

УДК 168

DOI: 10.18384/2310-7227-2023-1-86-96

МАТЕМАТИЗАЦИЯ ХИМИИ: ОТ ТРЕУГОЛЬНИКОВ ПЛАТОНА ДО СОЗДАНИЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ХИМИИ

Чечеткина И. И.*Казанский национальный исследовательский технологический университет
420015, г. Казань, ул. Карла Маркса, д. 68, Российская Федерация***Аннотация**

Цель. Изучение историко-логического процесса математизации химии в контексте её взаимодействия с физикой, раскрытие связи математики с концептуальными системами химии, исследование методологических и гносеологических барьеров на этом пути.

Процедура и методы. Для исследования процесса математизации химии с участием физики используются методы взаимосвязи исторического и логического, ретроспективный анализ, а также системный подход.

Результаты. Показано, что концептуальные системы химии на протяжении всей истории взаимодействия с математикой и физикой обнаруживали относительную замкнутость и самостоятельность, отношения между математикой и химией строились по правилам координации, что приводило как к развитию химии и возникновению новых междисциплинарных и пограничных областей знания (вычислительная химия), так и к методологическим затруднениям (в химии не были созданы строгие дедуктивные системы, как в физике, существуют проблемы математического моделирования и компьютерного эксперимента), затрудняющих дальнейшую математизацию химии.

Практическая и/или теоретическая значимость. Результаты исследования вносят вклад в методологию и философию науки, сформулированы методологические проблемы математизации химии при посредничестве физики.

Ключевые слова: вычислительная химия, история химии, концептуальные системы химии, математизация химии, методология химии, философия химии

MATHEMATIZATION OF CHEMISTRY: FROM PLATO'S TRIANGLES TO THE CREATION OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY

I. Chechetkina*Kazan National Research Technological University
ul. Karla Marxa 68, Kazan 420015, Russian Federation***Abstract**

Aim. To study the historical and logical process of the mathematization of chemistry in the context of its interaction with physics, to disclose the connection of mathematics with the conceptual systems of chemistry, to study the methodological and epistemological barriers on this path.

Methodology. To study the process of chemistry mathematization with the participation of physics, methods of interaction between historical and logical are used, as well as retrospective analysis and a systematic approach.

Results. It is shown that the conceptual systems of chemistry throughout the history of interaction with mathematics and physics revealed relative isolation and independence. The relations between them were built according to the rules of coordination, which led both to their development and the emergence of new interdisciplinary and borderline fields of knowledge (computational chemistry), and

to methodological difficulties (in chemistry, strict deductive systems, as in physics, there are problems of mathematical modeling and computer experiment) that prevent further chemistry mathematization.

Research implications. The results of the research contribute to the methodology and philosophy of science; methodological problems of chemistry mathematization through the mediation of physics are formulated.

Keywords: computational chemistry, history of chemistry, conceptual systems of chemistry, mathematization of chemistry, methodology of chemistry, philosophy of chemistry

Введение

До сих пор между представителями чистой и прикладной математики ведётся дискуссия о том, является ли математика чистой, абстрактной наукой или она связана со всеми отраслями естественнонаучного знания.

А. Н. Колмогоров как представитель чистой математики считал, что новые теории могут возникать внутри самой математики, а не только в связи с решением математикой естественно-научных проблем. Абстрактные математические теории могут найти применение гораздо позже, например, Д. Гилберт, основатель функционального анализа, не мог знать заранее о его применении в квантовой механике, которая сложилась гораздо позднее [11].

Кроме того, математики, занятые абстрактной наукой, считают, что её построения воплощают эстетический критерий красоты и бросают интеллектуальный вызов другим наукам.

Позиция прикладных математиков состоит в следующем: они упрекают чистых математиков в том, что они забыли происхождение своей науки, её связь с естественными науками. Так, выдающиеся математики прошлого, такие как Ньютон, Лаплас и Гамильтон, были ещё и физиками, решали прикладные задачи математики в области физики. Прикладные математики также думают, что чистые математики создают всевозможные мысленные миры, весьма далёкие от реальности.

Ясно одно, что математика без связи с естествознанием станет формальной абстрактной наукой, лишится своего содержания, потеряет связь с историей. «Подлинно живую математику рождает

сочетание абстракции и конкретных проблем» [10, с. 25].

В рамках приведённой выше дискуссии взаимодействие математики с химией при посредничестве физики является не изученной до конца проблемой, в отечественной и зарубежной литературе описываются отдельные моменты математизации химии. Поэтому эта проблема требует дальнейшего изучения для возникновения целостного представления об этом процессе.

Тенденции математизации химии во взаимодействии с физикой в логико-историческом контексте

Древние химические представления восходят к Платону, они изложены в его учении о строении материи в диалоге «Тимей» [14]. Этот диалог является очень важным для дальнейшего развития химии, поскольку он был одним из источников знания, на основе которого во времена александрийского неоплатонизма стала развиваться алхимия, которая была дальше передана арабами на латинский Запад.

Химия Платона была построена на самой передовой науке Античности – геометрии, и он использовал прямоугольные треугольники для создания правильных многогранников (тел Платона), обозначающих стихии (земля, огонь, вода и воздух). Это был шаг вперёд по сравнению с теорией четырёх элементов Античности, т. к. в последней Платон присоединил геометрические построения, представившие космос и четыре элемента в виде математических образов: космос – додекаэдр, огонь – тетраэдр, воздух – октаэдр, земля – гексаэдр и вода – икосаэдр. Платон также высказал мысль о превращении некоторых стихий,

обозначавшихся треугольниками, которые использовались при изготовлении многогранников, друг в друга, например, воды в воздух, воздуха в огонь. Эта идея о превращении элементов друг в друга использовалась дальше в алхимии [21].

Алхимия накапливала факты об отдельных химических веществах и их превращениях и объясняла их посредством ртутно-серной натурфилософской теории, распространившейся в Средневековье. Алхимия не дала рациональных концепций, объясняющих превращения элементов, но зато она выработала химическую символику, использовавшуюся для обозначения химических элементов и их соединений вплоть до XVIII в. Эта символика использовалась в первых химических классификациях, демонстрирующих стиль математического мышления. Математик Вейль говорил о нём как о мышлении в терминах переменных и функций. Суть этого мышления состоит в выборе переменных и представления их в виде символов, которые служат для обозначения переменных и зависят от функций, присваивающих символам наборы уникальных характеристик (элементов) [2].

Так, мышление в терминах переменных и функций обнаруживает в XVIII в. французский химик Жоффруа, размышлявший над проблемой химического сродства, что и привело его к построению таблицы соотношений, наблюдаемых между различными веществами, известными в то время¹. В таблице Жоффруа в верхнем ряду используются символы для обозначения химических элементов, простых веществ и химических соединений, употреблявшихся в XVII в., с последними могут взаимодействовать все указанные ниже в столбцах вещества, которые ранжированы по степени сродства с главным элементом верхнего ряда. Следуя определению математического мышления Вейля, можно выделить: 1) символы элементов верхнего

ряда; 2) функции как отношения порядка между символами элементов, отображающими их способность к сродству в столбце и выступающими в качестве переменных. В каждом столбце таблицы размещаются четыре элемента, которым соответствуют четыре функции, каждая отображает один элемент в виде символа на другой, показывающие отношение порядка во взаимодействиях с главным элементом верхней строки и способность к вытеснению всех веществ, расположенных ниже рассматриваемого элемента в их комбинации с главным элементом столбца. Жоффруа в каждом столбце своей таблицы в математических терминах (переменная, функция) обнаружил локальный порядок веществ вступать во взаимодействие в силу своего сродства. Такой же математический стиль мышления обнаруживается в классификации Лавуазье и в периодической таблице Д. И. Менделеева [20].

Новый этап в развитии химии начинается после того, как возникает физика как первая теоретическая область науки. Ориентиром для учёных-химиков периода с XVII по XVIII вв. была механическая картина мира, откуда были заимствованы атомно-корпускулярные представления Р. Бойля, объяснявшего все химические явления движением атомов. Атомистика Р. Бойля в зародышевой форме содержала представление о химических элементах как о корпускулах и наделяла их индивидуальными свойствами. Но если в механике этой индивидуальностью можно было пренебречь, то в химии она была предметом её изучения. Из механической картины мира заимствовалось также представление о силах, действующих между корпускулами, по аналогии в химии стали рассматриваться силы «химического сродства», которые можно было определить количественными измерениями (Лавуазье).

Окончательную реформу в химии осуществил Дж. Дальтон, в его картине химической реальности атомы были индивидуальными химическими элементами и наделялись такими физическими свойствами, как форма и атомный вес. Работы

¹ Миттова И. Я., Самойлов А. М. История химии с древнейших времен до конца XX века: учебное пособие: в 2 т. Т. 1. Долгопрудный: Интеллект, 2012. С. 121.

Дж. Дальтона и его представления об атомах и молекуле как единой системе атомов позволили объяснить первые эмпирические количественные законы химии (закон постоянства состава, закон эквивалентов и закон кратных отношений)¹. Этот экскурс в историю химии показывает, что сначала математизация химии проходила опосредовано через физические понятия об атомах и их свойствах – массы и объёма, и далее – силы, которые можно было измерить и теоретически рассчитывать согласно законам, используя простейшие арифметические вычисления и теорию пропорций.

Математизация химии в рамках учения о составе была связана также с её формализацией, заключающейся в создании абстрактного языка символов, с помощью которого можно было обозначать химические элементы с помощью латинских букв, где каждому химическому элементу соответствовала своя относительная атомная масса. Такова, например, символика Берцелиуса, впервые позволившая рассчитывать по формуле количественный состав вещества, зная его атомные массы.

Исследование в химии весовых и объёмных соотношений химических веществ привело к использованию в химии арифметики и алгебры, но к широкому распространению алгебры это не привело.

Развитие в середине XIX в. феноменологических структурных концепций (теория радикалов Берцелиуса, теория типов Жерара – Лорана, первые теории валентности) привело к тому, что эти представления связывались с числом атомов в молекуле, но они были статичными и чувственно-наглядными, и с ними невозможно было проводить дальнейшие сложные алгебраические вычисления [18].

Положение меняется в XIX в. в связи с возникновением в химии учения о процессе, тогда химия для его объяснения обращается к термодинамике и кинетике. Поворотом стало использование математического анализа для представления законов химии в теоретической форме. Химия

стала заимствовать математическую мощь классической термодинамики, аппарат которой представлял собой теорию дифференциальных уравнений и постоянно совершенствовался, создавая всё новые виды исчислений бесконечно малых величин. Дж. Гиббс и Вант-Гофф, создатели химической термодинамики и кинетики, прекрасно владели математическим анализом и использовали его как для теоретического обоснования этих наук, так и для математической обработки экспериментальных данных.

Дж. Гиббс создал химическую термодинамику, позволяющую управлять химическими реакциями. Её центральным положением является принцип химического равновесия, под который была подведена система дифференциальных уравнений для представления количественных физических соотношений в теоретической форме. Химическая термодинамика Дж. Гиббса содержала элементы аксиоматической системы (внутренняя энергия и энтропия считались заданными), но полностью законченной аксиоматика стала в термодинамике Каратеодори.

Метод химических потенциалов Дж. Гиббса демонстрирует операционный подход в химии, который получит дальнейшее распространение в точном естествознании в начале XX в. Он основывается на применении понятия полного дифференциала и частных производных. Для того, чтобы выбрать переменные, он обращается к аналогии между физическими и химическими процессами. Гиббс сопоставляет процессы, происходящие в системе при изменении температуры и давления с её составом. Это определяет термодинамическое состояние системы. «Мерой изменения системы выступает полный дифференциал свободной энергии, определяющийся изменениями каждой переменной, представленной с помощью частной производной свободной энергии. Для температуры это будет энтропия, для давления – объём, а для состава – химический потенциал» [5, с. 127–128], последний есть неизвестная функция, полученная путём «стягивания»

¹ См.: Степин В. С. Философия науки. Общие проблемы: учебник. М.: Гардарики, 2006. 384 с.

всех известных факторов или переменных процесса, с которой можно проводить дальнейшие математические преобразования, выявляя её смысл. Такой стиль мышления будет распространённым в химии в начале XX в.

В рамках учения о процессе ведущей тенденцией становится дальнейшая физикализация химии, которая напрямую была связана с её математизацией. Произошёл перенос математических уравнений динамики, содержащих время как параметр, в область химической кинетики, изучающей скорости химических реакций. Результатом внедрения математического анализа в учение о процессе стало то, что феноменологические термодинамические и кинетические теории, являющиеся обобщением эмпирического материала методом индукции, были представлены в теоретической форме. Они уже не сводились к соответствующим разделам классической физики.

В химической кинетике химическая реакция начинает рассматриваться как многофакторная кинетическая система, учитывающая влияние на её скорость и направление действия растворителей, примесей, света, электрического тока, стеночного катализа, температуры, давления. Развитие химических знаний шло в сторону создания множества абстрактных кинетических теорий, старавшихся учитывать эти факторы. Эта особенность была показана Н. Н. Семеновым, продемонстрировавшим ограниченность такого подхода, состоявшего в том, что учёт всех этих факторов ведёт к созданию абстрактных приближенных моделей, которые далеки от реального процесса. Нужна была иная методология, ведущая к конкретизации процесса и приближению его к реальности. Теория дифференциальных уравнений, применявшаяся до этого в химии, эту задачу решить не могла. На смену ей пришло математическое моделирование, необходимое для изучения сложных систем в химии. Метод математического моделирования позволял варьировать все факторы процесса как независимые переменные,

находить между ними функциональные зависимости с помощью математической статистики и теории вероятностей, тем самым решая задачи оптимизации химического процесса [12].

Внедрение математического моделирования привело к появлению системного подхода в химии, имеющего большое прикладное значение в химической технологии (математическое моделирование процессов и реакторов). Развитие системного подхода в химии неизбежно вело её к дальнейшей математизации путём приведения её к дедуктивной системе знания, когда логико-математический аппарат включается в теоретическую химию. Такая возможность появилась в начале XX в. в связи с развитием квантово-механических представлений.

Зарождение квантовой химии было связано с решением многочисленных проблем, накопившимся в химии: объяснения физико-химических свойств веществ, строения и превращения молекул, и центрального понятия – химической связи. Для этого в квантовую химию были введены формализмы квантовой физики: математическая теория операторов, теория групп перестановок, теория возмущений с гипотезой гибридизации атомных орбиталей, развитие которой привело к полуэмпирическим методам молекулярных орбиталей и теории самосогласованного поля, были внедрены определители Слейтера, а в дальнейшем стали применяться методы статистической физики и вычислительной математики [4].

Роль алгебраических средств в построениях квантово-химических теорий заключалась в надлении априори волновых функций всеми физическими свойствами и свойствами контроля за областью их реализаций (математические операторы), изменении порядка дискретной совокупности математических символов и возможности создавать новые физико-химические свойства объектов, а также отборе этих свойств (теория групп), возможности записи полной N-электронной волновой функции (определители

Слэйтера) для расчёта мультифермионной системы. Алгебраические средства играли также важные логические функции: осуществлять последовательность логических операций и подчинять теории строгой дедукции [13].

Опережающая роль математики при посредничестве физики не привела к построению единой теории химической связи, а привела к разработке различных модельных представлений о химической связи, основанных на разнообразных формализмах, использовавшихся для расчёта свойств простых молекул, часто расходившегося с экспериментальными данными. У химиков первой половины XX в. это вызвало скепсис. Химия оставалась эмпирической наукой и опиралась больше на свои концептуальные системы.

Сравнивая научную революцию в физике начала XX в., закончившуюся созданием квантовой механики, с революцией в химии, приведшей к созданию квантовой химии, можно сказать следующее. Когда создавалась квантовая механика, сначала был разработан её математический фундамент – уравнение Шрёдингера для волновой функции, затем был прояснён её физический смысл с помощью её вероятностной трактовки, принципов дополнительности и неопределённости. Математика выступила здесь не только как инструмент для объяснения и предсказания квантовых явлений, но и как генератор новых физических понятий и теоретических построений, хорошо соотносившихся с экспериментом [19].

В создании квантовой химии принимали участие аксиоматические системы квантовой механики с её логико-формальным аппаратом и структурные учения в химии.

Следует отметить положительные стороны математизации химии через посредничество физики в создании квантовой химии. Во-первых, «теоретическая химия стала системой представлений, методов, знаний и теоретических концепций, направленных на изучение атомно-молекулярных систем (АМС). При этом основным средством описания, интерпретации,

прогноза и использования АМС стала структура» [7, с. 3], впервые изучавшаяся математическими средствами. Во-вторых, математика была не только средством количественных описаний и теоретических расчётов, она также, как и в квантовой механике, опережала развитие физико-химических представлений, выступала их генератором и способствовала выработке нового языка, не сводившегося к языку квантовой механики, в создании которого принимали участие как физики, так и химии.

Среди отрицательных сторон математизации химии была проблема интерпретации классических представлений о структуре с помощью теоретических представлений квантовой химии, и это приводило к тому, что многие понятия классической теории строения не интерпретировались вообще, или интерпретировались частично, что вело к выхолащиванию содержательного языка классической химии, утрате его образности и гибкости [17]. Другим моментом, и самым важным, было то, что внедрение аксиоматических систем квантовой физики с различными алгебраическими средствами в химию не привело к построению в ней строгих дедуктивных теорий из-за введения в них различных допущений, приближений и интуитивных гипотез, а также к сложности химических объектов, что приводило к значительным расхождениям с данными эксперимента [16]. Поэтому триумф математического метода в квантовой химии первой половины XX в. не состоялся, и пока было рано говорить о непостижимой эффективности математики в естественных науках [3]. «Успех продемонстрировала не химия, а физика в новой предметной области, открывшая открыла для себя новое поле деятельности... Интерпретация химических связей с помощью квантовой химии оставалась сложной задачей и стала возможной в последние годы, причём проблема точности и однозначности прогноза в настоящее время остаётся актуальной даже для молекул, содержащих 10–15 атомов» [7, с. 5].

Новая волна математизации химии начинается во второй половине XX в. в связи с созданием ЭВМ и концепции вычислительного эксперимента, в основе которого лежал метод математического моделирования. Взаимодействие математики, информатики, логики, физики и химии привело к созданию новой пограничной области знания – вычислительной химии, занимающейся расчётами строения и спектров АМС на основе квантовой химии и теоретической молекулярной спектроскопии, построением потенциальных поверхностей для предсказания энергии системы, исследованием молекулярной динамики, моделированием химических процессов и установлением связи «структура – свойство». Аналогом вычислительной химии в английской литературе выступают такие понятия, как *computer science, simulation, data mining, deep knowledge*, что свидетельствует о формировании знаний нового поколения, основанных на новых онтологиях, вырабатывающих свои когнитивные технологии и новые представления об искусственном интеллекте [6].

Вычислительные методы квантовой химии используют неэмпирические, полуэмпирические методы расчёта характеристик молекул и метод функционала плотности [1]. Неэмпирические методы не используют экспериментальных данных, единственными входными параметрами являются физические константы, методы основаны на приближенном решении уравнения Шрёдингера и пригодны для расчёта свойств простых квантово-химических систем, а многоэлектронные атомы рассчитываются с большими приближениями. Полуэмпирические методы включают в уравнение Шрёдингера экспериментальные параметры, которые его значительно упрощают¹. Метод функционала плотности служит для расчёта многоэлектронных систем, но построен на приближениях теории, а аналитические выражения для функционалов обменной и корреляционной энергии известны только для частного

случая свободных электронов. Таким образом, существуют определённые методологические барьеры в применении физических моделей, использующих различные вычислительные методы в химии.

Что касается изучения химических процессов с помощью компьютерного моделирования, здесь исследования пока не увенчались успехом, осуществить его удалось только для простых случаев, и достоверность предсказаний компьютерного моделирования гораздо ниже по сравнению с реальным лабораторным химическим экспериментом. Тут мы сталкиваемся с новым типом эксперимента, где реальный химический мир заменяется на виртуальный, создаваемый программой компьютера. Изучается этот мир с помощью метода проб и ошибок, например выборки Монте-Карло, построенной на случайности. «Поэтому то знание, которое даёт компьютерное экспериментирование, без дополнительной экспериментальной лабораторной проверки, следует называть гипотезой. Только это гипотезы не научные, а безответственные, которые выдвигаются на всякий случай: повезёт или не повезёт, а если повезёт, то можно и побороться за приоритет» [8, с. 6].

Можно также указать на гносеологические проблемы, возникающие при математическом моделировании с помощью компьютеров в плане достоверности описания объекта [9]. Математическая модель – это всегда приближенное знание, её истинность связана с точностью, зависящей от количественных показателей, связанных с измерениями массы, скорости, координат электронов в АМС, временных интервалов, многих других характеристик, полученных из спектральных данных. За истинную характеристику берётся количественная характеристика, полученная путём измерения (если, конечно, эту характеристику можно измерить), которая сравнивается с приближенным значением этой величины, полученной с помощью моделирования в компьютерном эксперименте. Если результат сравнения составляет малую величину, моделирование как инструмент познания

¹ См.: Курашов В. И. История и философия химии: учебное пособие. 2-е изд., испр. М.: КДУ, 2018. 434 с.

даёт хорошую точность в описании объекта. При этом эксперимент выступает как «внешний» критерий истины. Существуют классификации по точности используемых методов, но перед исследователем всегда стоит выбор между точностью и вычислительными затратами.

Тем не менее, сами измерения включают ошибки приборов и органов чувств, и эти ошибки могут быть значительными, поэтому актуальны новые научные направления, занимающиеся разработкой методик получения надёжных результатов. Однако бывают ситуации, когда натурный эксперимент невозможен, и тогда привлекается «внутренний» критерий оценки достоверности модели, заключающийся в сопоставлении результатов численных экспериментов, полученных из разных моделей изучаемого объекта.

Достоверность модели складывается из трёх составляющих: 1) из приближений и упрощений в предметной области знания (в квантовой химии это приводит к приближенным моделям, описывающим какие-либо свойства частиц, химическую связь или процесс, например, можно пренебрегать какими-либо свойствами частиц, также принципиально и то, что и сами эмпирические данные являются приближительными); 2) из проблемы выбора математического формализма, основанного на приближениях и допущениях математики, например, в случае наличия разнообразных алгебраических средств: матриц, групп, детерминантов, позволяющих описывать химическую связь и предсказывать реакционную способность; 3) особенностей вычислительной математики, применяющей алгоритмы, зависящие от счётных параметров, что сказывается на их точности, которая приводит к удорожанию работ.

Таким образом, критерием истины в вычислительной химии выступает математическое понятие точности модели, связанное с её внешним критерием – экспериментом, и, если он невозможен, действует внутренний критерий – сопоставление результатов, полученных из других моделей.

Проникновение новых методов математики и нового критерия истинности знания в вычислительную химию говорит об утверждении математических идеалов в химии, в этой пограничной области знания.

Можно и дальше рассматривать философско-методологические проблемы вычислительной устойчивости применяемых алгоритмов, особенности машинной арифметики для конкретных ЭВМ, верификацию и валидацию математических моделей, проблему формализации содержательного химического знания для ввода данных в модели, использование в программах логики, адекватной языку теоретической химии. Так возникает новое междисциплинарное поле деятельности для философов, логиков, математиков, химиков, психологов, лингвистов, обсуждающих эти проблемы.

Заключение

Рассмотрим свершения и прогнозы. Исследование историко-логического процесса математизации химии в контексте её взаимодействия с физикой позволяет сделать следующие выводы о свершениях как об успехах и неудачах в области теоретической химии:

– математизация химического знания при посредничестве физики всегда была односторонней, шла от математики к химии через физику, приводила к росту научного знания в различных её областях, развитию концептуальных систем химии, обогащению их новыми понятиями и представлениями, методами познания, способствовала возникновению новых пограничных междисциплинарных областей знания на стыке различных наук, таких, например, как возникновение вычислительной химии;

– рост математического мышления химиков в терминах функций и переменных по Вейлю сначала проявлялся в создании первых классификаций и периодизаций в химии. Затем математическое мышление становилось всё более операционным, что приводило к внедрению первых количе-

ственных представлений в учения о составе и структуре, дальше химии стали применять математические средства, заимствованные из классической физики, так, в учении о процессе стал постепенно применяться математический анализ;

– дальнейшая математизация химии с помощью алгебраических средств не привела к построению в ней строгих дедуктивных систем с точными предсказаниями, ожидалось, что квантовая химия даст количественные ответы на любые вопросы об ожидаемом поведении молекул в самых разнообразных условиях. Но этого не случилось из-за методологических барьеров: сложности химического объекта, а также введения в квантовую химию интуитивных гипотез, ограничений и идеализаций. Отметим, что обычному же химику-органику приходится повседневно отвечать на такие рутинные вопросы, и он их решает, опираясь на качественные представления в рамках своих концептуальных систем;

– в связи с появлением компьютеров ожидалось, что придёт конец этому царству эмпиризма, рассуждений по аналогии и научной индукции. Но этого не произошло, поскольку моделирование свойств молекул и процессов ведётся на упрощённых математических моделях, они могут не допускать экстраполяции на родственные химические системы. Применимость таких моделей ограничена реакциями, протекающими в основном газовой фазе [15];

– существуют также гносеологические проблемы компьютерного моделирования, связанных с его сущностью, в нём модели играют роль гипотез, истинность которых зависит от трёх составляющих: приближений в области математики, приближений в области химии и особенностей вычислительного аппарата, который используется на конкретной ЭВМ. Кроме того, математическое моделирование просто не может угнаться за предметом химии, который бесконечно разнообразен. Поэтому математическое моделирование с применением компьютеров в области квантовой химии нацелено на решение частных проблем химии: определение отдельных свойств

АМС, определение индексов реакционной способности отдельных реакционных групп, установление отдельных связей структура – свойство;

– необходимо сказать также об отношении химического сообщества к нарастающей математизации химии. Часть химиков занимает по этому вопросу скептическую позицию, другие верят в предустановленную гармонию между химией и математикой, ищут её в критериях красоты и простоты математических приложений в химии в принципе симметрии.

Теперь в прогнозах. Несомненно, что концептуальные системы химии будут развиваться как внутри своих относительно замкнутых учений, связанных между собой системой понятий и законов, опираясь на индуктивный способ познания, так и во взаимодействии с физикой и математикой с их дедуктивным способом построения знания, что приведёт к появлению новых областей знаний. Замкнутость концептуальных систем химии обеспечивает их самостоятельность, и отношения между химией и математикой при посредничестве физики всегда будут строиться по правилам координации, а не субординации.

Что же нас ждёт дальше в этой относительно новой области знания – вычислительной химии? Вероятно, что произойдёт окончательное исчезновение натурального эксперимента, математическое моделирование станет тотальным, усилия математиков будут направлены в сторону совершенствования алгоритмов, будут изобретены суперкомпьютеры, произойдёт освоение больших данных, возможно, будут получены новые фундаментальные знания. Круг обсуждаемых методологических вопросов математизации химии будет разрастаться в связи с включением в него всё новых тем, затрагивающих философию и методологию науки.

Статья поступила в редакцию 21.10.2022.

ЛИТЕРАТУРА

1. Александрова Г. Ю., Мовсум-заде Н. Ч., Махмутова Р. И. Математическое оформление квантово-химических расчётов // История науки и техники. 2011. Спецвып. № 2. № 8. С. 14–21.
2. Вейль Г. Познание и осмысление // Математическое мышление: сборник / сост. Ю. А. Данилов; под ред. Б. В. Бирюкова, А. Н. Паршина. М.: Наука, 1989. С. 5–168.
3. Вигнер Е. Этюды о симметрии / пер. с англ. Ю. А. Данилова. М.: Мир, 1971. 320 с.
4. Дмитриев И. С., Семенов С. Б. Квантовая химия – её прошлое и настоящее. Развитие электронных представлений о природе химической связи. М.: Атомиздат, 1980. 160 с.
5. Добротин Р. Б., Соловьев Ю. И. Вант-Гофф. М.: Наука, 1977. 272 с.
6. Загоруйко Ю. А. Семантическая технология разработки интеллектуальных систем, ориентированная на экспертов предметной области // Онтология проектирования. 2015. № 1. С. 30–46.
7. Зоркий П. М. Критический взгляд на основные понятия химии // Российский химический журнал. 1996. Т. XL. № 3. С. 3–10.
8. Зоркий П. М. Структурная химия на рубеже веков // Российский химический журнал. 2001. Т. XLV. № 2. С. 3–10.
9. Ильин В. П. Математическое моделирование и философия науки // Вестник Российской академии наук. 2018. Т. 88. № 1. С. 58–66.
10. Клайн М. Математика. Утрата определённости / пер. А. Ю. Данилов. М.: Мир, 1984. 447 с.
11. Колмогоров А. Н. Математика – наука и профессия. М.: Наука, 1988. 288 с.
12. Кузнецов В. И. Общая химия: тенденции развития. М.: Высшая школа, 1989. 288 с.
13. Мулуд Н. Современный структурализм: размышление о методе и философии точных наук / под ред., вступ. ст. Г. Курсанова. М.: Прогресс, 1973. 376 с.
14. Платон. Тимей / пер. С. С. Аверинцева // Платон. Собрание сочинений: в 4 т. Т. 3. М.: Мысль, 1994. С. 421–501.
15. Смит В., Бочков А., Кейпл Р. Органический синтез. Наука и искусство / пер. В. А. Смита, А. Ф. Бочкова. М.: Мир, 2001. 573 с.
16. Четечкина И. И. Границы познания математического метода (на примере квантовой химии) // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Философские науки. 2021. № 3. С. 84–92.
17. Четечкина И. И. Интерпретация в теоретической химии (на примере квантовой химии и классической теории строения) // Философская мысль. 2021. № 12. С. 43–53.
18. Четечкина И. И. Операционализм в науке: истоки, возможности и пределы // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Философские науки. 2017. № 3. С. 100–111.
19. Четечкина И. И. Развитие аксиоматических систем в квантовой механике // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Философские науки. 2018. № 1. С. 140–151.
20. Gestrepo G., Jose L. Mathematical Thinking in Chemistry // Hyle: International Journal for Philosophy of Chemistry. 2012. Vol. 18. № 1. P. 3–22.
21. Lloyd D. R. A Potential Infinity of Triangle Types: On the Chemistry of Plato's Timaeus // Hyle: International Journal for Philosophy of Chemistry. 2007. Vol. 13. № 2. P. 117–128.

REFERENCES

1. Aleksandrova G. Yu., Movsum-zade N. Ch., Mahmutova R. I. [Mathematical Formalization of Quantum-Chemical Calculations]. In: *Istoriya nauki i tekhniki* [History of Science and Technology], 2011, Special Issue, no. 2, no. 8, pp. 14–21.
2. Weyl H. Cognition and Comprehension (Rus. ed.: Poznanie i osmyslenie. In: Danilov Yu. A., compl. *Matematicheskoe myshlenie* [Math Minding]. Moscow, Nauka Publ., 1989, pp. 5–168).
3. Wigner E. Symmetries and Reflections (Rus. ed.: Danilov Yu. A., transl. *Etyudy o simmetrii*. Moscow, Mir Publ., 1971. 320 p.).
4. Dmitriev I. S., Semenov S. B. *Kvantovaya himiya – eyo proshloe i nastoyashchee. Razvitie elektronnykh predstavlenij o prirode himicheskoy svyazi* [Quantum Chemistry – its Past and Present. Development of Electronic Ideas about the Nature of the Chemical Bond]. Moscow, Atomizdat Publ., 1980. 160 p.
5. Dobrotin R. B., Solov'ev Yu. I. *Vant-Goff* [Vant-Hoff], Moscow, Nauka Publ., 1977. 272 p.
6. Zagorul'ko Yu. A. [Semantic Technology for the Development of Intelligent Systems, Focused on Domain Experts]. In: *Ontologiya proektirovaniya* [Ontology of Design], 2015, no. 1, pp. 30–46.

7. Zorky P. M. [Critical View on the Basic Concepts of Chemistry]. In: *Rossiiskij himicheskij zhurnal* [Russian Chemical Journal], 1996, vol. XL, no. 3, pp. 3–10.
8. Zorky P. M. [Structural Chemistry at the Turn of the Century]. In: *Rossiiskij himicheskij zhurnal* [Russian Chemical Journal], 2001, vol. XLV, no. 2, pp. 3–10.
9. Il'in V. P. [Mathematical Modeling and Philosophy of Science]. In: *Vestnik Rossijskoj akademii nauk* [Bulletin of the Russian Academy of Sciences], 2018, vol. 88, no. 1, pp. 58–66.
10. Kline M. *Mathematics: The Loss of Certainty* (Rus. ed.: Danilov A. Yu., transl. *Matematika. Utrata opredelyonnosti*. Moscow, Mir Publ., 1984. 447 p.).
11. Kolmogorov A. N. *Matematika – nauka i professiya* [Mathematics is a Science and a Profession]. Moscow, Nauka Publ., 1988. 288 p.
12. Kuznecov V. I. *Obshchaya himiya: tendencii razvitiya* [General Chemistry: Development Trends]. Moscow, Vysshaya shkola Publ., 1989. 288 p.
13. Mouloud N. Les structures, la recherche et le savoir (Rus. ed.: Kursanov G., ed. *Sovremennyj strukturalizm: razmyshlenie o metode i filosofii tochnyh nauk*. Moscow, Progress Publ., 1973. 376 p.).
14. Plato. *Timaeus* (Rus. ed.: Averincev S. S., transl. *Timej*. In: Plato. *Sobranie sochinenij*. T. 3 [Collected Works. Vol. 3]. Moscow, Mysl' Publ., 1994, pp. 421–501).
15. Smit V., Bochkov A., Cople R. *Organic Synthesis. The Science behind the Art* (Rus. ed.: Smit V. A., Bochkov A. F., transl. *Organicheskij sintez. Nauka i iskusstvo*. Moscow, Mir Publ., 2001. 573 p.).
16. Chechetkina I. I. [Limits of Knowledge of the Mathematical Method (On the Example of Quantum Chemistry)]. In: *Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo oblastnogo universiteta*. Seriya: *Filosofskie nauki* [Bulletin of Moscow Region State University. Series: Philosophy], 2021, no. 3, pp. 84–92.
17. Chechetkina I. I. [Interpretation in Theoretical Chemistry (On the Example of Quantum Chemistry and Classical Theory of Structure)]. In: *Filosofskaya mysl'* [Philosophical Thought], 2021, no. 12, pp. 43–53.
18. Chechetkina I. I. [Operationalism in Science: Origins, Possibilities and Limits]. In: *Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo oblastnogo universiteta*. Seriya: *Filosofskie nauki* [Bulletin of Moscow Region State University. Series: Philosophy], 2017, no. 3, pp. 100–111.
19. Chechetkina I. I. [Development of Axiomatic Systems in Quantum Mechanics]. In: *Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo oblastnogo universiteta*. Seriya: *Filosofskie nauki* [Bulletin of Moscow Region State University. Series: Philosophy], 2018, no. 1, pp. 140–151.
20. Gestrepo G., Jose L. Mathematical Thinking in Chemistry. In: *Hyle: International Journal for Philosophy of Chemistry*, 2012, vol. 18, no. 1, pp. 3–22.
21. Lloyd D. R. A Potential Infinity of Triangle Types: On the Chemistry of Plato's Timaeus. In: *Hyle: International Journal for Philosophy of Chemistry*, 2007, vol. 13, no. 2, pp. 117–128.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРЕ

Чечеткина Ирина Игоревна – кандидат химических наук, доцент, доцент кафедры философии и истории науки Казанского национального исследовательского технологического университета;
e-mail: iralena@mail.ru

INFORMATION ABOUT THE AUTHOR

Irina I. Chechetkina – Cand. Sci. (Chemistry), Assoc. Prof., Department of Philosophy and History of Science, Kazan National Research Technological University;
e-mail: iralena@mail.ru

ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ

Чечеткина И. И. Математизация химии: от треугольников Платона до создания вычислительной химии // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Философские науки. 2023. № 1. С. 86–96.

DOI: 10.18384/2310-7227-2023-1-86-96

FOR CITATION

Chechetkina I. I. Mathematization of Chemistry: From Plato's Triangles to the Creation of Computational Chemistry. In: *Bulletin of Moscow Region State University. Series: Philosophy*, 2023, no. 1, pp. 86–96.

DOI: 10.18384/2310-7227-2023-1-86-96