

РЕДУКЦИОНИЗМ В НАУКЕ – КЛЮЧ К НАДЁЖНОМУ ОБРАЗОВАНИЮ

Бучаченко А.Л.

Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

Редукционизм – глобальный и универсальный принцип науки, строгий и безупречный критерий правды в её открытиях и идеях. В соответствии с этим принципом, фундаментальные законы, записанные на нижних этажах знания, на нижних ступенях иерархии наук, должны абсолютно точно исполняться на верхних этажах и верхних ступенях. Новое знание включает старое как составную часть.

Так, общая теория относительности не отменила классическую теорию тяготения – она её включила в себя. Только заголовки бульварных газет могли кричать: «Ньютон ошибался!». Специальная теория относительности вовлекла в себя электромагнитную теорию Максвелла. Квантовая механика не уничтожила классическую, ньютоновскую механику, она взяла её как свою составную часть, как предельный случай малых скоростей и больших масс. Теория электро-слабых сил стала обобщением электромагнитной теории и теории слабых ядерных сил, ответственных за радиоактивный распад ядер. Теория квантовых струн не уничтожила стандартную модель, она дала ей новый смысл и новое звучание.

Современная синтетическая теория биологической эволюции ничего не изменила в базовой дарвиновской теории; она её расширила

и усилила, дополнив блестящими молекулярно-генетическими и палеонтологическими доказательствами.

Нет фундаментальных и самостоятельных, автономных законов, управляющих поведением сложных физических, химических или биологических систем. Нет нужды и смысла описывать структуру и функции мозга уравнениями квантовой механики, но нет также никаких сомнений, что в этой структуре и в этих функциях ничто не нарушает законы квантовой механики. Она – фундамент химии и, следовательно, биологии. Уберите её – и всё рухнет, ведь непонимание законов не отменяет самого их существования.

Редукционизм – это не просто способ иерархического мышления; что ещё важнее – это принцип устройства мироздания, принцип его фундаментального объединения и монументального единства. Мир именно таков, он логичен, прост и ясен, ибо в его сердце стучит редукционизм.

В науке понятие ложного и фальшивого определяется почти безошибочно через принцип редукционизма. Если новая идея или новый результат не удовлетворяет принципу редукционизма, если они не включают известное знание, а противоречат ему, надо сильно насторожиться и заподозрить ошибочность и идеи, и результата. Нет, не отбросить, а подвергнуть всестороннему испытанию на научную достоверность и прочность.

Редукционизм – единственный надёжно аргументированный критерий лживой, фальшивой науки. Это фильтр, отмечающий лживое, рекламное, недостоверное. Когда предлагают торсионные двигатели с коэффициентом полезного действия больше ста процентов – это враньё. Медальоны бессмертия, магнит для денег, астрологические прогнозы, квантовая медицина – всё это смешные глупости (даже красивое слово «квантовая» не спасает!).

Стивен Вайнберг¹ представил такую ситуацию. Страдающему неким недугом человеку предлагают избавиться от страданий двумя

¹ Нобелевский лауреат по физике 1979 года. В его книгах популяризация науки сочетается с её историей и философией.

способами: прикосновением священной особы короля или употреблением куриного бульона. Ясно, что человек выберет второе – интуитивно, неосознанно он воспользуется принципом редукционизма и сделает правильный выбор.

Исповедники лженауки, спекулирующие на невежестве и доверии, часто опираются на слова Рабиндраната Тагора: «Если мы закроем дверь перед заблуждением, как же тогда войдёт Истина?». Но это чистейшая демагогия, хотя и украшенная паутиной красивых слов. Здесь есть две крайности – либо полное игнорирование редукционизма (что, конечно, есть признак глубокого невежества), либо возведение его в абсолют, что опасно. Ещё Конфуций предостерегал: «Изучать что-либо и не задумываться над выученным – абсолютно бесполезно. Задумываться над чем-либо, не изучив предмета раздумий, опасно». Конечно, можно вульгарно и примитивно свести химию к фундаментальной физике и квантовой механике, а всю биологию – к химии. Но в этом нет нужды, и есть опасность потерять многие чарующие понятия, полезные знания и глубину понимания.

Химический редукционизм

В химии нет собственных, автономных принципов и законов, в которых не было бы присутствия квантовой механики или физики. Но есть и то, чего нет в квантовой механике. Поверхностное натяжение, влажность, вязкость – этих свойств нет у отдельной молекулы, это свойство химических ансамблей. В химии есть когерентные явления, когда химические процессы организованы, упорядочены в пространстве и времени. Но они относятся к ансамблям реагирующих молекул; в физике квантовые биения (тоже когерентный процесс) относятся к состояниям частиц (например, возбуждённого атома). Но есть в физике и когерентные ансамбли; именно они – источник лазерного излучения.

Квантовая механика вычислила и определила для химии свойства простейших химических объектов – атомов водорода и гелия, молекул

водорода, воды и других простейших двух- и трёхатомных молекул. Она дала ясное понимание таких фундаментальных понятий химии, как химическая связь, обменное взаимодействие электронов, энергетическая поверхность реакции. Её наследница, квантовая химия, научилась рассчитывать и предсказывать свойства многоатомных молекул, доведя технологию таких расчётов до рецептов (известные методы самосогласованного поля Хартри-Фока, теория функционала плотности и др.). Она создала новые рецепты расчётов поистине огромных ансамблей. В них поведение малого числа главных, ключевых атомов описывается квантовой механикой, а всё огромное множество второстепенных, сателлитных атомов описывается методами молекулярной динамики. В этих методах используют межатомные потенциалы всех пар атомов и их динамическую эволюцию во времени. Подобная технология успешно и достаточно точно имитирует естественную (тепловую) жизнь молекул. Однако ни один грамотный химик не станет рассчитывать молекулу ДНК с её миллионами атомов, и отнюдь не из-за трудоёмкости этого расчёта, а из-за его ненужности – такой расчет ничего не даст для понимания структуры и функций ДНК. А утверждать и доказывать в очередной раз точность уравнения Шредингера и абсолютную исправность квантовой механики – это мелкое сумасшествие. Редукционизм безупречен!

Как фундаментальная наука, химия сформировалась в начале XX века вместе с новой, квантовой механикой. Химия – наука квантовая. И это абсолютная истина: во-первых, все объекты химии – атомы, молекулы, ионы и т.д. – являются квантовыми (даже для таких крупных молекул, как фуллерены C_{60} и C_{70} , недавно была обнаружена интерференция их рассеяния – прямое свидетельство их волновой, квантовой природы); во-вторых, центральное событие в химии – химическая реакция, т. е. перегруппировка атомных ядер и преобразование электронных оболочек, электронных одежд молекул-реагентов в молекулы-продукты – это квантовое событие.

Три главных элемента квантовой механики составили прочный и

надёжный физический фундамент химии:

– понятие электронной волновой функции, описывающей распределение заряда и углового момента (спина) электрона в пространстве и времени;

– принцип Паули, организующий электроны по энергетическим и спиновым состояниям, «рассаживающий» электроны по атомным и молекулярным орбиталям (волновым функциям);

– уравнение Шредингера как квантовый наследник уравнений классической механики.

Осознание и освоение этих трёх «китов» делает абсолютно ясным и прозрачным всё величественное, монументальное здание химии; из них рождается всё богатство и многообразие химии, в них заложена её стройная логика, красота и совершенство. Именно они преобразовали Периодическую систему элементов в Периодический Закон, который управляет заполнением электронных оболочек атомов и молекул и диктует химическое поведение атомов, из него следует стройная, строгая и безупречная теория химического строения Вещества.

Конечно, в химии можно успешно работать и делать замечательные вещи, не зная квантовой механики и не пользуясь ею. Но тогда исчезает целостное восприятие и ощущение единства химии, осознание её как единой системы. Без квантовой механики химия распадается на куски, каждый из которых, безусловно, и красив, и ценен. Однако величие и монументальность здания всей химии можно увидеть только на фундаменте квантовой механики, и это приносит удивительную ясность понимания простоты мира.

Уравнение Шредингера – ключ всей химии. Его «химический» смысл легко увидеть, решив это уравнение для простейшей химической частицы – атома водорода, включающего протон и электрон.

Волновые функции, базовые атомные орбитали – из них составлены электронные оболочки всех атомов и молекул, всех химических частиц, всего химического мира, всей Вселенной.

Математическое изящество химии создаёт именно волновая функция как решение уравнения Шредингера.

Этих функций всего шестнадцать: одна *s*-орбиталь, три *p*-орбитали, пять *d*-орбиталей и семь *f*-орбиталей; пространственная ориентация и форма всех шестнадцати орбиталей хорошо известны. И как из комбинации простых шахматных ходов рождаются бесконечные шахматы, как из семи простых музыкальных нот рождается волшебная и вечная музыка, так из шестнадцати простых атомных орбиталей – химических нот, сотворена могучая и неисчерпаемая химия, построена вся химическая архитектура мира. Наука и искусство химического синтеза – это знание и предвидение того, как надо комбинировать орбитали атомов, чтобы осуществлять химическую сборку атомов, создавая заданные молекулы и вещества. По этим нотам играют все лица, действующие на химической сцене – электроны, атомы, молекулы, ионы, кластеры и т.д. – создавая химическую музыку веществ и процессов.

Когда атомы объединяются в молекулы, они объединяют свои атомные орбитали. Эти, теперь уже обобществленные атомные орбитали создают общие молекулярные орбитали – многоэлектронные волновые функции. Молекулярные орбитали, в свою очередь, являются комбинацией атомных орбиталей и они составляют химическую партитуру.

Когда химики создают молекулы, синтезируют вещества, управляют химическими реакциями, они фактически исполняют эту химическую партитуру – она либо уже известна и написана ранее, если делается известное вещество или проводится известная реакция, либо пишется, сочиняется заново, если речь идет о новых веществах и новых процессах. В химии всё как в музыке: и то, и другое либо исполняют, либо сочиняют. Химия – это музыка электронных атомно-молекулярных орбиталей, но чтобы она звучала – нужны хорошие музыканты: и исполнители, и композиторы, и оркестры, и дирижеры. Как и в музыке, в химических нотах есть свои диезы и бемоли – гибридизация и неподелённые электронные пары; есть свои октавы –

главные квантовые числа, задающие «энергетическое» звучание орбиталей.

Стоит обратить внимание на важнейшее обстоятельство: потенциальная энергия электрон-протонной химической системы включает единственное взаимодействие – кулоновское. Все базовые атомные орбитали, эти химические ноты, построены только на кулоновском потенциале. Верно ли это? И не нужно ли учитывать какие-либо другие существенные взаимодействия (подобно тому, как в ядерной физике для описания сил между нуклонами и элементарными частицами необходимо учитывать сразу несколько взаимодействий различной природы)?

Ответ на этот фундаментальный вопрос был получен экспериментально. Идея эксперимента проста и красива: пучок атомов (например, кальция или меди) облучают поляризованным светом; который возбуждает, т. е. переносит электрон на заданную атомную орбиталь. Таким образом готовят атомы с электронами, населяющими эти орбитали. Далее на этот пучок направляют зондирующий пучок инертных атомов (например, гелия) и наблюдают рассеяние этих атомов на электронах, заселяющих заданные орбитали рассеивающих атомов. Анализ диаграммы рассеяния помогает воспроизвести форму рассеивающего потенциала.

Результаты этих экспериментов поразительны: оказалось, что форма рассеивающего потенциала точно воспроизводит форму атомной орбитали, выведенной из уравнения Шредингера! Можно, конечно, сказать, что это банально, что это ожидалось, но не надо забывать, что волновые функции (атомные орбитали) были получены на кончике пера и на острие мысли – из уравнения Шредингера с кулоновским потенциалом. И отсюда следуют сразу два фундаментальных вывода.

Во-первых, уравнение Шредингера правильно описывает химический мир (а значит, и весь мир); нет ни одного факта или явления физического или химического мира, которые противоречили бы этому уравнению.

Во-вторых, экспериментальное доказательство точности атомных базисных орбиталей – это не просто торжество интеллекта (и в эксперименте, и в теории); это ещё и надёжное свидетельство того, что в химии работает только кулоновское взаимодействие. И волшебство химии, её очарование состоит в том, что из этой кулоновской единственности, кулоновской бедности рождается богатство химических связей, разнообразие химических частиц, богатство механизмов реакций и химических состояний.

С точки зрения канонической физики химия представляется простой: действительно, нужно только учесть кулоновское отталкивание между отрицательно заряженными электронами, между положительно заряженными ядрами, а также учесть кулоновское притяжение электронов к ядрам. И, как может показаться ортодоксальному физику, в химии нечего делать, а вся химия просто сводится к физике. И это – предельная формула примитивного редукционизма.

Но простота эта – ложная, иллюзорная. Во-первых, химические системы – всегда многочастичные, они включают много электронов и много ядер, а уже задача трёх тел в физике не решается строго. Во-вторых, в кулоновском взаимодействии между электронами есть часть, зависящая от электронного спина (она следует из антисимметрии полной волновой функции по принципу Паули, ибо электроны являются фермионами – так уж устроен мир). Эта часть кулоновской энергии называется обменной энергией; она выстраивает угловые моменты (спины) электронов и создаёт ферромагнетизм – свойство, на котором построены ферромагнитные вещества, составляющие основу электрогенераторов, радио, телевидения, связи, стиральных машин, лифтов, компьютеров и прочих бесчисленных благ цивилизации. Можно образно сказать, что если химический мир построен «на Кулоне», то цивилизация держится «на Паули».

Можно доверять Ричарду Фейнману², который заметил, что «химия – самая сложная физика». Такое мог заявить только великий физик, хотя этот комплимент является сильным преувеличением. И в физике, и в химии всё познанное становится простым, ясным и прозрачным. Смысл игры, именуемой наукой, в этом и состоит – превращать сложное в простое, непредсказуемое – в неизбежное.

Физика и химия всегда идут рядом. Химики открывают новые вещества, новые реакции, новые явления; физики ищут объяснения свойств, дают физические механизмы реакций, строят физические модели и теории химических явлений, иногда предсказывают. Химию нельзя свести к физике, каждая из этих наук прекрасна, имеет свой предмет, свои методы познания, свой почерк и своих Мастеров, своих гениев.

Одновременно из всего вышеизложенного следует, что невозможно получить фундаментальное химическое образование, не опираясь на могучий фундамент физики.

Пройдя весь путь редукционизма, химия вышла на новые дороги создания сложных, высокоорганизованных химических структур, на синтез многоатомных ансамблей, способных выполнять новые химические функции. Комбинация принципов ковалентной и нековалентной химии открывает пути к новым совершенным структурам с новыми функциями, превосходящими даже то, что создала Природа...

Биологический редукционизм

Современная биология энергично идёт по пути редукционизма, по пути химии живого. Старт этому движению дала потрясающая догадка Д. Уотсона и Ф. Крика³ о структуре молекулы ДНК – этой магической молекулы, иконы молекулярной биологии XX века. Траектория движения отмечена замечательными открытиями во всех

² Нобелевский лауреат по физике 1965 г., автор знаменитого курса лекций по общей физике («Фейнмановские лекции...»).

³ Американский биохимик Д. Уотсон и английский физик Ф. Крик – Нобелевские лауреаты 1962 г. по физиологии и медицине.

областях науки о живом мире – о растениях и вирусах, микробах и грибах, о животных и о биологической истории человечества. Мы знаем, как растёт корень, как синтезируется АТФ – главный энергоноситель в живом организме, как сокращаются мышцы, как гены управляют синтезом белка, как функционируют иммунная и сигнальная системы, как происходит запоминание и как работают синапсы. Вся биология с её ДНК и РНК, с её ферментами и рибосомами, синапсами и нейромедиаторами – всё это химия, своеобразная, изящно устроенная, прекрасная и чарующе умно функционирующая.

В биологии нет ничего, что было бы автономным, независимым от химии. Разнообразие лиц, цвета глаз, рост, ум, голос, характер, талант – всё это из генов, всё это из биохимии. А в ней происходят те же реакции, что и в нормальной химии – распад и образование межатомных химических связей.

Непрерывные успехи биологии вдохновили Френсиса Крика провозгласить, что «конечная цель современного движения в биологии – объяснить всю биологию в терминах химии и физики». Это предельно ясное выражение крайнего редукционизма, оно привлекательно, оно зовёт к новым открытиям.

Но оно ограничено, более того – оно примитивно. И как химию нельзя свести к физике, так и биологию нельзя свести к химии – биология в иерархии наук занимает высшую позицию.

Конечно, молекулярные машины, в которых электрический потенциал преобразуется в механическое движение молекул, есть и в химии. Но это эпизодические структуры и явления. В биологии они стали высокоорганизованными, системными, функциональными. В химии нет таких совершенных устройств, как ДНК-полимераза, рибосома или синапс, хотя то, что происходит в них – чистая химия.

В химии есть когерентные процессы, организованные синхронно во времени и пространстве. Но такой уровень когерентности как в мышечном сокращении, которое обеспечивается когерентным синтезом и распадом аденозинтрифосфата, или как в процессах

запоминания и мышления, которые обеспечиваются когерентным выбросом нейромедиаторов и когерентными реакциями нейронов и синапсов – для химии недостижим, здесь биология исключительна и непревзойдённа!

Но если биолог открывает реакцию, которой нет в химии – это подозрительно. Возможно, это окажется правдой, если пройдёт через фильтр редукционизма. И этот фильтр – в структуре и энергетике электронных оболочек, в электрон-ядерных взаимодействиях, в химическом понятии реакционной способности. Химики и особенно физико-химики это прекрасно знают. Повторим: редукционизм в биологии, как и в химии, и в науке вообще – критерий правды.

Но... это не путь к Храму, не путь к пониманию Жизни. В 2006 г. в Вестнике Российской академии наук появилась статья академика Е.Д. Свердлова, нашего выдающегося генетика, с вопросительным названием «Биологический редукционизм уходит. Что дальше?». Пафос статьи состоит в мудром признании, что чем масштабнее и глубже знания о структуре и функционировании биосистем (на разных уровнях организации), тем дальше уходит и расплывается ответ на главный вопрос – что есть Жизнь. Е.Д. Свердлов полагает, что продолжая успешно двигаться по пути редукционизма, нельзя игнорировать и обратный путь – путь интегрирования, обобщения, путь к новому, высшему пониманию Жизни. И первой вехой в этом движении должна стать живая клетка, «атом» Жизни. Всякое глубокое и полное понимание нуждается в преодолении обеих дорог – и в сторону редукционизма, и обратно.

Обратный путь уже энергично осваивается биологией: от белка к геному (а не от генома к белку), синтетический геном, синтетическая клетка – вот первые шаги на этом трудном, но замечательном пути.

Мудрый Нильс Бор как-то заметил, что существование жизни в биологии надо рассматривать как существование кванта в квантовой механике – ни то, ни другое нельзя вывести из всех существующих и доступных человечеству знаний. Множественные (и даже страстные) попытки дать теории, альтернативные квантовой механике, в которых

можно было бы уйти от квантов, кончились безуспешно. По поводу жизни безнадёжный вывод пока неочевиден. Он может появиться лишь на пути, встречном редукционизму, пути с неопределённым финишем, но полном неожиданных открытий.

Вместо заключения

Науке старательно навязывают философию извне. Но у неё есть своя, внутренняя философия – редукционизм. И это самая эффективная, безупречная философия, выработанная самой наукой. В ней заложены строгие критерии точности и надёжности всего того, что достигается наукой. И это великий принцип, на котором строится надёжное и сильное образование, ибо оно стоит на плечах науки!