warszawa.
- Ramsey J. L.**, 1997, *Molecular Shape, Reduction, Explanation and Approximate Concepts*, „Synthese”, vol. 111, no. 3, s. 233-251.
- Reuten G.**, 1999, *Knife-edge Caricature Modelling: the Case of Marx's Reproduction Schema*, w: *Models as Mediators*, M. Morrison, M. Morgan (eds.), Cambridge University Press, Cambridge, s. 196-240.
- Ricoeur P.**, 1989, *Metafora i symbol*, w: idem, *Język, tekst, interpretacja. Wybór pism*, PIW, Warszawa, s. 123-155.
- Rocke A. J.**, 1992, *Kekulé's Benzene Theory and the Apraisal of Scientific Theories*, w: *Scrutinizing Science*, A. Donovan, L. Laudan, R. Laudan (eds.), Johns Hopkins University Press, Baltimore, London, s. 145-161.
- Rodny N. I.**, 1977, *Problem nauki i jej rozwoju u chemików XIX stulecia*, „Człowiek i Światopogląd” nr 9 (146), s. 60-78.
- Rohrlich F.**, 1981, *Klasyczna teoria cząstek naładowanych*, PWN, Warszawa.
- Rothbart D.**, 1997, *Explaining the Growth of Scientific Knowledge. Metaphors, Models, and Meanings*, The Edwin Mellen Press, Lewinston, Queenstone, Lampeter.
- Rothbart D., Slayden S. W.**, 1999, *Epistemologia eksperymentu*, w: *Chemia: laboratorium myśli i działań*, D. Sobczyńska, P. Zeidler (red.), WN IF UAM, Poznań, s. 111-126.
- Sadlej J.**, 1977, *Półempiryczne metody chemii kwantowej CNDO, INDO, NDDO*, PWN, Warszawa.
- Sady W.**, 1980, *Procedury badawcze w naukach empirycznych*, „Studia Filozoficzne”, nr 5, s. 117-131.
- Sady W.**, 2000, *Spór o racjonalność naukową. Od Poincarégo do Laudana*. Fundacja Nauki Polskiej, Wrocław.

- Scerri E.**, 2000(a), *The Failure of Reduction and How to Resist the Disunity of the Sciences in the Context of Chemical Education*, „Science and Education”, vol. 9, s. 405-425.
- Scerri E.**, 2000(b), *Have Orbitals Really Been Observed?* „Journal of Chemical Education”, vol. 77, s. 1-3.
- Scerri E.**, 2001, *The Recently Claimed Observation of Atomic Orbitals and Some Related Philosophical Issues*, „Philosophy of Science”, vol. 68 (Proceedings), s. 76-88.
- Scerri E. R., McIntyre L.**, 1997, *The Case for the Philosophy of Chemistry*, „Synthese”, vol. 111, no. 3, s. 213-232.
- Schummer J.**, 1999, *W kierunku filozofii chemii*, w: *Chemia: laboratorium myśli i działań*, D. Sobczyńska, P. Zeidler (red.), WN IF UAM, Poznań, s. 173-202.
- Schummer J.**, 2004, *Why Do Chemists Perform Experiments*, w: *Chemistry in the Philosophical Melting Pot*, D. Sobczyńska, P. Zeidler, E. Zielonacka-Lis (eds.), Peter Lang, Frankfurt nad Menem, s. 395-410.
- Schwetlick K.**, 1975, *Kinetyczne metody badania mechanizmów reakcji*, PWN, Warszawa.
- Shapere D.**, 1977, *Scientific Theories and Their Domains*, w: *The Structure of Scientific Theories*, F. Suppe (ed.), University of Illinois Press, Urbana, Chicago, London, s. 518-565.
- Shapere D.**, 1982, *The Concept of Observation in Science and Philosophy*, „Philosophy of Science”, vol. 49, s. 485-525.
- Shapere D.**, 1985, *Observation and the Scientific Enterprise*, w: *Observation, Experiment, and Hypothesis in Modern Physical Science*, P. Achinstein, O. Hannaway (eds.), MIT Press, Cambridge Massachusetts, London, s. 21-45.
- Shapere D.**, 2000, *Testability and Empiricism*, w: *The Reality of Unobservable. Observability, Unobservability and Their Impact on the Issue of Scientific Realism*, E. Agazzi, M. Pauri (eds.), Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Boston, London, s. 153-164.
- Siemion I. Z.**, 1985, *Biostereochemia*, PWN, Warszawa.
- Sikora M.**, 1997, *Problem interpretacji w metodologii nauk empirycznych*, WN IF UAM, Poznań.
- Silverstein M., Webster F., Kiemle D.**, 2007, *Spektroskopowe metody identyfikacji związków organicznych*, PWN, Warszawa.
- Skalski T.**, 1991, *Teza o niewspółmierności teorii naukowych a nowa teoria oznaczania*, w: *Język, znaczenie, rozumienie i relatywizm*, Z. Muszyński (red.), Polskie Towarzystwo Semiotyczne i Wyd. UMCS, Warszawa, s. 47-63.
- Sobczyńska D.**, 1984, *Osobliwości chemii*, Wydawnictwo Naukowe UAM, Poznań.
- Sobczyńska D.**, 1993, *Sztuka badań eksperymentalnych*, Wydawnictwo Naukowe UAM, Poznań.
- Sobczyńska D.**, 1996, *Między teorią a praktyką eksperymentalną chemii. Dysonanse i współbrzmienia*, w: *Osobliwości przedmiotowo-metodologiczne w nauce*, J. Such, M. Szcześniak (red.), WN IF UAM, Poznań, s. 179-199.
- Sobczyńska D.**, 1998, *Instrumentarium badawcze chemii a globalne przemiany poznawcze w nauce*, w: *Z epistemologii wiedzy naukowej*, J. Such, M. Szcześniak (red.), WN IF UAM, Poznań, s. 185-203.
- Sobczyńska D.**, 1999, *Praktyka eksperymentalna chemii – tradycja i nowoczesność, swoistość i uniwersalność, teoria i aparatura*, w: *Chemia: laboratorium myśli i działań*, D. Sobczyńska, P. Zeidler (red.), WN IF UAM, Poznań, s. 89-110.

- Sobczyńska D., Zeidler P. (red.)**, 1994, *Nowy eksperymentalizm – teoretycyzm – reprezentacja*, WN IF UAM, Poznań.
- Sobczyńska D., Zeidler P. (red.)**, 1999, *Chemia: laboratorium myśli i działań*, WN IF UAM, Poznań.
- Strawiński W.**, 1997, *Jedność nauki, redukcja, emergencja*, Aletheia, Warszawa.
- Suarez M.**, 1999, *The Role of Models in the Application of Scientific Theories: Epistemological Implications*, w: *Models as Mediators*, M. Morrison, M. Morgan (eds.), Cambridge University Press, Cambridge, s. 168-195.
- Such J.**, 1974, *Relacja korespondencji a wynikanie*, w: *Zasada korespondencji w fizyce a rozwój nauki*, W. Krajewski, W. Mejbbaum, J. Such (red.), PWN, Warszawa, s. 65-114.
- Synowiecki A.**, 1974, *Tendencje mechanistyczne w rozwoju chemii nowożytnej*, w: *Z dziejów mechanicyzmu w fizyce i chemii*, W. Krajewski (red.), Wydawnictwo im. Ossolińskich, Wrocław, Warszawa, Kraków, Gdańsk, s. 91-143.
- Theobald D. W.**, 1977, *Uwagi o filozofii chemii*, „Człowiek i Światopogląd”, nr 9 (146), s. 138-154.
- Tomasik P.**, 1998, *Mechanizmy reakcji organicznych*, PWN, Warszawa.
- Trindle C.**, 1999, *Entering Modeling Space. An Apprenticeship in Molecular Modeling*, „Hyle”, vol. 5, no. 2, s. 127-142.
- Tworak Z.**, 1997, *O logicznych podstawach analogii przedmiotowej*, w: *Od logiki do estetyki*, R. Kubicki, P. Zeidler (red.), Wydawnictwo Fundacji Humaniora, Poznań, s. 27-33.
- van Brakel J.**, 1986, *The Chemistry of Substance and the Philosophy of Mass Terms*, „Synthese”, vol. 69, s. 291-324.
- van Brakel J.**, 1991, *Chemistry*, w: *Handbook of Metaphysics and Ontology*, H. Burkhardt, B. Smith (eds.), s. 146-147.
- van Brakel J.**, 1997, *Chemistry as the Science of the Transformation of Substances*, „Synthese”, vol. 111, no. 3, s. 253-282.
- van Brakel J.**, 2000(a), *Philosophy of Chemistry. Between the Manifest and the Scientific Image*, Leuven University Press, Leuven.
- van Brakel J.**, 2000(b), *The Nature of Chemical Substances*, w: *Of Minds and Molecules. New Philosophical Perspectives on Chemistry*, N. Bhushan, S. Rosenfeld, Oxford University Press, Oxford, s. 162-184.
- van Brakel J., Vermeeren H.**, 1981, *On the Philosophy of Chemistry*, „Philosophy Research Archives”, vol. 7, s. 1405-1456.
- van Fraassen B. C.**, 1980, *The Scientific Image*, Oxford University Press, Oxford.
- Vemulapalli G. K., Byerly H.**, 1999, *Remnants of Reductionism*, „Foundations of Chemistry”, vol. 1, no. s. 17-41.
- Vermeeren H.**, 1986, *Controversies and Existence Claims in Chemistry: The Theory of Resonance*, „Synthese”, vol. 69, s. 273-290.
- Wallis M.**, 1969, *O znakach ikonicznych*, w: *Rozprawy filozoficzne*, L. Gumański (red.), Towarzystwo Naukowe w Toruniu, Toruń, s. 387- 402.
- Weinger S.**, 1984, *Can Classical Chemistry be Reduced to Quantum Chemistry?* „Journal of Chemical Education”, vol. 61, s. 939-944.
- Weinger S.**, 1998, *Contemplating the Finger: Visuality and Semiotics of Chemistry*, „Hyle”, vol. 4, no. 1, s. 3-27.

- Westfall R.**, 1971, *The Construction of Modern Science*, John Wiley & Sons, New Jork, London, Sydney, Toronto.
- Woody A. I.**, 2000, *Putting Quantum Mechanics to Work in Chemistry: The Power of Diagrammatic Representation*, „Philosophy of Science”, vol. 67 PSA, s. 612-627.
- Woolgar S.**, 1988, *Science the Very Idea*, Routledge, London, New York.
- Woolley R. G.**, 1978, *Must a Molecule Have a Shape?* „Journal of the American Chemical Society”, vol. 100, s. 1073-1078.
- Wójcicki R.**, 1991, *Teorie w nauce*, Instytut Filozofii i Socjologii PAN, Warszawa.
- Wójcicki R.**, 1995/1996, *Theories, Theoretical Models, Truth; Part 2: Tarski's Theory of Truth and its Relevance for the Theory of Science*, „Foundation of Science”, vol. 1, no. 4, s. 471-516.
- Wysłouch S.**, 1991, *Znak ikoniczny jako symbol*, w: *Posługiwanie się znakami*, S. Żółkiewski, M. Hopfinger (red.), Wydawnictwo im. Ossolińskich, Wrocław, Warszawa, Kraków, s. 131-140.
- Zamecki S.**, 1978, *Chemia – nauka praktyczna czy teoretyczna*, „Człowiek i Światopogląd”, nr 10 (159), s. 150-161.
- Zamiara K.**, 1974, *Metodologiczne znaczenie sporu o status poznawczy teorii*, PWN, Warszawa.
- Zamiara K.**, 1978, *Filozofia odkryć naukowych Paula K. Feyerabenda*, w: *Relacje między teoriami a rozwój nauki*, W. Krajewski, E. Pietruska-Madej, J. M. Żytkow (red.), Ossolineum, Wrocław, s. 171-200.
- Zeidler P.**, 1992, *Spór o wartości poznawcze nauki doby postmodernizmu*, w: *Oblicza postmoderny*, A. Zeidler-Janiszewska (red.), Instytut Kultury, Warszawa, s. 63-71.
- Zeidler P.**, 1994, *Nowy eksperymentalizm a teoretycyzm. Spór o przedmiot i sposób uprawiania filozofii nauki*, w: *Nowy eksperymentalizm – teoretycyzm – reprezentacja*, D. Sobczyńska, P. Zeidler (red.), WN IF UAM, Poznań, s. 87-108.
- Zeidler P.**, 1995, *Zagadnienie równoważności empirycznej teorii a spór realistów z antyrealistami*, w: *O nauce i filozofii nauki. Księga poświęcona pamięci Jerzego Giedymina*, K. Zamiara (red.), Wydawnictwo Fundacji Humaniora, Poznań, s. 175-189.
- Zeidler P.**, 1996, *Status poznawczy modeli teoretycznych*, „Filozofia Nauki”, nr 3 (15), s. 73-86.
- Zeidler P.**, 1997, *Od modelu semantycznego do modelu teoretycznego w metodologii nauk empirycznych*, w: *Od logiki do estetyki*, R. Kubicki, P. Zeidler (red.), Wydawnictwo Fundacji Humaniora, Poznań, s. 53-68.
- Zeidler P.**, 1999(a), *O teoretyczności chemii – studium metodologiczne*, w: *Chemia: laboratorium myśli i działań*, D. Sobczyńska, P. Zeidler (red.), WN IF UAM, Poznań, s. 45-73.
- Zeidler P.**, 1999(b), *Problem „matematyczności nauk przyrodniczych” a spór o realizm*, w: *Między matematyką a przyrodoznawstwem*, E. Piotrowska, D. Sobczyńska (red.), WN IF UAM, Poznań, s. 119-136.
- Zeidler P.**, 2000(a), *O redukcji chemii do fizyki, czyli o pewnym przesądzie filozoficznej refleksji nad nauką*, w: *Między przyrodoznawstwem, matematyką a humanistyką*, E. Piotrowska, M. Szcześniak, J. Wiśniewski (red.), WN IF UAM, Poznań, s. 403-421.
- Zeidler P.**, 2000(b), *The Epistemological Status of Theoretical Model of Molecular Structure*, „Hyle”, vol. 6, s. 17-34.

- Zeidler P.**, 2001, *Semiotyczny i poznawczy status wzorów strukturalnych związków chemicznych a przyczynowa teoria oznaczania*, w: *Logos – rozum i logika*, P. Leśniewski, Z. Tworak (red.), WN IF UAM, Poznań, s. 119-140 [przekład angielski: Zeidler, 2004(a)].
- Zeidler P.**, 2002, *Chemia i filozofia. Czy istnieją specyficzne problemy filozoficzne chemii?* w: *Z filozofii przyrodoznawstwa i matematyki*, E. Piotrowska, J. Wiśniewski (red.), Wydawnictwo Fundacji Humaniora, Poznań, s. 153-168.
- Zeidler P.**, 2003, *Homo experimentator a spór o realizm laboratoryjny*, w: *Homo experimentator*, D. Sobczyńska, P. Zeidler (red.), WN IF UAM, Poznań, s. 105-137.
- Zeidler P.**, 2004(a), *The Semiotic Status of Structural Formulas and the Causal Theory of Reference*, w: *Chemistry in the Philosophical Melting Pot*, D. Sobczyńska, P. Zeidler, E. Zielonacka-Lis (eds.), Peter Lang, Frankfurt am Main, s. 151-169.
- Zeidler P.**, 2004(b), *Wyjaśnianie genetyczno-teoretyczne a praktyka eksplanacyjna w chemii organicznej*, „Nowa Krytyka”, nr 16, s. 175-196.
- Zeidler P.**, 2005(a), *Spór o stabilność praktyki badawczej nauk empirycznych*, w: *Nauka, humanistyka, człowiek*, J. Kmita, B. Kotowa, J. Sójka (red.), Wydawnictwo Naukowe UAM, Poznań, s. 139-155.
- Zeidler P.**, 2005(b), *Czy wytwory pracy badawczej uczonych obrazują świat? Wątpliwości antyrealisty*, w: *Filozoficzne i naukowo-przyrodnicze elementy obrazu świata 4*, A. Latawiec, G. Bugajak (red.), Wydawnictwo UK SW, Warszawa.
- Zeidler P.**, 2006, *Miejsce filozofii chemii w filozofii przyrodoznawstwa*, „Roczniki Filozoficzne”, t. LIV, nr 2, s. 313-333.
- Zeidler P.**, 2007, *Status ontologiczny orbitali atomowych i molekularnych w kontekście autonomii chemii*, „Przegląd Filozoficzny”, r. 16, nr 3, s. 191-201.
- Zeidler P.**, 2009, *Czy alchemia była protochemią?* w: *Pogranicza nauki. Protonauka – Paranauka – Pseudonauka*, W. J. Zon (red.), Wydawnictwo KUL, Lublin, s. 151-164.
- Zeidler P.**, 2010(a), *Czy można zaobserwować orbitale? O problemie obserwowalności i realności przedmiotów teoretycznych*, „Filozofia Nauki”, nr 4 (72), s. 5-22.
- Zeidler P.**, 2010(b), *Co, w jakim celu i w jaki sposób badają chemicy? Współczesne kontrowersje wokół przedmiotu i specyfiki metodologicznej praktyki badawczej chemii*, w: *Filozofia przyrody współcześnie*, M. Kuszyk-Bytniewska, A. Łukasik (red.), Wydawnictwo Universitas, Kraków, s. 111-130.
- Zeidler P.**, 2011, *Prawda i znaczenie w świetle metaforycznego charakteru aparatu konceptualnego nauk empirycznych*, w: *Prawda*, D. Leszczyński (red.), Wydawnictwo Uniwersytetu Wrocławskiego, Wrocław, s. 325-343.
- Zeidler P., Sobczyńska D.**, 1995/1996, *The Idea of Realism in the New Experimentalism and the Problem of the Existence of Theoretical Entities in Chemistry*, „Foundations of Science”, vol. 1, no. 4, s. 517-535.
- Zielonacka-Lis E.**, 1981, *Prawa jednoznaczne a formuły nomologiczne w chemii organicznej*, „Studia Metodologiczne”, z. 20, s. 93-113.
- Zielonacka-Lis E.**, 1994, *The Cognitive Status of the Reconstruction of Mechanisms in Modern Organic Chemistry. The Reconstruction of the Mechanism of the Acidic Hydrolysis of Nucleosides*, w: *Logic and Philosophy of Science in Uppsala*, D. Prawitz, D. Westersth (eds.), Kluwer Academic Publishers, Dordrecht-Boston-London, s. 483-498.

- Zielonacka-Lis E.**, 1996, *Wyjaśnianie naukowe na pograniczu biologii i chemii*, w: *Nowe tendencje w biologii molekularnej i inżynierii genetycznej oraz medycynie*, J. Barciszewski, K. Łastowski, T. Twardowski (red.), Wydawnictwo Sorus, Poznań, s. 25-31.
- Zielonacka-Lis E.**, 1999, *Kilka uwag o swoistości wyjaśniania naukowego w chemii*, w: *Chemia: laboratorium myśli i działań*, D. Sobczyńska, P. Zeidler (red.), WN IF UAM, Poznań, s. 75-88.
- Zielonacka-Lis E.**, 2003, *Filozoficzne koncepcje wyjaśniania naukowego a współczesna chemia*, WN IF UAM, Poznań.
- Zuo J. M., Kim M., O’Keeffe M., Spence J. C. H.**, 1999, *Direct Observation of d-orbital Holes and Cu-Cu bonding in Cu₂O*, „Nature”, vol. 401, s. 49-52.

Indeks nazwisk

- Achinstein P. 61, 72, 101, 154-157, 162, 171, 172, 179, 180, 198, 233, 241
Agazzi E. 234, 240, 241
Alder K. 67, 178, 180, 212, 217
Alder R. W. 181, 233
Al-Razi 49
Amann A. 73, 84, 233
Arrhenius S. 165
Artacho E. 239
Arystoteles 51, 185
Atkins P. W. 58, 168, 169, 233
Aykroyd W. R. 14, 233
- B**
Bacon F. 91
Bailer-Jones D. M. 187, 233
Baker R. 180, 181, 233
Bantz D. 165, 233
Baracca A. 15, 233
Barciszewski J. 245
Baró A. M. 239
Barrow G. M. 130, 233
Bechtel W. 61, 233
Beckermann A. 86, 87, 233
Berg J. M. 175, 233
Bergandy W. 57, 233
Berzelius J. J. 36, 165
Bhaskar R. A. 33, 42, 43, 48, 233
Bhushan N. 192, 233, 235, 242
Black M. 186-188, 190, 192, 233
Blackburn S. 86, 233
Bohr N. 165, 189, 195
Bojarski Z. 130, 233
Boniolo G. 122, 123, 234
Born M. 34, 70, 73, 85, 111, 112, 118, 127, 134, 193
Boyd R. N. 132, 198, 234
- Boyle R. 7, 14, 20, 51
Brock W. H. 42, 47, 48, 179, 182, 234
Brönsted J. N. 57, 61, 65, 208
Brown J. M. 180, 181, 233
Brown T. L. 38, 39, 189, 191, 234
Buchler J. W. 28, 234
Buczyńska-Garewicz H. 163, 164, 234
Bugajak G. 244
Butlerow A. 36, 69, 145, 171
Byerly H. 242
- C**
Campbell N. R. 19, 227
Carnap R. 19, 227
Carpentier B. K. 236
Carroll N. 190, 234
Cartwright N. 19, 24, 25, 60, 61, 67, 91-96, 100-107, 131, 135, 156, 159, 161, 204, 206, 212, 213, 227, 229, 234
Causey R. L. 83, 234
Cavendish H. 7, 14
Churchland P. M. 235
Chwedeńczuk B. 161, 234
Clapp L. B. 167, 234
Clark S. 234
Coffey P. 167, 234
Corey R. 175
Coulson C. A. 81, 234, 238
Crasnow S. L. 114, 234
Crick F. 175
Crombie A. C. 14, 20, 43, 230, 234
Cross C. B. 176, 234
Cushing J. T. 238
Czarnocka M. 96, 124, 234, 235
- D**
Dalton J. 15, 57
Davidson D. 86, 103, 235

- Dąbska I. 142, 235
Del Re G. 75, 235
Delaney C. F. 238
Demokryt 51
Devitt M. 132, 235,
Dewey J. 99, 161, 162, 164
Diamond JR. A. M. 61, 235
Diels O. P. 67, 178, 212, 217
Dirac P. A. 34
Donovan A. 233, 235, 240
Duhem P. 229
- Eliade M. 41
Empedokles 51
Epikur 204
Euklides 36
- Feyerabend P. K. 21, 138, 219-224, 229,
231, 235, 236, 243
Fierz-David H. E. 15, 59, 235
Fine A. 113, 114, 116, 235, 239
Fischer E. H. 171
Fitzgerald G. F. 102
Fleck L. 43, 219
Flohr H. 233
Fock W. 111, 112, 126
Fourier J. B. 130
Franklin A. 24, 62, 92, 96, 97, 99, 224, 235
Freudenthal H. 239
Fukui K. 35
- Galileusz 230, 231
Galison P. 61, 224-226, 229, 235
Geber 51
Giere R. 92, 97-99, 101, 157, 157, 160, 171,
235
Gigla M. 233
Giza P. 95, 224, 235
Gómez-Herrero J. 239
Goodwin W. 191, 235
Goudsmit S. 166
Grabińska T. 155, 202, 235
Grobler A. 94, 233
Grosholz E. R. 27, 66, 209, 235
Gutting G. M. 238
- Haack S. 185, 236
Hacking I. 7, 16-21, 24, 31, 33, 42-47, 50, 55,
62-64, 67, 68, 75, 91-96, 99, 104-107,
124-126, 135, 137, 161, 178, 180, 206,
212, 214, 220, 224-232, 235, 236
Hajduk Z. 13, 236
Hall R. 47, 236
Hammett L. 65, 209
Hannaway O. 241
Hanson N. R. 219
Hartree D. 111, 112, 126
Heisenberg W. 71, 87
Heitler W. 167
Helmholtz H. 165
Hempel C. G. 204, 206, 236
Hendry R. F. 81, 116, 236
Herfel W. E. 234, 236
Hesse M. 186-188, 192, 236
Higgs P. 125
Hintikka J. 234, 236
Hoffmann R. 23, 27, 28, 35, 66, 82, 145,
146, 177, 209, 211, 235, 236
Hooke C. 235
Hopfinger M. 243
Horgan T. 86, 236
Humphreys C. J. 119, 236
- Jackson R. J. 37, 177, 236
Jacob C. 28, 236
Jäkel O. 186, 236
Jenkins Z. 116, 134, 236
Jodkowski K. 138-141, 221, 222, 236, 237
Johnson M. 38, 39, 183, 184, 186, 188-192,
196, 197, 238
Jung C. 41
- Kałużyńska E. 237
Kant I. 15, 36, 58, 59, 234
Karpenko V. 49, 237
Kazibut R. 26, 237
Kekulé F. A. 36, 69, 70, 80, 166, 240
Keller E. F. 160, 237
Kelvin, Lord (Thomson W.) 102
Kemeny J. G. 78
Kęcki Z. 198, 237

- Kiemle D. 123, 241
Kim J. 233
Kim M. 245
Klein U. 26, 102, 237
Kmita J. 12, 103, 104, 237, 239, 244
Knorr Cetina K. 42-44, 48, 98, 237
Knudsen S. 199, 237
Kołos W. 81, 110, 115, 127, 131, 168, 237
Komendziński T. 163, 237
Konarski J. 9, 34, 69-71, 73, 84-89, 150, 237
Kopczyński W. 154, 237
Kotarbińska J. 142, 237
Kotowa B. 244
Kowalewski M. 144, 238
Krajewski W. 78, 113, 234, 236, 238, 242, 243
Kripke S. 137, 139, 140, 238
Kubicki R. 237, 243
Kuhn T. 19, 21, 63, 138, 148, 190, 219, 220, 227, 232, 236, 238
Kuszyk-Bytniewska M. 11, 244
Kwintylian 185
- Lakoff G. 38, 39, 183, 184, 186, 188-192, 196, 197, 238
Langmuir I. 166-168, 170, 172
Laszlo P. 27, 145, 146, 209, 236
Latawiec A. 244
Latour B. 43, 98
Laudan L. 61, 132, 133, 233, 235, 238, 240
Laudan, R. 233, 235, 238, 240
Lavoisier A. L. 7, 14, 49
Leatherdale W. H. 238
Leplin A. 234, 235, 238, 240
Leszczyński D. 244
Leśniewski P. 11, 244
Lewis G. N. 57, 61, 65, 69, 165-168, 170, 172, 178, 180, 195-197, 208
Liebig J. 36
Lipton P. 94, 238
London F. W. 167
Lorentz H. A. 63
Loschmidt J. 80
Lyotard J. F. 21, 222, 238
- Łastowski K. 245
Ławniczak W. 142, 238
Łukasik A. 11, 244
- Manzelli P. 238
March J. 65, 68, 208, 214-218, 238
Maxwell G. 121, 238
Maxwell J. C. 63
McIntyre L. 23, 74, 82, 86, 87, 89, 241
McKinney W. J. 68, 238
McMurry J. 35, 167, 178, 196, 197, 238
McWeeny R. 110, 115, 238
Mejbaum W. 201-208, 209-213, 217, 218, 238, 242
Mendelejew D. 15, 36, 58, 59, 74
Merricks T. 86, 239
Mierzecki R. 165, 239
Minkin V. I. 28, 66, 177, 211, 236
Morgan M. 25, 26, 92, 101-103, 107, 159, 234, 237, 239, 242
Morris Ch. 25, 26, 141, 145
Morrison M. 92, 101-103, 107, 159, 234, 237, 239, 240, 242
Mosini V. 233, 235, 238, 239
Mulckhuysen J. J. 58, 60, 69, 70, 239
Musgrave A. 113, 239
Muszyński Z. 139, 140, 239, 241
- Nagel E. 78, 123-125, 239
Nalewajski R. F. 128, 239
Needham P. 148, 149, 239
Newman M. S. 172
Newman W. R. 51, 239
Niiniluoto I. 234
Nye M. J. 239
- Ockham W. 28, 66, 177, 211, 236
Ogilvie J. 115, 127, 128, 134, 239
O'Keeffe M. 245
Oleś A. 130, 239
Oppenheim P. 59, 78, 155, 202, 203
Oppenheimer J. R. 34, 70, 73, 85, 111, 112, 118, 127, 134, 193
Ordejón P. 239

- Pałubicka A. 105, 106, 116, 117, 239
Paracelsus 49
Paradowski R. 182
Pascual J. I. 120, 239
Patrick G. 176, 179, 239
Pauling L. 29, 33, 128, 132, 168, 175, 182, 239
Pauling P. 29, 33, 239
Pauri M. 234, 241
Pearson R. 65, 209
Peirce Ch. S. 8, 38, 99, 141, 147, 163, 164, 181, 190, 199, 234, 237
Pelc J. 141, 145, 239
Périer F. 204
Perini L. 191, 239
Pickering A. 236, 237
Piela L. 127, 239
Pietruska-Madej E. 239, 243
Piotrowska E. 11, 243, 244
Plesch P. H. 26, 50, 239
Popper K. 22, 43, 56, 57, 77, 78, 89, 201, 219, 222, 223, 240
Prawitz D. 244
Primas H. 34, 240
Pristley J. 7, 14
Pulaczewska H. 240
Putnam H. 99, 132, 137, 138, 139, 140, 148, 149, 151, 190, 240
- Quine W. V. O. 104, 249
- Ramsey J. L. 73, 84, 85, 240
Reuten G. 102, 240
Ricoeur P. 186, 240
Rocke A. J. 61, 240
Rodny N. I. 36, 58, 240
Rogero C. 239
Rohrlich F. 56, 240
Rosenfeld S. 192, 233, 235, 242
Rothbart D. 123, 192, 240
Ryle G. 45
- Sadlej J. 81, 127, 131, 237, 240
Sady W. 155, 221, 240
Sánchez-Portal D. 239
- Scerri E. 23, 74, 82, 86, 87, 89, 120, 133, 134, 241
Schrödinger E. 23, 70, 73, 81, 110, 111, 118, 126, 167
Schummer J. 27, 30-32, 37-39, 55, 59, 66, 73-75, 89, 146-148, 191, 209, 241
Schwetlick K. 61, 66, 210, 241
Sammelweis I. P. 203, 204
Shannon C. 121
Shapere D. 74, 121-123, 241
Sheppard H. 41
Shomar T. 25, 100, 159, 234
Siemion I. Z. 172-174, 194, 241
Sikora M. 224, 241
Silverstein M. 123, 241
Skalski T. 139, 241
Slayden S. W. 123, 240
Sobczyńska D. 9, 11, 21, 23, 25, 39, 59, 62, 68, 95, 125, 178, 206, 214, 217, 224, 232, 234-237, 240-245
Soler J. M. 239
Sójka J. 11, 12, 244
Spence J. C. H. 245
Strawiński W. 78, 83, 84, 242
Stróż K. 233
Stryer L. 175, 233
Stuart H. A. 70
Suarez M. 25, 100, 102, 159, 234, 242
Such J. 79, 241, 242
Surowiec M. 233
Synowiecki A. 80, 212, 242
Szcześniak M. 11, 241, 243
- Taft R. W. 65, 209
Tarski A. 60, 70, 243
Tempczyk M. 83
Theobald D. W. 15, 54, 59, 60, 89, 242
Thomson J. 165
Tomasik P. 65, 66, 208-210, 242
Toulmin S. 219
Trautman A. 154, 237
Trindle C. 146, 242
Twardowski T. 245
Tworak Z. 11, 158, 242, 244
Tymoczko J. L. 175, 233

- Uhlenbeck G. 166
- van Brakel J. 15, 30, 34, 39, 64, 114, 128, 148, 149, 207, 242
- van der Waals J. 175
- van Fraassen B. C. 91, 93-98, 104, 113, 135, 206, 235, 242
- van't Hoff J. H. 69
- Vemulapalli G. K. 242
- Vermeeren H. 64, 70, 207, 242
- Wallis M. 141, 242
- Watson J. D. 175
- Weaver W. 121
- Webster F. 123 241
- Weininger S. 72, 73, 82-84, 145, 242
- Westerstahl D. 244
- Westfall R. 243
- Wiśniewski J. 11, 243
- Wittgenstein L. 146
- Woodward R. 35, 146
- Woody A. I. 106, 116, 134, 243
- Woolgar S. 43, 98, 158, 243
- Woolley R. G. 69, 70, 84, 243
- Wójcicki R. 156, 243
- Wundt W. 36
- Wurtz A. 36
- Wysłouch S. 143, 243
- Zamecki S. 75, 243
- Zamiara K. 221, 243
- Zeidler J. 9
- Zeidler P. 11, 16, 17, 21, 22, 24, 25, 27, 33, 34, 39, 42, 44, 57, 62, 68, 69, 75, 79, 82, 84, 95, 99, 101, 107, 109, 116, 125, 132, 134, 149, 153, 156, 159, 170, 174, 177, 178, 181, 185, 188, 191-193, 197, 206, 207, 209, 211, 214, 217, 222, 224, 234-237, 240-245
- Zeidler-Janiszewska A. 243
- Zielonacka-Lis E. 9, 11, 28, 59, 67, 176, 206, 211, 234, 236, 237, 241, 244, 245
- Zon W. J. 11, 244
- Zuo J. M. 119, 120, 129, 131, 245
- Żytkow J. M. 243

Indeks rzeczowy

- alchemia 41-42, 46-52
- anarchizm metodologiczny 221-224
- antyrealizm 91-96
- antyredukcjonizm 88-89
- aparatura badawcza 19, 23, 243
- aromatyczne podstawienie nukleofilowe 214
- artykulacja teorii 19
- asymetria cząsteczki 194
- asymetryczny atom węgla 194
- badania naukometryczne nad chemią 30-32

- benzyn 125, 178, 216-217
- brzytwa Ockhama w chemii 66-67, 211

- chemia, definicje 29-30, 33, 36
- chiralność 194

- egzoteryczne składniki praktyki alchemicznej 46-50
- ezoteryczne składniki praktyki alchemicznej 46, 50-51
- eliksir życia 42
- enantjomery (izomery optyczne) 172, 194
- esencjalizm w chemii 140

- filozofia chemii 14-17
- filozofia przyrodznawstwa 13-14
- filozofia przyrody 13-15
- formuły nomologiczne w chemii 59
- funkcje modeli teoretycznych 101-103

- hipoteza egzystencjalna 124
- „horror” reprezentacji 157-158

- hybrydyzacja orbitali 129, 172-173

- inwersja konfiguracji 172-173
- intersubiektywność chemii 26-27
- interpretacja języka
 - literalna 184-185
 - metaforyczna 184-185
 - semantyczna 104, 156
- identyfikacja związków chemicznych 68
- izomery
 - konfiguracyjne 172-173, 194
 - konformacyjne 172
 - optyczne (enantjomery) 172, 194

- kalkulacja w chemii 64-68, 210
- kamień filozoficzny 42
- kinetyka chemiczna 66
- klasyczna koncepcja metafory 185-186
- klasyfikacja w chemii 73-75
- kompleks przejściowy 214
- koncepcja metafory
 - interakcyjna 186-187
 - klasyczna 185-186
 - kognitywna (Lakoffa & Johnsona) 188-190
- konstruktywny empiryzm 96
- kreowanie zjawisk 95
- kryteria istnienia przedmiotów teoretycznych 121, 124-125
- kształt cząsteczki 69, 87-88

- laboratorium w ujęciu
 - Bhaskara 43
 - Hackinga 17-20, 43-44, 225-230
 - Knorr Cetiny 44-45

- laboratoryjny styl badań naukowych 20, 230-231
- literalna interpretacja języka 184
- manipulacyjne kryterium istnienia** 68, 99
- manipulowanie 44, 95, 99, 104, 134-135
- mechanicyzm w chemii 79-80
- mechanizm
- benzynowy 215-217
 - nukleofilowego podstawienia halogenków arylowych 178, 214-215
 - reakcji hydrolizy β -laktonu w środowisku kwaśnym 180
 - reakcji przyłączania fluorowców do alkenów cyklicznych 178-179
 - reakcji związków karbonylowych z silnymi zasadami 196
- mechanizmy reakcji chemicznych 36-37, 176-182, 210-212
- metafora jako model teoretyczny 186-187
- metafory edukacyjne 198-199
- metafory w chemii 192-199
- metoda *ab initio* 111
- metody chemii kwantowej
- orbitali molekularnych 81-82, 168-169
 - wiązań walencyjnych 81-82, 167-168
- metoda dyfrakcji
- promieni X 129-132
 - zbieżnej wiązki elektronów 129-132
- metody konstrukcji molekularnej funkcji falowej
- LCAO (Linear Combination of Atomic Orbitals) 112
 - pola samouzgodnionego 111-112
- mezony K 96-97
- mikro-konstruktywizm w socjologii nauki 44-45
- mikroredukcja chemii do fizyki 83-85
- model oscylatora harmonicznego w chemii 198
- model
- teoretyczny w ujęciu Achinsteina 154-159
 - teoretyczny w ujęciu Morrison i Morgan 101-103, 159-160
 - teoretyczny w ujęciu Keller 160
- modele materialne struktur cząsteczek
- cylindryczne 175
 - czaszowe 175
 - drutowe 175
 - kulowo-prętowe 175
- modele teoretyczne
- informacyjne 159
 - strukturalne 157-159
- modele teoretyczne struktury cząsteczki 69-73, 84-85, 170-175
- model wyjaśniania Hempla-Oppenheima 155-156, 202-204
- modele wiązań chemicznych 165-170
- modelowanie teoretyczne w chemii 25-26, 68-73, 170-175
- molekularna mechanika kwantowa 81-83, 110-113, 126-131
- myślenie
- metafizyczno-teoretyczne 117-118
 - spontaniczno-praktyczne 116-117
- naturalna postawa ontologiczna** 113-114
- nauka laboratoryjna 17-20, 43-44, 225-230
- niewspółmierność teoretyczna 222
- nowy eksperymentalizm 62-64, 91-92
- obserwowalność**
- bezpośrednia 121-122
 - orbitali 119-120, 129-132
 - pośrednia 122-123
- orbitale atomowe i molekularne 82, 110-113, 126-128
- podstawienie nukleofilowe jednocząsteczkowe** 214-215
- pracownia alchemiczna 47-50
- praktyka laboratoryjna 116-118

- prawa nauki w chemii
- fenomenologiczne (empiryczne) 24, 60
 - ściśle ogólne (fundamentalne) 24, 59-60, 155-156
- przedmiot
- eksperymentatora 67, 94-95
 - teoretyka 67, 125
- przybliżenie
- adiabatyczne 111
 - Borna-Oppenheimera 34, 111-112
 - jednoelektronowe 111
- przedmiotowe składniki praktyki laboratoryjnej 19-20, 227
- realizm
- konwergentny 132-133
 - laboratoryjny 24-25, 96-99
 - metafizyczny 138-140
 - strukturalny 157-159
- reakcje
- stereospecyficzne Dielsa-Aldera 67, 178
 - reakcje pericykliczne 35
- redukcja chemii do fizyki 22-23, 34-35, 77-79, 82-83
- relacja superweniencji w chemii 86-88
- rewolucja aparaturowa w chemii 232
- rewolucje w nauce 219-220
- rozkład gęstości elektronowej 129-132
- rozwiązywanie sytuacji problemowych 161-164
- równanie falowe Schrödingera 126
- semiotyka chemii 38
- skrzyżka narzędziowa nauki 100-101, 159
- spektroskopia w podczerwieni 198
- spekulacja w chemii 64-68
- stany energetyczne cząsteczek
- elektronowe 70
 - rotacyjne 70
 - wibracyjne 70
- status ontologiczny
- orbitali 113-118, 126-128, 133-135
 - przedmiotów teoretycznych 124-126
- status poznawczy
- metafor 190-191
 - modeli teoretycznych 100-103
 - wzorów strukturalnych 149-151, 174
- status semiotyczny
- metafor 190-191
 - modeli teoretycznych 157, 163
 - wzorów strukturalnych 145-151, 171
- stereochemia reakcji 178-179
- struktura cząsteczek 144-151
- struktura DNA 174-175
- struktura helisy białka 175
- styl badań laboratoryjnych 20, 230
- szywna (przyczynowa) teoria oznaczania w chemii 144-151
- teoretycyzm w nauce 56-57
- teoretyczne składniki praktyki laboratoryjnej 18-19, 227
- teorie w chemii 57-62
- teorie molekularnej mechaniki kwantowej
- funkcjonałów gęstości elektronowej 131
 - orbitali molekularnych 81-82, 110-113, 126-128, 168-169
 - symetrii orbitali molekularnych 35
 - wiązań walencyjnych 81-81, 165-166, 195-196
- teorie oznaczania
- deskrypcjonistyczna 138-139
 - szywna (przyczynowa) teoria oznaczania 138-141
- teorie struktury cząsteczek
- Butlerowa 69, 145
 - Kekulégo 69-70

- teza
- o niewspółmierności ontologicznej 140
 - o niestabilności nauk empirycznych 221-224
 - o stabilność nauk laboratoryjnych 21, 224-233
- trzeci dogmat empiryzmu 103-104
- u**przedmiotowanie pojęć teoretycznych 103-107
- ‘ustalone podejście’ do teorii naukowej 219
- w**iązanie chemiczne
- kowalencyjne (walencyjne) 82, 165-166
 - jonowe 165
- wiązanie wodorowe 173-174
- widma oscylacyjne 198
- „wiedza jak” 37, 45
- „wiedza, że” 37, 45
- wnioskowanie abdukcyjne 133
- woda (znaczenie terminu) 139-140, 148-149
- wyjaśnianie
- nomologiczno-dedukcyjne 155-156, 202-204
 - genetyczno-teoretyczne 204-207
 - przyczynowe 67-68, 212
- wzory
- projekcyjne Newmana 172
 - strukturalne 144-151, 171-175, 181, 196
 - rzutowe Fischera 171-172
- z**asada nieoznaczoności Heisenberga 87
- zasada pragmatyczna Peirce’a 163-164
- zasada wnioskowania
- do najlepszego wyjaśnienia 94-95
 - do najbardziej prawdopodobnej przyczyny 94-95
- znaki ikoniczne 141-143

**PUBLIKACJE WYDAWNICTWA NAUKOWEGO INSTYTUTU FILOZOFII
Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu**

Seria: PISMA FILOZOFICZNE

1. Tadeusz Buksiński (red.), *Szkice z filozofii działań*, 1991
2. Jan Such (red.), *Poszukiwanie pewności i jego postmodernistyczna dyskwalifikacja*, 1992
3. Roman Kubicki, Jacek Sójka, Paweł Zeidler, *Problem destrukcji pojęcia prawdy*, 1992
4. Tadeusz Buksiński (red.), *Prawda i wartości w poznaniu humanistycznym*, 1992
5. Jan Such, Janusz Wiśniewski (red.), *Teoria i eksperyment*, 1992
6. Bolesław Andrzejewski (red.), *Language and Interpretation*, 1992
7. Stanisław Cieniawa, *Świat bez ateistów i miłość bez kłamstwa*, 1992
8. Jan Such (red.), *Zur Fragen der heutigen Theorie und Methodologie der wissenschaftlichen Erkenntnis*, 1992
9. Paweł Zeidler, *Spór o status poznawczy teorii*, 1993
10. Tadeusz Buksiński (red.), *Wolność a racjonalność*, 1993
11. Barbara Kotowa, Jan Such (red.), *Z filozoficznej problematyki badań nad rozwojem*, 1993
12. Janusz Goćkowski, Marek Sikora (red.), *Modele nauki*, 1993
13. Stanisław Cieniawa, *Mit raju i raj mitu*, 1993
14. Tadeusz Buksiński, *Essays in the Philosophy of History*, 1994
15. Danuta Sobczyńska, Paweł Zeidler (red.), *Nowy eksperymentalizm–teoretycyzm–reprezentacja*, 1994
16. Ewa Piotrowska, Jan Such (red.), *Filozoficzne problemy rozwoju nauk matematyczno-przyrodniczych*, 1994
17. Gerhard Funke, *Hermeneutyka i język*, 1994
18. Tadeusz Buksiński (red.), *Filozofia w dobie przemian*, 1994
19. Anna Pałubicka (red.), *Szkice z filozofii kultury*, 1994
20. Marek Kwiek, *Rorty a Lyotard. W labiryntach postmoderny*, 1994
21. Dane Gordon, *Filozofia i wizja*, 1994
22. Jerzy Kmita, *Jak słowa łączą się ze światem*, 1995
23. Piotr Orlik, *Fenomenologia świadomości aksjologicznej*, 1995
24. Danuta Sobczyńska, Ewa Zielonacka-Lis, Jerzy Szymański (red.), *Teoria – technika – eksperyment*, 1995
25. Tadeusz Buksiński (red.), *Wspólnotowość wobec wyzwań liberalizmu*, 1995

26. Ernst Cassirer, *Symbol i język*, 1995
27. Barbara Kotowa, Jan Such (red.), *Kulturowe konteksty poznania*, 1995
28. Hermann Schmitz, *Nowa fenomenologia*, 1995
29. Włodzimierz Heller (red.), *Świat jako proces*, 1996
30. Jan Such, Janusz Wiśniewski (red.), *Kulturowe uwarunkowania wiedzy*, 1996
31. Bolesław Andrzejewski (red.), *Symbol a rzeczywistość*, 1996
32. Reiner Wiehl, *Fenomenologia, dialektyka, hermeneutyka*, 1996
33. Janusz Goćkowski, Przemysław Kisiel (red.), *Oglądy i obrazy świata społecznego*, 1996
34. Tadeusz Buksiński, *Racjonalność współdziałań*, 1996
35. Marek Kwiek, *Rorty's Elective Affinities. The New Pragmatism and Postmodern Thought*, 1996
36. Anna Pałubicka (red.), *Kulturowe konteksty idei filozoficznych*, 1997
37. Bolesław Andrzejewski (red.), *Tradycja i postęp*, 1997
38. Honorata Korpikiewicz, Ewa Piotrowska (red.), *Alternatywy i przewartościowania we współczesnej filozofii nauk*, 1997
39. Marek Sikora, *Problem interpretacji w metodologii nauk empirycznych*, 1997
40. Tadeusz Buksiński (red.), *Rozumność i racjonalność*, 1997
41. Seweryn Dziamski, *Trzy szkice o wartości praktyki*, 1997
42. Seweryn Dziamski, *Aksjologia. Wstęp do filozofii wartości*, 1997
43. Piotr Leśniewski, *Zagadnienie sprowadzalności w antyredukjonistycznych teoriach pytań*, 1997
44. Jerzy Kmita, *Jak słowa łączą się ze światem* (II wyd.), 1998
45. Ewa Zielonacka-Lis (red.), *Nauki pogranicza*, 1998
46. Jan Such, Małgorzata Szcześniak, Antoni Szczuciński, *Filozofia kosmologii*, 1998
47. Barbara Kotowa, Janusz Wiśniewski (red.), *Racjonalność a nauka*, 1998
48. Marek Kwiek (red.), *Nie pytajcie mnie, kim jestem. Michel Foucault dzisiaj*, 1998
49. Jan Such, Małgorzata Szcześniak (red.), *Z epistemologii wiedzy naukowej*, 1998
50. Tadeusz Buksiński (red.), *Idee filozoficzne w polityce*, 1998
51. Bolesław Andrzejewski, *Esbozos sobre la filosofía polaca*, 1998
52. Mariusz Moryń, *Transcendentalizm, intencjonalność, język. O Husserlowskiej koncepcji sensu*, 1998
53. Jarema Jakubowski, *Racjonalność a normatywność działań (Alfred Schutz a Talcott Parsons)*, 1998
54. Norbert Leśniewski, *O hermeneutyce radykalnej*, 1998
55. Ryszard Liberkowski (red.), *Filozofia a polityka*, 1998
56. Marek Kwiek, *Dylematy tożsamości. Wokół autowizerunku filozofa w powojennej myśli francuskiej*, 1998

57. Ewa Piotrowska, Danuta Sobczyńska (red.), *Między matematyką a przyrodoznawstwem*, 1999
58. Danuta Sobczyńska, Paweł Zeidler (red.), *Chemia: laboratorium myśli i działań*, 1999
59. Jan Wawrzyniak (red.), *Dynamika praktyki moralnej i jej etyczne racjonalizacje*, 1999
60. Jerzy Kmita (red.), *Tropem Nietzscheańskiego kłamstwa słów*, 1999
61. Roman Kozłowski, Piotr W. Juchacz (red.), *Przeszłość i przyszłość filozofii*, 1999
62. Ewa Nowak-Juchacz, *Hegel Alexandre Kojève'a, czyli o filozoficznym jakobinizmie*, 1999
63. Dariusz Dobrzański, *Interpretacja jako proces nadawania znaczeń. Studium z etnometodologii*, 1999
64. Andrzej P. Kowalski, *Symbol w kulturze archaicznej*, 1999
65. Roman Kozłowski (red.), *O filozofii dzisiaj*, 2000
66. Ewa Piotrowska, Honorata Korpikiewicz (red.), *Matematyka – język – przyroda*, 2000
67. Roman Kozłowski (red.), *Filozofia Kanta i jej recepcja*, 2000
68. Jan Such, Małgorzata Szcześniak, Antoni Szczuciński, *Filozofia kosmologii* (II wyd.), 2000
69. Seweryn Dziamski, *Wykłady z nauki o moralności* (II wyd.), 2000
70. Włodzimierz Heller, Ryszard Liberkowski (red.), *Wola sprawiedliwości*, 2000
71. Włodzimierz Heller, *Hannah Arendt: źródła pluralizmu politycznego*, 2000
72. Monika Bakke, *Ciało otwarte. Filozoficzne reinterpretacje kulturowych wizji cielesności*, 2000
73. Jan Wawrzyniak, *Teoretyczne podstawy neonaturalistycznej bioetyki środowiskowej*, 2000
74. Honorata Korpikiewicz, *Wolność, nieświadomość i prawa fizyki*, 2000
75. Ewa Piotrowska, Małgorzata Szcześniak, Janusz Wiśniewski (red.), *Między przyrodoznawstwem, matematyką a humanistyką*, 2000
76. Andrzej Wawrzynowicz, *Hegel i Adorno – opozycja dwóch koncepcji myślenia dialektycznego i dwóch wykładni racjonalności*, 2001
77. Tadeusz Buksiński, *Moderność*, 2001
78. Jerzy Kmita (red.), *Czy metamorfoza magiczna rekompensuje brak symbolu?*, 2001
79. Piotr Leśniewski, Zbigniew Tworak (red.), *Logos – rozum i logika*, 2001
80. Tadeusz Buksiński (red.), *Doświadczenie*, 2001
81. Jan Such, Małgorzata Szcześniak, *Ontologia przyrodnicza*, 2001
82. Roman Kubicki, *Ani być, ani mieć? Trzy szkice z filozofii pamięci*, 2001
83. Seweryn Dziamski, *O świadomości aksjologicznej podmiotu. Studium krytyki pozytywnej*, 2002
84. Artur Dobosz, *Tożsamość metamorficzna a komunikacja językowa*, 2002

85. Tadeusz Buksiński (red.), *Postkomunistyczne transformacje*, 2002
86. Ryszard Liberkowski, Włodzimierz Wilowski (red.), *O wyobraźni*, 2003
87. Ewa Zielonacka-Lis, *Filozoficzne koncepcje wyjaśnienia naukowego a współczesna chemia*, 2003
88. Danuta Sobczyńska, Paweł Zeidler (red.), *Homo experimentator*, 2003
89. Mariusz Moryń, *Wyczulenie i subiektywność. O nowej fenomenologii Hermanna Schmitza*, 2004
90. Piotr W. Juchacz, *Sokrates. Filozofia w działaniu*, 2004
91. Dariusz Dobrzański, Jarema Jakubowski, Andrzej Wawrzynowicz (red.), *Kraje Europy Środkowowschodniej a globalizacja*, 2005
92. Edward Niesyty, *Miejsce i rola personalistycznej koncepcji społeczeństwa demokratycznego w humanizmie integralnym Jacques'a Maritaina*, 2005
93. Ryszard Liberkowski, Włodzimierz Wilowski (red.), *O życiu*, 2005
94. Tadeusz Buksiński, *Współczesne filozofie polityki*, 2006
95. Tomasz Rzepiński, *Teza o niedookreśleniu teorii przez dane doświadczenia*, 2006
96. Krzysztof Łastowski, Paweł Zeidler (red.), *Filozofia wobec nauki, człowieka i społeczeństwa. Wykłady z filozofii dla młodzieży, t. III*, 2006
97. Mikołaj Domaradzki, *O subiektywności prawdy w ujęciu Sorena Aabye Kierkegaarda*, 2006
98. Danuta Sobczyńska, Antoni Szczuciński (red.), *Świat natury i świat techniki*, 2006
99. Piotr W. Juchacz, *Deliberacja – Demokracja – Partycypacja. Szkice z teorii demokracji ateńskiej i współczesnej*, 2006
100. Dariusz Dobrzański, Andrzej Wawrzynowicz (red.), *Idea solidarności w kontekstach filozoficzno-historycznych*, 2006
101. Tadeusz Buksiński, Krzysztof Bondyra, Jarema Jakubowski (red.), *Demokracja – samorządność – prawo*, 2006
102. Marek Sikora, *Problem reprezentacji poznawczej w nowożytnej i współczesnej refleksji filozoficznej*, 2007
103. Karolina M. Cern, *Koncepcja czasu wczesnego Heideggera*, 2007
104. Ryszard Liberkowski, *Przyczynek do fenomenologii życia*, 2007
105. Krzysztof Brzechczyn, Marek Nowak (red.), *O rewolucji. Obrazy radykalnej zmiany społecznej*, 2007
106. Sławomir Leciejewski, *Rola zasad antropicznych w rozwoju współczesnej kosmologii. Studium metodologiczne*, 2007
107. Danuta Michałowska, *Drama w edukacji*, 2008
108. Tadeusz Buksiński, *Prawo a władza polityczna*, 2009
109. Ryszard Liberkowski, *Fenomen wyobrażeń. Eseje 1*, 2009
110. Edward Niesyty, *Jacques Maritain's Personalist Concept of Democratic Society*, 2009

111. Anna Leśniewska, *Sumienie filozofii. Artur Schopenhauer*, 2009
112. Tadeusz Buksiński, Elżbieta Pakszys (red.), *W kregu filozofii nauki, kultury i społeczeństwa*, 2009
113. Marek Woszczek, *Ukryta całość przyrody a mikrofizyka*, 2010
114. Tadeusz Buksiński (red.), *Filozofia na Uniwersytecie w Poznaniu. Jubileusz 90-lecia*, 2010
115. Włodzimierz Wilowski, *Metafizyka cierpienia. Od Arystotelesa, poprzez myśl indyjską, do myśli chrześcijańskiej*, 2010
116. Krzysztof Przybyszewski, *Prawa człowieka w kontekstach kulturowych*, 2010
117. Tadeusz Buksiński, *Publiczne sfery i religie*, 2011
118. Krzysztof Nowak, *Status pojęcia pracy w teorii krytycznej i teorii ekonomii*, 2011
119. Anna Ziółkowska, *Rola świadomości w konstyтуowaniu człowieka. Roman Ingarden a Paul Ricoeur*, 2011
120. Andrzej W. Nowak, *Podmiot, system, niezależność*, 2011
121. Mikołaj Domaradzki, Emanuel Kulczycki, Michał Wendland (red.), *Język. Rozumienie. Komunikacja*, 2011
122. Tadeusz Buksiński, *Transformations and continuations. The case of Central-Eastern Europe*, 2011

**Seria: COOPERA – MIĘDZYNARODOWE STUDIA Z FILOZOFII
I PSYCHOLOGII ŻYCIA DEMOKRATYCZNEGO**

redakcja Ewa Nowak

1. Tadeusz Buksiński, Ewa Nowak-Juchacz, Wolfgang H. Schrader, *Beiträge zur philosophischen Partnerschaft Deutschlands und Polens. Siegen – Poznań / Przyczynki do filozoficznego partnerstwa Niemiec i Polski. Siegen – Poznań*, 2000
2. Ewa Nowak-Juchacz (red.), *Transcendentalna filozofia praktyczna*, 2000
3. Piotr W. Juchacz, Roman Kozłowski (red.), *Filozofia a demokracja*, 2001
4. Wilhelm Ostwald, *Filozofia nauk przyrodniczych*, 2002
5. Wilhelm Ostwald, *Wybór pism z energetyki, monizmu, etyki, krytyki religii i reformy nauki*, 2002
6. Karolina Cern, Piotr W. Juchacz, Ewa Nowak (red.), *Edukacja demokratyczna*, 2009
7. Karolina Cern, Piotr W. Juchacz, Ewa Nowak (red.), *Etyka życia publicznego*, 2009

Seria: PROBLEMY / DYSKUSJE

redakcja Piotr Orlik

- Tom I: *Rozdroża i ścieżki wrażliwości*, 2000
- Tom II: *Meandry podmiotowości*, 2001
- Tom III: *Światłocienie świadomości*, 2002
- Tom IV: *W gąszczu znaków*, 2004
- Tom V: *Magma uczuć*, 2005
- Tom VI: *Całość – wizje, pejzaże, teorie*, 2006
- Tom VII: *Wolność – szkice i studia*, 2007
- Tom VIII: *Ku źródłom wartości*, 2008
- Tom IX: *Wobec nicości*, 2010
- Tom X: *Aporie czasu*, 2011

Filozoficzne problemy zarysowują się w sposób najbardziej wyrazisty i wielostronny w dyskusji. Uczestnik dyskusji wychodzi z niej wzbogacony nie tylko próbami rozumienia innych, ale też z pogłębioną świadomością uwarunkowań własnych myśli.

W tomach serii wydawniczej *PROBLEMY/DYSKUSJE* czytelnik znajdzie przede wszystkim szereg studiów dotyczących tytułowego dla tomu problemu. *PROBLEMY/DYSKUSJE* zapraszają też czytelnika do uczestniczenia w dyskusjach podejmowanych – na wzór dialogów Platona – przez autorów studiów.

Adres internetowy serii PROBLEMY / DYSKUSJE:
www.staff.amu.edu.pl/~insfil/problemy-dyskusje

Seria: POZNAŃSKIE ZESZYTY FILOZOFII FIZYKI
redakcja Antoni Szczuciński

1. Antoni Szczuciński (red.), *Wokół kwantów i grawitacji*, 2006