

§ 1. Проблема сводимости химии к физике

Не вникая в историю химии, которая изложена в многочисленных учебниках и монографиях, остановимся на трактовке вопроса о соотношении химии и физики в философской литературе. И.Кант в «Критике чистого разума» (1787 г.) не рассматривает вопрос о границах между химией и физикой. У него то, что есть действительно научного в химии его времени, подпадает под понятие «чистое естествознание», а образцом чистого естествознания служит физика. Как известно, основным вопросом «Критики чистого разума» служит: как возможны синтетические суждения априори? Иными словами, как возможны всеобщие и необходимые положения, получаемые путем обобщения опытных данных? Что надо, так сказать, добавить к тому, что непосредственно следует из опыта, чтобы получить не относительное обобщение, а закон природы? Ответ Канта известен: эти обобщения поднимают до уровня законов категории рассудка, составляющие своего рода схемы, модели, по которым группируются эмпирические факты.

Одна из первых схем (моделей), рассмотренных Кантом, состоит в следующем: «При всякой смене явлений субстанция постоянна, количество её в природе не увеличивается и не уменьшается»¹. Эта схема заложена в формулировке закона сохранения веса веществ в химических реакциях. Хотя этой формулировки у Канта в явном виде нет, у него есть химический пример: «Одного философа спросили: сколько весит дым? Он ответил: вычти из веса сожженных дров вес оставшегося тепла и ты получишь вес дыма»². Отвлекаясь от химической корректности этого примера, заметим, однако, что этот пример иллюстрирует тот закон, который был сформулирован Лавуазье: вес веществ, вступивших в реакцию, равен весу веществ, получившихся в результате реакции». Вес веществ – это та субстанция, которая сохраняется в химических реакциях.

Кант затем приводит физические примеры: причинные законы типа второго закона Ньютона, законы взаимодействия или, как Кант пишет, общения, типа закона всемирного тяготения.

Итак у Канта химия, поскольку она имеет дело с количественными законами, наука того же уровня, что и физика. По-иному он подходит к биологии: основания этой науки изложены у него в «Критике способности суждения».

У Шеллинга и Гегеля уже активно используются категории «механизм», «химизм», «телеология». При этом прослеживается иерархия. У Гегеля в трехтомной «Энциклопедии философских наук» (1817) это категории объективности. Гегель пишет, что «механизм» и «химизм» обычно не различают, противопоставляя их целесообразности. Между тем механизм – это внешнее соотнесение объектов, при котором они сохраняют самостоятельность. Химизм возникает, когда объекты безразличны друг к другу. Гегель здесь фиксирует нечто подобное химическому сродству – «абсолютное влечение соединиться в одно целое друг с другом и друг через друга»³.

В «Философии природы» (третий том «Энциклопедии философских наук») Гегель дает более конкретное описание того, что он понимает под химизмом. Гегель сопоставляет химизм с магнетизмом и электричеством. «Химизм есть тотальность, в которую тела входят сообразно своим специфическим особенностям»⁴. Это означает, что в отличие от электрических и магнитных взаимодействий в химии раскрываются более тонкие и более специфические особенности тел. Впрочем, гегелевская трактовка предмета химии не только ограничена тем уровнем развития науки, который застал немецкий философ. Она ограничена его натурфилософским подходом, допускающим слишком свободное и нестрогое теоретизирование. Так, у Гегеля химизм и электричество совместно противостоят магнетизму. Гальванизм, по его мнению, показывает, что химизм и электричество опосредствованы «борьбой противоположностей», магнетизм же – пространственное отношение.

Частично отталкиваясь от Гегеля, Ф.Энгельс, ближайший соратник К.Маркса, также рассуждал о соотношении физики и химии. В неоконченном произведении «Диалектика природы» (1881 г.) Ф.Энгельс намечает следующую иерархию форм движения материи: механическая (движение тяжелых тел), физическая (движение молекул), химическая (движение атомов), биологическая (жизнь – это форма существования белковых тел, существенным моментом которой является обмен веществ с окружающей средой). Согласно Энгельсу, иерархия форм движения материи определяет иерархию наук, изучающих эти формы движения.

Энгельс подчеркивает взаимосвязь форм движений. Исходной формой движения является механическое движение. Оно присутствует во всех других формах движения, ибо они предполагают момент перемещения, пространственного изменения состояния тела. Однако в области процессов химической и биологической природы «механические законы хотя и продолжают действовать, но отступают на задний план перед другими более высокими законами»⁵.

В целом каждая последующая форма движения предполагает все предшествующие формы движения. Но они присутствуют в ней, как подчеркивали советские марксисты, излагавшие Энгельса, в «снятом», «преобразованном» виде. Они подчиняются законам высшей формы движения⁶. «Так в газе, – пишет Б.М.Кедров, – сохраняется механическое движение (перемещение) отдельных молекул, но оно уже не играет здесь решающей роли, будучи превзойдено и преодолено более сложной формой движения – изменением состояния всего коллектива (газа), в частности, его тепловым движением, что изучается термодинамикой»⁷.

Этот пример можно распространить на то, что Энгельс и его последователи называли химической формой движения. Скажем, химическая реакция происходит в газовой фазе, скажем, речь идет об образовании аммиака из водорода и азота. Химические реакции обусловлены соударением молекул. Эти соударения являются случайными, они подчиняются законам молеку-

лярно-кинетической теории. Эта теория описывает вероятность соударений, их зависимость от температуры, давления и других параметров. Однако приведут ли эти соударения к реакции? Этот вопрос уже химический: он касается параметров молекул, участвующих в реакции, и механизма самой этой реакции.

Более удачный комментарий дает Б.М.Кедров, когда различает главную и побочную формы движения. «При наличии микроскопических движений тело как целое может находиться в макроскопическом отношении как в состоянии относительного покоя, так и в состоянии макроскопического движения. Если, например, какой-нибудь молекулярный газ рассматривается как макроскопическое образование, то для него тепловая форма движения выступает как главная, ею характеризуется специфичность того более сложного материального образования, каким является этот газ по отношению к отдельным, образующим его молекулам; эта главная форма как раз и исследуется непосредственно при изучении термодинамики данного физического объекта.

Механическое же движение отдельных молекул, входящее в эту главную форму движения и связанное с нею структурно и генетически, выступает как побочная форма движения в том именно смысле, что она не имеет здесь уже того решающего значения, какое она имеет при механических процессах»⁸.

Можно было бы продолжить исторический экскурс в философские трактовки соотношения физики и химии. Например, интересно обсуждение соотношения химической и физических форм энергии в философии природы В.Оствальда (1903 г.)⁹. Остановимся, однако, на обсуждении этого вопроса в отечественной литературе. Это обсуждение непосредственно базировалось на «Диалектике природы» Ф.Энгельса.

Уже при беглом взгляде на «Диалектику природы» становится ясно, что Энгельс не мог найти в своей схеме форм движений места для электродинамики, которая интенсивно формировалась как раз в то время, когда он

писал эту книгу. В 1864 г. Дж.К.Максвелл сформулировал систему уравнений электродинамики, а в 1895 г. Лоренц описал взаимодействие электромагнитного поля с движущимися заряженными частицами. В «Диалектике природы» были замечания о теории электричества и магнетизма, но специально электрической или электромагнитной формы движения в ней не было. Более того, Энгельс порой скептически высказывался в отношении теорий электричества.

Интерпретируя роль электрических процессов в химии, советские авторы активно пользовались различием главной и побочной форм движения. «Если взаимосвязь механического и теплового движения была раскрыта еще в 40–60-х гг. XIX в., – писал Б.М.Кедров, – то сущность электрохимических процессов еще только «нащупывалась» учеными во времена Энгельса. Анализируя эту область, Энгельс подчеркивал главное, а именно – то, что это область проникновения двух форм движения – химической и физической (электрической)»¹⁰. И далее: подобно квантово-механическим процессам, электрические взаимодействия в химии относятся лишь к «побочным формам движения», не способным исчерпать «главную форму движения» – химическое превращение¹¹.

Здесь была упомянута квантовая механика. Преобразование химии на основе квантовой механики, состоявшееся в 30-х, 40-х и 50-х гг., стало камнем преткновения для сторонников энгельсовских форм движения. Во-первых, у Энгельса физика – это форма движения молекул (молекулярная физика). Двигаясь в глубь материи, мы приходим к движению атомов, т.е. к химии. Далее у Энгельса идет биологическая форма движения, рассматриваемая как результат эволюции химической формы движения. Для квантовой механики просто нет места.

Во-вторых, квантовая механика (физическая теория) преобразила химию. Центральные понятия химии – «валентность», «химическая связь» получили квантовую трактовку. Началась эра квантовых расчетов. В середине 1960-х гг. Р.С.Малликен даже провозгласил приближение эры «рассчиты-

вающих химиков», которые сотнями, если не тысячами пойдут не в лаборатории, а к «вычислительным машинам»¹². Возможно, Р.С.Малликен преувеличивал. Но фактом является то, что появилась химическая дисциплина – квантовая химия, причем фундаментальная химическая дисциплина. В отличие от химической термодинамики, электрохимии и других областей физической химии квантовая химия образовывала общую концептуальную и исследовательскую базу почти всех областей химии.

С первой трудностью удалось справиться, приняв идею «химического клина» между двумя частями физики. Соответственно химической формой движения стали называть атомные процессы, отличные, с одной стороны, от процессов, описываемых молекулярно-кинетической теорией строения материи, а с другой стороны, от атомных и субатомных процессов, описываемых квантовой механикой и, далее, квантовой электродинамикой. Вторая трудность решалась опять же путем различения главной и побочной форм движения материи. «Отношение квантовой механики к химии, к химическому движению, – писал Б.М.Кедров, – напоминает отношение статистики к экономической науке: качественный, экономический анализ явления дает экономическая наука, и если он не дан предварительно, никакие статистические подсчеты не в состоянии дать правильную картину развития того или иного процесса в жизни общества»¹³.

В советской философской литературе шла активная дискуссия о соотношении форм движения материи. Выше цитировались сочинения Б.М.Кедрова, который с большей аккуратностью, нежели некоторые иные философы, описывал развитие естествознания. Но идею химической формы движения обсуждали Р.В.Гаркавенко, Е.Ф.Солопов, А.М.Руткевич и др. Все они исходили из принципа иерархического строения природы: все они подчеркивали, что недопустимо сводить высшее к низшему и основное к побочному. Споры шли, в принципе, о деталях. Идея иерархичности, «лестницы» не ставилась под сомнение.

Все же нельзя было не учитывать и мнение тех, кто профессионально занимался квантовой механикой и квантовой химией. Они же большей частью подчеркивали сводимость химии к физике, во всяком случае, сводимость в принципе, в идее. Решающим было высказывание одного из классиков П.А.М.Дирака, который уже в 1929 г. писал о том, что «общая теория квантовой механики закончена. Решающие физические законы, необходимые для математической теории большей части физики и всей химии известны полностью, и трудности заключаются в том, что точное приложение этих законов ведет к слишком сложным для решения уравнениям»¹⁴.

Имея в виду позицию сторонников категорий, введенных Ф.Энгельсом, М.Г.Веселов писал в 1962 г.: «Обычно утверждается, что квантовая механика является физической теорией и поэтому она не может отразить специфику химической формы движения. Этот взгляд мы считаем неправильным. Квантовая механика в принципе содержит в себе возможность правильного объяснения всех явлений, происходящих в электронных оболочках любых систем, независимо от числа входящих в систему атомов, и потому она является теорией как физических, так и химических элементарных явлений»¹⁵.

Обзор полемики по вопросу соотношения химии и физики, проходившей в 60–70-е гг. прошлого века содержится в книгах автора настоящего текста¹⁶. Надо все же заметить и то, что в начале 1950-х гг. эта полемика не была безобидна: в 1951 г. состоялось Всесоюзное совещание по вопросам теории строения в органической химии, где была подвергнута уничижающей идеологической критике одна из теорий, входящих в квантовую химию, – теория резонанса (эта была качественная теория: главное место в ней занимали не расчеты, а развитие химической символики – многоформульное представление одной и той же молекулы). Заодно критиковалась и квантовая химия в целом: эта теория была виновата, в частности, в редукционизме – в сведении высшей формы движения (химической) к низшей (физической)¹⁷.

Критика теории резонанса закончилась, как и большинство идеологических кампаний, имевших место в советской науке. Победила академиче-

ская наука, победили специалисты по квантовой химии, развивавшие расчетные методы этой науки и ее концептуальный аппарат.

Уже в начале 1960-х гг. допускались весьма едкие замечания по поводу концепции главных и побочных форм движения материи. «Мне непонятно, – говорил А.А.Марков, – как могут физические законы отойти на второй план... Будем рассматривать живой организм. Он состоит из элементарных частиц, которые группируются в атомы, молекулы. Физические законы, которые управляют этой системой, сохраняют силу. Но вместе с тем на них «накладываются» биологические законы. Бедная молекула! Что же ей тогда делать? Каких законов слушаться – физических или новых биологических?»¹⁸.

Далее А.А.Марков писал, что выведение биологических законов из физических – идеал, к которому надо стремиться. Ясно, что этот идеал предполагает, что и химические законы в принципе выводимы из физических.

Критика энгельсовской концепции форм движения материи была, конечно, проявлением свободы. Не всякий на нее был способен. Но вместе с тем эта критика была и формой зависимости: сама по себе она не несла каких-то новых конструктивных методологических идей и разработок.

Философская позиция, способная пролить свет на соотношение физики и химии, лежала совсем в иной плоскости, нежели идеи Ф.Энгельса и его комментаторов и «продолжателей дела». Это была позиция логического эмпиризма. Она позволяла заменить вопрос, сводится или не сводится химия к физике, на вопрос, как взаимодействуют эти науки. Более точно – она позволяла перенести вопрос о соотношении физики и химии в эпистемологическую плоскость, в плоскость теории научного знания, его структуры и функций. Логический эмпиризм не строит теории того, как устроена природа, он говорит о том, как устроено знание. В отношении вопроса о взаимосвязи химии и физики логический эмпиризм оперирует терминами «выводятся ли химические законы из физических?», «что надо дополнительно предположить, чтобы такая дедукция была возможна?», «какова структура квантовой

химии?» и др. В его арсенале концептуальный аппарат логики и идея об обязательной эмпирической фундированности научного знания.

§ 2. Химия и физика с точки зрения межтеоретических отношений

Итак, сводится ли теория валентности и химической связи к квантовой механике? В философии науки понятие сведения одной теории к другой анализировал Э.Нагель¹⁹. При этом он исходил из «стандартной» модели научной теории (у нас ее обычно называют гипотетико-дедуктивной): научная теория есть дедуктивная система, построенная иерархически, – в ней из исходных общих предложений, представляющих научные законы высшей общности (их можно назвать аксиомами или постулатами), следуют предложения средней общности, а из них предложения, выражающие факты. Скажем, из законов Ньютона следует предложение средней общности: «наибольшая дальность полета камня, брошенного под углом к горизонту, достигается при угле бросания в 45°». Из этого предложения в свою очередь дедуктивно следуют фактофиксирующие предложения, описывающие отдельные бросания.

Согласно Э.Нагелю, редукция теории состоит в дедуктивном выводе исходных положений редуцируемой (сводимой) теории из той теории, к которой осуществляется редукция. Исходные положения редуцируемой теории, таким образом, становятся положениями средней общности в редуцируемой теории.

Нагель также подчеркивал важный момент в редукции теорий. Эта редукция не может быть осуществлена без дополнительных построений. Необходимы «правила соответствия» (их называют также мостиковыми положениями), связывающие ключевые термины редуцируемой теории и терминологию той теории, к которой осуществляется редукция. О логической форме этих «правил соответствия» в логическом эмпиризме шли споры. Однако сам факт необходимости правил никто не оспаривал.

Э.Нагель приводит простой пример редукции теорий: сведение феноменологического закона Бойля–Мариотта к кинетической теории газов. Он

фактически воспроизводит тот вывод этого закона, который имеется в «Фейнмановских лекциях по физике». Он подчеркивает, что этот вывод предполагает «правило соответствия», связывающее температуру газа со средней кинетической энергией молекул.

Редукция химической теории валентности и межатомных связей к квантовой механике протекает в принципе по той же схеме. Однако есть существенная оговорка. Эта редукция осуществляется с применением приближенных методов. Точное решение уравнения Шрёдингера возможно лишь для простейшей молекулярной системы – молекулярного иона водорода, да и то в приближении неподвижных ядер. Но химия здесь не находится в особых условиях. Скажем, физика твердого тела также выводится из квантовой механики при применении приближенных методов. С учетом сказанного можно согласиться с авторами известного учебника, которые писали, что «квантовая механика сводит проблемы химии к задачам прикладной математики»²⁰.

Итак, развитие квантовой химии может быть понято как приближительная дедукция химических законов из законов квантовой механики. Каковы же правила соответствия, которые обеспечивают эту дедукцию? Уравнение Шрёдингера (фундаментальный закон квантовой механики) связывает энергию микросистемы с ее строением, записанным в виде дифференциального оператора, входящего в левую часть этого уравнения. Химическая связь в доквантовой химии – это образование электронных пар (ковалентная связь) или притяжение разноименно заряженных ионов. Применение квантовой механики привело к энергетической трактовке химической связи. «Теория валентности представляет собой теорию вычисления энергии молекулы... Формулируя в самом общем виде, можно сказать, что причина образования молекулы из двух атомов заключается в понижении полной энергии при сближении атомов»²¹.

В несколько иных терминах: «электронная структура и свойства молекулы в любом из ее стационарных состояний могут быть в принципе определены из решения стационарного уравнения Шрёдингера... Волновая функция

(или функция состояния) $\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)$, которая описывает электронное состояние молекулы, должна обладать определенными математическими свойствами. В частности, она должна быть «квадратично интегрируемой»... Полная энергия молекулы должна быть отрицательной для химически связанной молекулы, и она также должна быть меньше суммы энергий отдельных атомов, из которых построена молекула, если молекула стабильна по отношению к диссоциации на атомы»²².

И далее: « Химическую связь можно объяснить как результат концентрирования электронной плотности в тех или иных областях в молекуле с результирующим понижением полной потенциальной энергии молекулы, что полностью соответствует интуитивным представлениям элементарной теории валентности»²³.

Квантовая химия имеет сложную структуру. В ее основе лежат фундаментальные положения квантовой механики – уравнение Шредингера, принцип суперпозиции, соотношения неопределенностей. Кроме этих положений, квантовая химия использует ряд общих дополнительных допущений, например, гипотезу спина электрона. Далее идут гипотезы, определяющие ту или иную версию квантовой химии. На заре квантовых расчетов в химии популярность получила версия, именуемая теорией валентных связей. Здесь принималось допущение, свойственное доквантовым электронным теориям – химическая связь образуется за счет образования электронных пар (построенных из двух электронов с противоположными спинами). Что значит это допущение в квантовой химии? Это значит, что волновая функция молекулы строится на основе волновых функций, описывающих пары электронов, ответственные за образование химических связей в этой молекуле.

Несколько позже получило распространение одноэлектронное приближение, называемое теорией молекулярных орбиталей. Здесь волновая функция молекулы (или группы электронов, ответственной за образование химической связи) берется в виде произведения одноэлектронных волновых функций. При этом одноэлектронные волновые функции, удовлетворяющие

уравнению Шредингера для атома, называются атомными орбиталями (иногда – орбитами), а одноэлектронные волновые функции для молекулы, соответственно, молекулярными орбиталями.

Каждая из этих версий может трактоваться как отдельная гипотетико-дедуктивная теория: к фундаментальным положениям квантовой механики добавляется еще одно положение, справедливое только в рамках данной версии. Из этой совокупности дедуктивно следуют положения, описывающие факты. Скажем, из уравнения Шредингера, записанного для молекулы водорода, и гипотезы о том, что химическая связь образуется за счет возникновения электронной пары, следует утверждение, касающееся энергии связи в этой молекуле, утверждение, соответствующее эмпирическим данным.

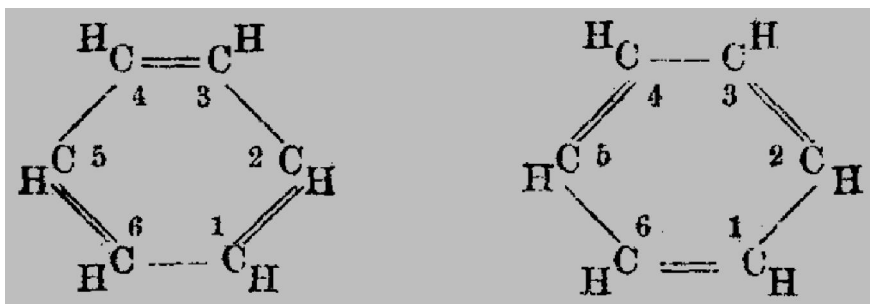
В этом собственно состоял первый (или один из первых) квантово-механических расчетов в химии – расчет, выполненный Гейтлером и Лондоном в 1927 г.

Мы, однако, не учли еще другие факторы, усложняющие структуру квантовой химии. Каждая из названных версий (теорий) имеет две подверсии (или подтеории): расчетную (количественную) и наглядную (качественную). Расчетная – это решение приближенных уравнений и оценка энергии связи и других параметров молекулы. При этом приближенные расчеты тоже различаются степенями приближения, бывают более или менее строгими.

Наглядная квантовая химия – это диаграммы и формулы, а также понятия, выраженные не на языке математики, а на обычном разговорном языке (его также называют естественным языком, отличая от искусственного – языка математики, впрочем, различение искусственных и естественных языков тоже условно).

Только что речь шла о расчете энергии связи молекулы водорода, выполненного Гейтлером и Лондоном в рамках теории валентных связей. Эта теория известна и своим наглядным вариантом, названным теорией резонанса (эта теория упоминалась в предыдущем параграфе: в начале пятидесятых годов в СССР проходила целая «антирезонансная кампания»). Теорию резо-

нанса можно трактовать как теорию, развивающую классическую химическую символику. Еще в доквантовой химии использовалось многоструктурное изображение химического строения молекул. Например, строение молекулы бензола изображалось в виде двух структур Кекуле:



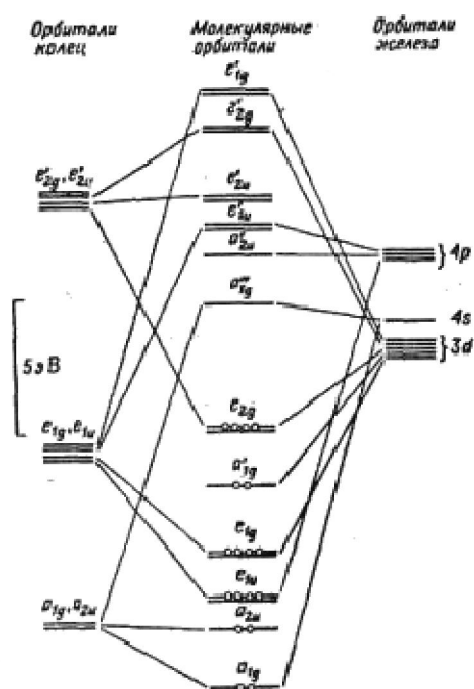
В теории резонанса многоструктурное представление химического соединения опирается на квантово-механический принцип суперпозиции, согласно которому всякое стационарное состояние может рассматриваться как суперпозиция (наложение) базисных состояний. Обычное устойчивое состояние любой молекулы является стационарным. В теории резонанса в качестве базисных состояний принимаются гипотетические состояния, изображаемые классическими структурными формулами (или доквантовыми электронными формулами). Причем предполагается, что эти состояния могут вносить разный «вклад» в реальное строение химического соединения. В принципе, чем больше классических структурных формул может быть написано для данной молекулы, тем выше ее стабильность.

Теория молекулярных орбиталей также известна в двух версиях. Ее количественная (расчетная) версия известна как теория Хартри-Фока. Это – самая эффективная теория расчета молекулярных структур, фактически вытеснившая расчеты по методу валентных связей.

Теория молекулярных орбиталей (которая сама есть «подтеория» квантовой химии) нередко применяется в версии «молекулярная орбиталь – линейная комбинация атомных орбиталей» или сокращенно МО ЛКАО. Речь идет о том, что волновые функции, представляющие состояния электронов в

молекуле, строятся как линейные комбинации волновых функций, представляющих состояния электронов атомов, входящих в молекулу.

МО ЛКАО, однако, существует как в расчетном, так и наглядном (качественном) вариантах. Этот последний состоит в построении диаграмм, изображающих, как молекула строится из атомов – точнее, как состояния электронов молекулы слагаются из электронных состояний атомов. Ниже приведена достаточно сложная молекулярная (другое название – корреляционная) диаграмма, изображающая комплексное соединение, где ионом комплексообразователем служит железо, а лигандами молекулы бензола.



Не вникая далее в структуру квантовой химии, заметим, что идейной базой этой области знания служит принцип сводимости химической теории межатомной связи и валентности к квантовой механике. Это следующий принцип – в химическом взаимодействии и химической связи нет ничего кроме электромагнетизма. И электромагнитное взаимодействие подчиняется законам квантовой механики.

§ 3. Самоорганизация и самосборка

Рассматривая соотношение физики и химии в контексте вопроса о структуре научного знания (такая постановка вопроса свойственна логическому эмпиризму), мы не находим каких-либо уязвимых пунктов в позиции редукционизма, позиции, предполагающей принципиальную сводимость химии к физике, а теории химической связи и валентности к квантовой механике. Наоборот картина науки становится более ясной: в основе химии лежит физика, и задача, встающая перед философом науки, состоит в том, чтобы описать многообразие положений и концепций, возникших в области химических приложений физических теорий.

Однако возможна более мягкая трактовка межтеоретических отношений. У.Куайн, соглашаясь с трактовкой редукции как дедукции редуцируемой теории из той, к которой осуществляется редукция, замечает однако, что онтология редуцируемой теории может при этом и не быть редуцирована, что она сохранится как автономная область объектов. Вспомним, что Куайн называет онтологией²⁴. Это совокупность объектов, предполагаемых теорией. Например, классическая (ньютоновская) механика исходит из того, что существуют материальные точки, силы, ускорения. Электродинамика предполагает, что существуют электромагнитные поля. Квантовая механика исходит из существования квантовых состояний микрочастиц.

Редукция одной теории к другой – это, в полном соответствии с тем, что пишет Э.Нагель (см. выше), дедукция положений первой теории из положений второй теории. Однако редукция теории еще не предполагает редукции ее онтологии. Например, редукция арифметики к теории множеств не означала того, что арифметические объекты (числа) были редуцированы к множествам. На уровне обоснования числа – это множества, и операции над числами сводятся к операциям над множествами. Числа, однако, продолжали «работать» на том уровне, на котором применяется арифметика. Чтобы осуществить редукцию онтологий, надо, по Куайну, сформулировать специальную функцию замещения, выражающую редуцируемую онтологию через ту, к которой осуществляется редукция.

Не вникая в точную формулировку функции замещения, спросим, а что дает такая гибкая трактовка редукции (редукция теорий не означает редукции онтологий) для понимания соотношения квантовой механики и химии? Квантовая трактовка химической связи и валентности, означающая редукцию этих теорий к физике, – это одна сторона дела. В химии XX века сохранилась традиционная (укорененная в доквантовой химии) химическая терминология, традиционные химические концепции. Это в первую очередь концепции ионной и ковалентной связи, координационных соединений, символика валентного штриха, понятие структурной формулы, брутто формулы. Уже в конце двадцатых годов началось взаимодействие классических химических представлений и квантовых идей. Характерный пример здесь – теория резонанса, которая упоминалась в предыдущем параграфе. Она может трактоваться как развитие и обобщение многоформульного изображения строения молекулы, применяемого в классической химии. «Классическая структурная теория, – писал один из создателей этой теории Л.Полинг, – развивалась на основе только химических фактов, без всякой помощи со стороны физики. Теория резонанса также находилась в процессе становления еще до открытия квантовой механики... Теория резонанса является частью этой структурной теории, которая имеет в сущности эмпирическую индуктивную основу, она не является просто областью квантовой механики»²⁵. «Основное значение квантовой механики для химии, – писал Л.Полинг в другой своей работе, – состоит во внедрении новых идей, как например, представления о резонансе между несколькими электронными структурами, сопровождающемся увеличением устойчивости»²⁶.

Итак, редукция химической теории связи и валентности к квантовой механике не лишила смысла классические химические представления: эти представления стали применяться на базе и во взаимосвязи с идеями квантовой механики. Однако наши рассуждения о классических химических представлениях в структуре квантовой химии становятся интересными в связи с новейшим развитием этих представлений, связанных с появлением супрамо-

лекулярной химии и понятием самосборки. Эти события ставят под сомнение тот вывод, который был сделан во втором параграфе: вывод о принципиальной редуцируемости теории химической связи и валентности к квантовой механике. Они показывают, что в области синтетической химии действуют еще и законы информационного характера: супрамолекулярные соединения строятся по принципу молекулярной дополнительности, в них выделяются субстрат и рецептор, причем рецептор «воспринимает», «ощущает» субстрат. Как отмечает Дж. Лен в своей Нобелевской лекции, современная структурно-информационная теория синтеза может рассматриваться как обобщение классической теории комплексных соединений, где комплексообразователем (субстратом) необязательно служит ион переходного металла: в качестве такового могут выступать катионы, анионы и нейтральные органические молекулы²⁷.

Супрамолекулярная химия генетически восходит к новейшему развитию биохимии. «Что такое супрамолекулярная химия? Лен определил ее как химию межмолекулярных связей, изучающую ассоциацию двух и более химических частиц... Она лежит за пределами классической химии, исследующей структуру, свойства и превращения отдельных молекул. Если последняя имеет дело главным образом с реакциями, в которых происходит разрыв и образование валентных связей, то объектом изучения супрамолекулярной химии служат почти исключительно невалентные взаимодействия – водородная связь, электростатические взаимодействия, гидрофобные силы, структуры «без связи». Как известно, энергия невалентных взаимодействий на 1-2 порядка ниже энергии валентных связей, однако, если их много, они приводят к образованию прочных и вместе с тем гибко изменяющих свою структуру ассоциатов. Именно сочетание прочности и способности к быстрым и обратимым изменениям – характерное свойство всех биологических структур – нуклеиновых кислот, белков, ферментов, переносчиков частиц»²⁸.

В нашей литературе идейная новизна современной химии часто связывалась с нелинейной неравновесной термодинамикой И.Пригожина, с его

концепцией диссипативных структур, с концепцией самоорганизации, «работающей» вдали от химического равновесия²⁹. Однако самосборка и супрамолекулярная химия, по-видимому, более значимые и влиятельные концепции.

Литература

¹ Кант И. Соч. Т.3. М.: Мысль, 1964. С. 252.

² Там же. С. 255.

³ Гегель Г.В.Ф. Энциклопедия философских наук. М.: Мысль, 1974. Т.1. С. 390.

⁴ Гегель Г.В.Ф. Энциклопедия философских наук. Т. 3. С. 233.

⁵ Маркс К., Энгельс Ф. Избранные произведения. Т. 2. М.: Госполитиздат, 1955. С. 354.

⁶ Кедров Б.М. Предмет и взаимосвязь естественных наук. М.: АН СССР, 1962. С. 171; Солопов Е.Ф. Соотношение форм движения и видов материи в природе // Вопросы философии. 1963. № 8; Солопов Е.Ф. Предмет и логика материалистической диалектики. Л., 1973. С. 22–33.

⁷ Кедров Б.М. Предмет и взаимосвязь естественных наук. М.: АН СССР, 1962. С. 172.

⁸ Там же. С. 172.

⁹ См.: Печенкин А.А. Редукционизм в контексте истории науки // Электронный журнал «Исследовано в России». <http://zhurnal.apre.relarn.ru/articles/2009/037.pdf>.

¹⁰ Кедров Б.М. Предмет и взаимосвязь естественных наук. М.: изд-во АН СССР, 1962. С. 191.

¹¹ Там же. С. 304–305.

¹² Малликен Р.С. Спектроскопия, молекулярные орбитали и химическая связь // Успехи физических наук. 1968. Т. 94. Вып. 4. С. 606.

-
- ¹³ *Кедров Б.М.* Предмет и взаимосвязь естественных наук. М.: АН СССР, 1962. С. 334. См. также: *Кедров Б.М.* Взаимосвязь форм движения материи и их классификация // *Пространство. Время. Движение.* М.: Наука, 1971. С. 265–283.
- ¹⁴ *Dirak P.A.M.* Quantum mechanics of many-electrons systems // *Proceedings of Royal Society.* 1929. Vol. 133 A. P. 714.
- ¹⁵ *Веселов М.Г.* Элементарная квантовая теория атомов и молекул. М., 1962. С. 213.
- ¹⁶ *Печенкин А.А.* Методологические проблемы развития квантовой химии. М.: Наука, 1976; *Он же.* Взаимодействие физики и химии. М.: Мысль, 1986.
- ¹⁷ *Печенкин А.А.* Антирезонансная кампания в советской науке. 1949–1951 гг. Препринт № 64 Института истории естествознания и техники. М., 1991; *Pechenkin A.* The 1949–1951 anti-resonance campaign in Soviet Science // *LLULL.* Vol. 18. 1995. P. 135–166.
- ¹⁸ *Марков А.А.* Об отношении физических законов к биологическим // *О сущности жизни.* М.: Наука, 1964. С. 168–169.
- ¹⁹ См.: *Nagel E.* The structure of science: problems in the logic of scientific explanation. N.Y., 1961.
- ²⁰ *Эйрингс Г., Уолтер Дж., Кимбалл Дж.* Квантовая химия. М.: изд-во Иностранной литературы, 1948. С. 6.
- ²¹ *Коулсон Ч.* Валентность. М.: Мир, 1965. С.19-20.
- ²² *Мак Вини Р., Сатклиф Б.* Квантовая механика молекул. М.: «Мир», 1972. С.9-12.
- ²³ Там же. С.111
- ²⁴ *Игнатов О.Д.* Концепция онтологической редукции и проблема редукции химии к физике // *Философия науки.* 2009. №2 (41). С. 46-65.
- ²⁵ *Полинг Л.* Природа теории резонанса. В кн.: *Перспективы развития органической химии.* М., 1971. С.134.
- ²⁶ *Полинг Л.* Природа химической связи. М.-Л., 1947. С.5.

²⁷ *Lehn J.M.* Supramolecular Chemistry – Scope and Perspective. Molecules, Supramolecules, and Molecular Devices (Nobel Lecture) // **ANGEWANDTE CHEMIE**. Volume 27, Number 1, January 1988, P. 89-112.

²⁸ *Пожарский А.Ф.* Молекулярное распознавание // Соросовский образовательный журнал. Номер 9, 1997. С.32.

²⁹ *Аршинов В.И., Свирский Я.И.* Синергетическое движение в языке // Самоорганизация и наука. Опыт философского осмысления. М.: Институт философии РАН, 1994. С.33-47; *Печенкин А.А.* Реакция Белоусова-Жаботинского как аргумент в дискуссии о сути бытия // Вестник МГУ. Серия 7. 2012, N 1.