

Paweł Zeidler
dr hab., prof. UAM

Status ontologiczny orbitali atomowych i molekularnych w kontekście autonomii chemii

Słowa kluczowe: orbitale atomowe i molekularne, autonomia chemii, realizm

I. 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, angażując 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 np. 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 rzeczy jest, jak sędzę, ciągle otwarty problem statusu metodologicznego chemii, a zwłaszcza jej relacji do fizyki. Jest to problem ważny dla praktyki badawczej

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

chemii. Stosunek chemików do zagadnienia redukcji chemii do fizyki ma istotny wpływ na zajmowane przez nich stanowisko w kwestii poznawczej interpretacji jej wytworów, jak również 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 skrótoowego wprowadzenia w relewantne dla omawianej kwestii zagadnienia molekularnej mechaniki kwantowej. W tym kontekście zrozumiałe staną się argumenty 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.

II. Orbitale atomowe i molekularne w świetle mechaniki kwantowej

Zgodnie z podręcznikowym określeniem orbital jest to funkcja falowa opisująca stan pojedynczego elektronu w atomie lub molekuale, 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 chemii olbrzymie znaczenie ma ich poglądowa 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

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

³ Pełny 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.

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 zaniedbuje się w hamiltonianie oddziaływania między elektronami i zakłada się, że jest on sumą hamiltonianów jednoelektronowych, a każdy elektron porusza się wokół nieskończonego ciężkiego jądra, w uśrednionym polu wszystkich pozostałych elektronów. Przybliżoną energię stanu podstawowego atomu 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 atomu 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” są 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 zhybrydowanych. 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 zhybrydowane się nie pojawiają. Jednakże mimo 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 za jej pomocą 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 energetycznych 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.

III. 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 prawdziwością naszych teorii albo przeciw niej 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 że nie są prawdziwe albo że istnieją bądź że 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.

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

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

⁵ Zob. np. artykuł A. Musgrave'a pod znanym tytułem „Noa's Ark – Fine for Realism” [Musgrave, 1989].

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 uwikłane w problem interpretacji mechaniki kwantowej, który ma, zgodnie z koncepcją Fine'a, wymiar lokalny. Np. 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 realistycznej wersji interpretacji mechaniki kwantowej modele te mogą reprezentować zjawiska zachodzące w mikroświecie. Tak więc rozstrzygnięcie problemów ontologicznych danej dziedziny nauki w ramach racjonalnej analizy jej badawczej praktyki nie zawsze jest konkluzywne, jak mniemał autor NOA.

Z punktu widzenia badawczej praktyki chemii kwestia przyjęcia określonej interpretacji mechaniki kwantowej jest często wiązana z problemem redukcji chemii do fizyki. Formułowana jest opinia, że instrumentalistyczna interpretacja mechaniki kwantowej, a tym samym instrumentalistyczna interpretacja szeregu pojęć chemii zdefiniowanych w aparacie pojęciowym molekularnej mechaniki kwantowej sprzyja akceptacji tezy, zgodnie z którą chemia jest 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-predyktystycznych, a przede wszystkim o 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.

Jeżeli jednak założy 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

⁶ Niektóre problemy związane ze stosowaniem NOA wskazała Sharon Crasnow w artykule „How Natural Can Ontology Be?” [Crasnow, 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, s. 137].

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 cząsteczki 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 *ze względów zasadniczych należy uznać, że w cząsteczce metanu wszystkie elektrony są 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 [Kołós, 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 się 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 się nie pojawiają 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 więc stwierdzić, że z punktu widzenia uczonych należących do wymienionych grup 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.

IV. Czy założenie o istnieniu orbitali jest konieczne w celu wyjaśnienia efektywności laboratoryjnej praktyki 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: myślenie 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 ma to służyć* [tamże, s. 46]. Jest więc ono *nacechowane aksjologicznie*. Myślenie spontaniczno-praktyczne, 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* [tamże, s. 49]. Przekonanie to jest zwyczajowo nazywane realizmem naiwnym i jest powszechnie uważane za nierozłącznie związane ze zdroworozsądkowym nastawieniem do

⁸ Ze względu na wspomniany już kilkakrotnie brak miejsca nie uwzględniłem bardzo ważnych dla prowadzonej dyskusji artykułów: Jenkinsa [2003, s. 1052–1062], Hendry’ego [1998, 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. Zob. Pałubicka [2006].

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 [tamże, s. 49]. Na przykład wytwory myślenia teoretycznego fizyki i chemii stanowią podstawę myślenia sterującego praktyką laboratoryjną chemii. Aby to myślenie okazało się manipulacyjnie skuteczne, wytwory myślenia teoretycznego nie tylko muszą uzyskać postać wyobrażeniową, 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 albo traktowane są 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 umożliwia 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 pojęciem orbitali, 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 przewidywalna i wyjaśniająca diagramów będących wyobrażeniową 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 spontanicznie-praktycznego i nie może dziwić fakt, że nie tylko uprzedmiotowiają 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: adiabatycznego 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 wyobrażeń orbitali atomowych i molekularnych nie wyjaśnia w pełni tego, że są one skutecznymi narzędziami działania w laboratoryjnej praktyce 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.

Bibliografia

- Crasnow S.L., 2000, *How Natural Can Ontology Be?*, w: „Philosophy of Science” 67, s. 114–132.
- Fine A., 1984, *The Natural Ontological Attitude*, w: *Scientific Realism*, Leplin J., (ed.), Berkeley, Los Angeles, London, s. 83–107.
- Hendry R.F., 1995, *Models and Approximations in Quantum Chemistry*, w: *Theories and Models in Scientific Processes*, Herfel W.E., Krajewski W., Niiniluoto I., Wójcicki R., (ed.) Amsterdam, Atlanta, s. 123–142.
- Jenkins Z., 2003, *Do You Need to Believe in Orbitals to Use Them? Realism and the Autonomy of Chemistry*, w: „Philosophy of Science” 70, s. 1052–1062.
- Kołos W., 1975, *Chemia kwantowa*, Warszawa.
- Krajewski W., 1995, „Reprezentacjonizm” i realizm, w: „Filozofia Nauki” 3, s. 79–83.
- McWeeny R., 1987, *Coulsona wiązania chemiczne*, Warszawa.
- Musgrave A., 1989, *Noa's Ark – Fine for Realism*, w: „The Philosophical Quarterly” 39, s. 383–398.
- Ogilvie J., 1990, *The Nature of the Chemical Bond – 1990*, w: „Journal of Chemical Education” 67, s. 280–289.
- Pałubicka A., 2006, *Myślenie w perspektywie poręczności a pojęciowa konstrukcja świata*, Bydgoszcz.
- van Brakel J., 2000, *Philosophy of Chemistry. Between the Manifest and the Scientific Image*, Leuven.
- Woody A.I., 2000, *Putting Quantum Mechanics to Work in Chemistry: The Power of Diagrammatic Representation*, w: „Philosophy of Science” 67, s. 612–627.

Zeidler P., 2000, *The Epistemological Status of Theoretical Models of Molecular Structure*, w: „Hyle” 6, s. 17–34.

Zeidler P., 2003, *Homo experimentator a spór o realizm laboratoryjny*, w: *Homo experimentator*, (red.) Sobczyńska D., Zeidler P., Poznań, s. 105–137.

Ontological Status of Atomic and Molecular Orbitals in the Context of the Autonomy of Chemistry

Key words: *atomic and molecular orbitals, autonomy of chemistry, realism*

The question of the existence of orbitals is analyzed. The author argues that it is not possible to answer this question decisively if one accepts the assumption of Arthur Fine's *natural ontological attitude*. From the point of view of theoretical chemistry there are no such things as orbitals. However, diagrammatic representations of atomic and molecular orbitals are very effective tools in the laboratory practice of chemistry and the process of teaching chemistry. For this reason it is advantageous to interpret them realistically.