

## CHEMIA TEORETYCZNA — JEJ POWSTANIE, TREŚĆ I ZADANIA

Chemia teoretyczna wyodrębniła się jako osobna dyscyplina w ciągu ostatnich dziesięcioleci. Było to wynikiem coraz intensywniejszego przenikania do chemii metod fizyki i związanego z tym coraz bardziej matematycznego ujmowania teorii chemicznych.

Proces przenikania fizyki do chemii datuje się od samych początków nowoczesnej chemii, która powstała z chwilą wprowadzenia do badań chemicznych fizycznego przyrządu: wagi i fizycznej atomistycznej teorii materii.

Przez cały wiek XIX, wiek wielkiego rozwoju chemii nieorganicznej, analitycznej i organicznej, obserwować można, obok klasycznie „chemicznego” nurtu w analizie i syntezie chemicznej, coraz większe zainteresowanie fizycznymi zjawiskami, towarzyszącymi procesom chemicznym. Pociąga to za sobą stosowanie w chemii coraz bardziej różnorodnych, fizycznych eksperymentalnych metod badawczych. W laboratorium chemicznym pojawiają się obok wagi takie przyrządy fizyczne, jak kalorymetr, amperomierz, woltomierz, a w związku z tym powstają nowe działy chemii: termochemia, elektrochemia. Obok chemii nieorganicznej i organicznej powstaje chemia fizyczna. Jej racja bytu jest w chwili narodzin metodologiczna: ma ona za zadanie badanie zjawisk chemicznych metodami fizycznymi. Ale zagadnienia, które stają się jej treścią, dotyczą fundamentalnych dla wszelkiej chemii pytań: jak zbudowana jest materia, jaki jest związek pomiędzy jej budową, a własnościami chemicznymi i fizycznymi, jakie są prawa przemian jednej formy materii w drugą i jaki jest mechanizm tych przemian i jego przejawy.

Gwałtowny rozwój fizyki atomu, cząsteczki i jądra w XX w. powoduje również gwałtowny rozwój chemii fizycznej. Wprowadza ona do badań chemicznych coraz to nowsze metody fizyki eksperymentalnej, metody spektrograficzne, magnetyczne, elektryczne, rentgenograficzne, neutronograficzne, rezonansu magnetycznego jądrowego i elektronowego itp. Powstają nowe działy chemii fizycznej: radiochemia, chemia jądrowa, krystalochemia, magnetochemia i szereg innych. Rozwija się szybko kinetyka chemiczna, fotochemia, chemia strukturalna. Równocześnie, poprzez naukę o budowie atomu i cząsteczki i naukę o mechanizmie reakcji chemicznej, chemia fizyczna wkracza do chemii nieorganicznej i analitycznej i obejmuje ją swymi metodami. Podobny proces, choć z pewnym opóźnieniem, toczy się również w chemii organicznej. W rezultacie obie chemie, nieorganiczna i organiczna, zostają coraz bardziej opanowywane przez metody chemii fizycznej; można by powiedzieć, że cała chemia staje się chemią fizyczną, lub też odwrotnie, że chemia fizyczna zatracą swój odrębny sens stając się powszechną metodą obu chemii podstawowych.

Wskutek przenikania chemii fizycznej do całej chemii zostaje ona coraz bardziej „ufizyczniona”, zarówno jeśli chodzi o eksperymentalne metody badawcze, jak i o ujmowanie i interpretację zjawisk chemicz-

nych. Można by powiedzieć, że chemia staje się coraz bardziej częścią fizyki. Formułując jednak tak sprawę należy pamiętać, że jest to część, w której, oprócz fizycznych metod badawczych, stosowane są i stosowane być muszą specyficzne metody czysto chemiczne, obce pozostałym rozdziałom fizyki.

Chemia nieorganiczna, organiczna, analityczna i fizyczna były od początku naukami eksperymentalnymi. Pozostały też takimi w trakcie opisywanego procesu „ufizyczniania” się chemii, stając się chemicznymi analogonami fizyki doświadczalnej. Stosowanie eksperymentalnych metod fizycznych wzbogaca ogromnie ich możliwości badawcze, rozszerza zakres badań, pogłębia problematykę, katalizuje ich niebywały rozwój współczesny, o którym świadczą dobitnie aplikacje w technologii i przemysle z jednej strony, a w biologii z drugiej.

Ale aplikacja metod fizycznych w chemii przynosi ze sobą odkrycia coraz to nowych faktów, zależności i związków w zjawiskach chemicznych, przy czym z natury tych metod wynika, że są to związki i prawa ilościowe, o fizycznym charakterze. Ich teoretyczna interpretacja wymaga zatem stosowania metod fizyki teoretycznej. Dzięki temu wraz z eksperymentalnymi metodami fizyki wnika do chemii również fizyka teoretyczna.

Pierwszego wprowadzenia fizyki teoretycznej do zagadnień chemicznych dokonano jeszcze w XIX w. Było nim zastosowanie nowej podówczas dyscypliny fizyki teoretycznej: termodynamiki, do interpretacji faktów doświadczalnych, dotyczących energetyki reakcji i przemian chemicznych. Wyniki tej aplikacji były niesłychanie płodne i dla chemii i dla termodynamiki. Ogromny materiał faktyczny, bardzo liczne prawidłowości i zależności fenomenologiczne, zostały jednolicie wytłumaczone i ze sobą powiązane, nowe prawa i fakty doświadczalne zostały trafnie przewidziane. Chemia stała się nauką o szerokiej teoretycznej perspektywie, uzyskując w tym względzie rangę równorzędną z fizyką. Termodynamika umożliwiła rozwiązanie problemu powinowactwa chemicznego, energetyki reakcji chemicznych, ogólne, ścisłe i usystematyzowane ujęcie statyki chemicznej, teorii równowagi układów wieloskładnikowych i wielofazowych, teorii przejść fazowych, teorii ogniw galwanicznych i wielu innych ważnych zagadnień chemicznych. Powstała termodynamika chemiczna, obszerna, szeroko rozbudowana gałąź nauki. Również i dla samej termodynamiki zastosowanie jej do problemów chemicznych było bardzo płodne. Tu właśnie świeciła ona swe największe triumfy, tu doskonalila swe metody i precyzowała swe pojęcia.

Z kolei, jeszcze w XIX w., zastosowano do kinetycznej interpretacji zjawisk chemicznych mechanikę statystyczną, a w XX w., wieku rozwoju nauki o atomie, cząsteczce i jądrze, nową rewolucyjną mechanikę kwantową. Zapoczątkowało to drugi, niesłychanie płodny dla chemii okres rozwoju. Metodami mechaniki kwantowej zaatakowane zostały skutecznie zagadnienia budowy atomu, układu okresowego, wartościowości, własności optycznych i magnetycznych materii, wiązań chemicznych, struktury i własności cząsteczek, ich reaktywności chemicznej, struktury i własności kryształów, metali, związków międzymetalicznych, zjawiska ferromagnetyzmu, antyferromagnetyzmu, ferrodielektryczności, własności półprzewodników, zjawiska katalizy, zagadnienia struktury cieczy i wiele innych. Metodami mechaniki statystycznej zaatakowano zagadnienia kinetyki procesów chemicznych, przemian fazowych, zjawisk nieodwracalnych, struktury cieczy i gazów. Termodynamika sta-

tystyczna pozwoliła do końca rozwiązać zagadnienia statyki chemicznej i stałych równowagi. W rezultacie tego gwałtownego rozwoju powstały nowe działy nauki: chemia kwantowa i chemia statystyczna. Również i tym razem zastosowanie do zagadnień chemicznych okazało się bardzo płodne dla samych aplikowanych teorii. Największy rozwój i triumfy zawdzięcza mechanika kwantowa tej właśnie aplikacji. Podobnie i mechanika statystyczna doskonalila się w rozwiązywaniu zagadnień chemicznych.

Na koniec w trzech ostatnich dziesięcioleciach zastosowano w chemii zupełnie nową gałąź fizyki teoretycznej, termodynamikę procesów nieodwracalnych. Doniosłość tej metody dla chemii łatwo sobie uprzytomnić, gdy się pamięta, że wszystkie realnie zachodzące procesy fizykochemiczne są nieodwracalne. Nową metodą zostały ujęte zjawiska takie, jak dyfuzja, termodyfuzja, procesy elektrochemiczne i elektrokapilarne, potencjał elektrodyfuzyjny, przejścia fazowe, zjawiska elektrokapilarne, reakcje chemiczne, zjawiska relaksacji itp. Również i dla termodynamiki procesów nieodwracalnych zastosowanie jej w fizykochemii miało decydujące znaczenie, powodując żywy jej rozwój.

Coraz bogatszy materiał faktyczny, gromadzony przez chemię eksperymentalną, a wymagający teoretycznej interpretacji powoduje coraz większą potrzebę teoretycznych prac naukowych. Z drugiej strony rozwój chemii eksperymentalnych obejmuje coraz to nowe dziedziny i różnicuje coraz bardziej swe metody badawcze. Równoczesne kompetentne opanowanie obu metod, doświadczalnej i teoretycznej, przez jednego człowieka staje się niemożliwe. Ta sytuacja, jak również opisany wyżej rozwój teoretycznych badań, spowodowały wyodrębnienie się w ostatnich latach chemii teoretycznej jako osobnej dyscypliny naukowej.

Chemia teoretyczna stoi w analogicznym stosunku do chemii eksperymentalnej (nieorganicznej, organicznej, fizycznej), jak fizyka teoretyczna do fizyki doświadczalnej. Wspomnieliśmy już o relacji między chemiami doświadczalnymi, a fizyką doświadczalną. Powołując się na tę relację można również powiedzieć, że chemia teoretyczna stoi w podobnym stosunku do fizyki teoretycznej, jak chemia eksperymentalna do fizyki eksperymentalnej. Zgodnie z tym chemia teoretyczna jest specyficzną chemiczną częścią fizyki teoretycznej, a treść jej stanowią pewne metody fizyki teoretycznej w zastosowaniu do układów chemicznych. Jej głównymi zasadniczymi działaniami są termodynamika chemiczna, fenomenologiczna i statystyczna, klasyczna i nieodwracalna, mechanika statystyczna układów chemicznych i chemia kwantowa. Z uwagi na specyficzną naturę układów chemicznych, które te teorie opisują, stanowią one chemię teoretyczną, a nie fizykę teoretyczną, tak samo jak fizyczne badania eksperymentalne zjawisk chemicznych stanowią chemię eksperymentalną, a nie fizykę doświadczalną. Wynika stąd konieczność gruntownego wyszkolenia chemicznego chemika teoretyka, jakiego nie potrzebuje fizyk teoretyk.

\*

Jak wspomniano wyodrębnienie się w nauce chemii teoretycznej datuje się od niedawna. Niemniej można już dziś wymienić szereg ośrodków, w których dyscyplina ta rozwija się żywo, by wspomnieć tylko nazwiska Coulsona z Oxfordu, Longin Higginsa z Cambridge, Löwdina z Upsali, Paulinga z Kalifornii, Syrkinia i Diatkina z Moskwy, Prigogine'a z Brukseli, Pullmana z Paryża.

Potrzeba zainicjowania systematycznych prac naukowych oraz szkolenia młodej kadry w zakresie chemii teoretycznej dawała się odczuć również i w chemii polskiej. W związku z tym Ministerstwo Szkolnictwa Wyższego kreowało w 1952 r. na UJ Katedrę Chemii Teoretycznej, której zadaniem jest systematyczne szkolenie młodej kadry chemików teoretyków. W pracach Katedry uwzględniono dwa główne kierunki chemii teoretycznej: termodynamikę chemiczną i chemię kwantową, szkoląc młode grupy naukowe pracujące w obu tych kierunkach. Zgodnie z tym przy Katedrze istnieją dwa Zakłady: Termodynamiki i Teorii Procesów Nieodwracalnych, oraz Chemii Kwantowej. Na UJ habilitowano dotąd w zakresie chemii teoretycznej czterech młodych pracowników nauki: doc. A. Witkowskiego, doc. A. Gołębskiego, doc. K. Zalewskiego, doc. A. Fulińskiego. Dwaj z nich, doc. A. Witkowski i doc. A. Gołębski, są kierownikami zakładów w Katedrze. Równocześnie i w Warszawie, pod kierunkiem prof. W. Kołosa, rozwija się coraz żywiej grupa chemii kwantowej. Ostatnio Ministerstwo Szkolnictwa Wyższego kreowało na Uniwersytecie Warszawskim drugą w Polsce Katedrę Chemii Teoretycznej, powierzając jej kierownictwo prof. Kołosowi. Trzecim ośrodkiem, w którym, w kontakcie z prof. Kołosem, rozwija się żywo chemia kwantowa, jest Uniwersytet im. Mikołaja Kopernika w Toruniu, gdzie pracuje liczna grupa chemików kwantowych z drem W. Woźnickim i drem L. Wolniewiczem na czele.

W rezultacie liczba prac naukowych z zakresu chemii teoretycznej, pojawiających się rocznie w Polsce, jest już wcale pokaźna, a młoda kadra coraz bardziej liczna. W kształceniu tej kadry przychodzi z pomocą Ministerstwo Szkolnictwa Wyższego, umożliwiając młodym pracownikom długotrwałe pobyty za granicą u wybitnych uczonych oraz studia doktoranckie. Toteż, jeśli praca szkolenia kadr przebiegać będzie nadal tak jak dotychczas, powinniśmy doczekać się poważnej naukowej szkoły polskiej w chemii teoretycznej.

Zadania jakie stoją przed chemikami teoretykami w Polsce są trojakie. Pierwszym i najbardziej ambitnym, ale realnym i możliwym do osiągnięcia, jest wspomniane przed chwilą utworzenie polskiej szkoły chemii teoretycznej. Aby to osiągnąć, trzeba, po pierwsze, przysposabiać stale coraz to nowe młode kadry naukowe, szkoląc je na najwyższym poziomie, wysyłając za granicę i dbając o ich systematyczną twórczość naukową. Po wtóre należy zapewnić im możliwość pracy zespołowej przy katedrach zespołowych, raczej osobowo licznych. Ośrodki dysponujące takimi zespołami powinny z kolei szkolić pracowników naukowych dla innych ośrodków, w których na razie takich zespołów nie ma. Należy też, po trzecie, dbać o stały kontakt naukowy pomiędzy ośrodkami, zapewniający współpracę i dyskusję wzajemną, oraz bliskie, koleżeńskie współżycie w pracy badawczej. Uzyskać to można organizując wspólne szkoły letnie i spotkania robocze. Na szkoły takie czy spotkania powinno się również zapraszać uczonych z innych krajów, nawiązując w ten sposób naukową dyskusję z ośrodkami zagranicznymi.

Drugim zadaniem stojącym przed chemikami teoretykami w Polsce jest nawiązanie żywej współpracy z chemikami eksperymentatorami. Zadanie to pozornie łatwe, napotyka niekiedy na poważne trudności i będzie mogło być wykonane w pełni dopiero po pewnym czasie. Przyczyna tkwi w tym, że dawne wykształcenie chemika nie dawało przygotowania z fizyki teoretycznej, wskutek czego eksperymentatorowi trudno jest nieraz znaleźć wspólny język z teoretykiem i nawiązać naprawdę żywy

i ścisły kontakt naukowy. Rzecz ta zmieniać się będzie z biegiem czasu, gdyż nowe programy studiów chemicznych zapewniają już obowiązkowy kurs fizyki teoretycznej. Osiągniemy zatem po pewnym czasie w chemii stan analogiczny do tego, jaki jest w fizyce, gdzie w czasie studiów fizyk zapoznaje się z ogólnym kursem fizyki teoretycznej, dzięki czemu fizyk eksperymentalny znaleźć może łatwo wspólny język z fizykiem teoretykiem. Niemniej obecna i przejściowa trudność nie może przesłonić wagi i znaczenia żywej współpracy chemików eksperymentalnych i teoretycznych dla właściwego rozwoju chemii. Współpraca chemika eksperymentalnego i teoretyka jest dla obu koniecznością. Bez niej ma dłuższą metę eksperyment staje się jałowy, teoria oderwana i zwieszona w próżni.

Trzecim zadaniem chemików teoretyków jest szkolenie młodych chemików w szkołach wyższych w zakresie obowiązkowych kursów z chemii teoretycznej, jak też wykładów monograficznych, seminariów i prac magisterskich na latach wyższych. Jest też ich obowiązkiem doszkalanie w zakresie chemii teoretycznej młodej pomocniczej kadry naukowej chemików eksperymentalnych, drogą koleżeńskiej pomocy, w postaci czy to wykładów, czy seminariów, czy organizowanych specjalnych kursów międzyosrodkowych.

Jakie są perspektywy rozwoju chemii teoretycznej w Polsce? Sądzę, że bardzo dobre. Sądzę tak dla trzech przyczyn. Po pierwsze dlatego, że rozwój chemii otwiera przed chemią teoretyczną ogromne perspektywy. Po wtóre dlatego, że Ministerstwo Szkolnictwa Wyższego otacza chemię teoretyczną życzliwą opieką. Inicjatywa stworzenia tego kierunku w Polsce i stworzenia warunków pracy dla zrealizowania tej inicjatywy są dziełem tegoż Ministerstwa. Po trzecie dlatego, że żywię nadzieję, iż Ministerstwo zaopiekuje się z kolei wkrótce i energicznie unowocześnieniem i współczesnym wyposażeniem uniwersyteckich pracowni naukowych i szkoleniowych chemii eksperymentalnych, co jest warunkiem *sine qua non* osiągnięcia w Polsce przez te chemie stanu i rozwoju odpowiadającego w pełni drugiej połowie XX w. Żywy zaś i nowoczesny rozwój chemii eksperymentalnych — nieorganicznej, organicznej i fizycznej — stwarza warunki żywego rozwoju teorii.

Kraków, luty 1966 r.