

POVIJEST KEMIJE I KEMIJSKOG INŽENJERSTVA

Sukob stare i nove kemije u Hrvatskoj

N. Raos*

Ovo djelo je dano na korištenje pod
Creative Commons Attribution 4.0
International License



Institut za medicinska istraživanja i medicinu rada, Ksaverska cesta 2, p.p. 291, 10 001 Zagreb

Sažetak

Nova kemija, koja je u 20. stoljeću nastala kroz četiri revolucije (instrumentalnu, teorijsku, biološku i informatičku), pojavila se nakon Drugog svjetskog rata i u Hrvatskoj, ponajviše zahvaljujući školovanju naših kemičara u inozemstvu. To je dovelo do sukoba starih (tradicionalnih) i novih kemičara, ponajviše kemičara-teoretičara. Sukob se očitovao u dva vida: fundamentalnom, jer stari kemičari nisu prihvaćali da se u kemiji može istraživati bez laboratorija, i pragmatičnom, jer se pojavio problem vrednovanja znanstvenog rada brojem publikacija. Također se analiziraju posljedice sukoba kemičara-teoretičara i kemičara-eksperimentatora kao i razlozi njegovog jenjavanja u 21. stoljeću.

Gljučne riječi

Povijest kemije, hrvatska kemija, kvantna kemija, matematička kemija, računalna kemija, Krešimir Balenović, scientometrija

Uvod

“Kemijski se laboratorij više promijenio između 1950. i 2000. godine nego od 1600. do 1950.”, kaže Pierre Laszlo, ili – još dojmljivije – “the NMR tube replaced the test tube”.¹ Preciznije rečeno, kemija je u 20. stoljeću doživjela četiri revolucije: instrumentalnu, teorijsku, biološku i informatičku.² Kao što je u 18. stoljeću razvoj kemijskog pribora (zahvaljujući prije svega boljoj tehnologiji stakla)³ stvorio pretpostavke za kemiju (i fiziku) plinova (pneumatsku kemiju),⁴ a ona opet dovela do atomske teorije, tako je i u 20. stoljeću razvoj instrumenata za istraživanje pojava na atomskoj razini doveo do kvantne teorije i molekularnog modeliranja. Osnovni pojam u prvoj kemijskoj revoluciji bila je masa, osnovni instrumenti vaga i plinska bireta; u revoluciji 20. stoljeća osnovni pojam postaje elektron, a prvi instrument spektrometar. Kemija je doprla do razine atoma i molekula.

Ono što je pokrenulo **prvu (instrumentalnu) revoluciju** bili su spektrometri za snimanje u vidljivom i ultraljubičastom dijelu spektra. Stoga, početak današnje kemije možemo smjestiti u 1860. godinu kada je Robert Wilhelm Bunsen (1811. – 1899.), zahvaljujući plamenoj emisijskoj atomskoj spektroskopiji, koju je razvio s Gustavom Robertom Kirchhoffom (1829. – 1887.), otkrio novi element, cezij. Röntgenovo otkriće nove vrste zračenja 1895. dovelo je pak do rendgenske difrakcijske analize, kojom su 1913. godine otac William Henry Bragg (1862. – 1942.) i sin William Lawrence Bragg (1890. – 1971.) riješili kristalne strukture NaCl, KCl i KBr, a potom strukture dijamanta, kalcita i pirita.^{5,6} Nakon toga je slijedila NMR-spektroskopija, koju su 1945. neovisno jedna od druge razvile dvije istraživačke skupine; prvu je vodio Felix Bloch (1905. – 1983.), a drugu Edward M. Purcell (1912. – 1997.).⁷ Spektrometrija

masa (MS), metoda koja se primjenjivala u fizici za detekciju i odvajanje izotopa, našla je 1960-ih godina primjenu u analitičkoj kemiji organskih spojeva.⁸ Sredinom stoljeća doživljava procvat i kromatografija, koju je 1906. iznašao ruski botaničar Mihail Semjonovič Cvjet (1872. – 1920.),⁹ no počela se naširoko primjenjivati tek od 1943. godine kada su Archer John Porter Martin (1910. – 2002.) i Richard Laurence Millington Syngé (1914. – 1994.) razvili metodu kromatografije na papiru.¹⁰ Treba spomenuti i široku primjenu radioaktivnih izotopa u istraživanju mehanizama kemijskih, a posebice biokemijskih reakcija do koje dolazi nakon Drugoga svjetskog rata.

Druga (teorijska) revolucija bila je povezana s razvojem kvantne fizike, koji je omogućio ne samo dublji uvid u strukturu atoma i molekula** nego i tumačenje spektra, a potom istraživanje mehanizama kemijskih reakcija, drugim riječima, razvoj fizikalno-organske kemije. U korijenu druge kemijske revolucije 20. stoljeća leže kvantni modeli atoma, počevši od “planetarnog” modela Nielsa Bohra (1885. – 1962.) iz 1913. godine, i Schrödingerova jednadžba. Gilbert Newton Lewis (1875. – 1946.) razvio je 1916. godine kvalitativni model ionske i kovalentne veze, koji je našao najširu primjenu u kemiji te je, među ostalim, sredinom stoljeća poslužio za sustavno tumačenje mehanizama reakcija u organskoj kemiji, ponajviše zaslugom Christophera Kelka Ingolda (1893. – 1970.).

Treću kemijsku revoluciju 20. stoljeća obilježava primjena kemije u biologiji (biokemija, molekularna biologija). Tu doista možemo upotrijebiti izraz “ujedinjena kemija” (str. 865)⁶ kojim D. Grdenić naziva posljednje, suvremeno razdoblje kemije. Najbolji primjer za ujedinjenu kemiju je

** O strukturi molekula mnogo se znalo i u vrijeme dok su one bile samo hipotetske čestice. Kemičari su do tetraedarske koordinacije ugljikova atoma, do planarne naravi dvostruke veze i strukture benzenskog prstena došli neizravnim zaključivanjem, dedukcijom iz molekulske formule reaktanata i produkata ciljanih kemijskih reakcija.

* Dr. sc. Nenad Raos
e-pošta: raos@imi.hr

otkriće “dvostruke uzvojnice” DNA 1953. godine: pošlo se od biološkog problema, problema prijenosa nasljednih svojstava (genetike), no rješenje je nađeno u području kemije (struktura molekule), ali ne uz upotrebu “kemijskih”, nego “fizičkih” metoda (mjerjenje ogiba rendgenskih zraka na kristalu).¹¹ Pojavljuje se novi profil znanstvenika i novi oblik znanstvenoga rada jer kompleksne probleme (iznaženje novih ljekovitih tvari i sl.) mogu rješavati samo multidisciplinarni timovi specijalista. Najočitiija posljedica treće revolucije je sve veći broj koautora na radu: dok je pedesetih godina znanstveni rad imao dva ili tri, a počesto i samo jednog autora, danas nije neobično naći rad s deset, pa i više koautora.

Četvrta **kemijska revolucija** u 20. stoljeću bila je informatička revolucija. Nju je izazvao razvoj digitalnih računskih strojeva, od sporih i glomaznih “elektronskih mozgova” zasnovanih na elektronskim cijevima i magnetskim jezgričama, koji su se pojavili odmah nakon Drugog svjetskog rata, a potom kalkulatora i mikroročunala (PC i laptopa), temeljenih na integriranim elektroničkim krugovima (čipovima), koji su postali svima dostupna u posljednja dva desetljeća prošlog stoljeća. Tu bi revoluciju, kao i prvu, također mogli smatrati “instrumentalnom”, budući da su računala omogućila kemičarima izvođenje kvantno-kemijskih algoritama koji su dotad bili tehnički neprovedivi: kvantna kemija prelazi iz faze kvalitativnih (ili semi-kvantitativnih) u fazu kvantitativnih modela.* Stoga, šezdesetih

* Moj prvi kolokvij na studiju kemije (PMF) 1970. godine bio je kolokvij iz logaritamskog računa (“šibera”, od njem. *Rechnenschieber*). Tom su se

godina dolazi do razvoja kvantno-kemijskih metoda poput proširene (engl. *extended*) Hückelove teorije (EHT), metode nultog diferencijalnog prekrivanja (CNDO) i računalnih programa u okviru QCPE (engl. *Quantum Chemistry Program Exchange*), servisa uspostavljenog na Sveučilištu u Indiani 1963. godine.¹

Takav slijed događaja dovodi do nove specijalizacije, specijalizacije “teorijskog kemičara”. Kemičar novoga doba ne slični na srednjovjekovnog “spagirista” ili “filozofa od vatre” (*philosophus per ignem*), pa čak ni na pedantnog laboratorijskog radnika iz 19. stoljeća, nego na teorijskog fizičara. On se bavi strukturama, a ne tvarima, uz obilatu upotrebu matematike (molekulska modeliranje). U takvoj se konstelaciji u kemijska istraživanja uključuju fizičari, pa se često postavlja pitanje je li kemija još uvijek samostojna znanost ili tek grana fizike (fizika molekula, molekulska fizika i sl.).¹²

Nova kemija u Hrvatskoj

Općenito govoreći, može se reći da je hrvatska kemija poslije Drugog svjetskog rata dobro pratila svjetske trendove (tablica 1).¹³ Razlog tome je bio prije svega u želji da Ju-

jednostavnom napravom te mehaničkim računalima provodili kvantni i drugi proračuni u kemiji ili su se primjenjivale grafičke metode. Računala su dolazila postupno: još su mi se 1987. godine za vrijeme postdokorskog studija u SAD-u čudili što baždarni pravac izračunavam linearnom regresijom, a ne povlačenjem crte između točaka na milimetarskom papiru.

Tablica 1 – Uvođenje novih instrumentalnih i računalnih metoda u Hrvatskoj

Table 1 – Introduction of new instrumental and computational methods in Croatia

Godina Year	Događaj Event	Ustanova** Institution***	Ref.
1938.	U Zagreb dolazi prvi uređaj za difrakcijsku analizu praha. Installation of the first X-ray instrument (for powder analysis) in Zagreb.	FI	44
1948.	U Zagreb dolazi kamera Unicam S25 koja omogućuje rendgensku analizu monokristala. Installation of Unicam S25 camera in Zagreb for X-ray analysis of monocrystals.	FI	44
1951.	U Institutu Ruđer Bošković započinju istraživanja rendgenskom analizom; nabavljen Weissenbergov goniometar. Initiation of crystallographic research by X-ray at the Rudjer Bošković Institute; installation of Weissenberg goniometer.	IRB	14,44
1954.	Prvi diplomski rad iz kvantne kemije u Hrvatskoj (M. Randić, mentor: I. Supek). The first diploma thesis on quantum chemistry in Croatia (M. Randić, Mentor: I. Supek).	IRB, PMF	16
1958.	M. Randić osniva Grupu za teorijsku kemiju. M. Randić founded the Theoretical Chemistry Group.	IRB	16
1959.	Postavljen prvi spektrometar masa (MS-6) jugoslavenske izrade u Laboratoriju za kemijsku kinetiku. Construction of the first Yugoslavian mass spectrometer (MS-6) in Croatia (Laboratory for Chemical Kinetics).	IRB	15
1959.	Prvi NMR spektrometar u Hrvatskoj (29 MHz). Izrađen u suradnji s Institutom Jožef Štefan (Ljubljana). The first NMR device in Croatia (29 MHz). It was constructed in cooperation with the Jozef Stefan Institute (Ljubljana, Slovenia).	IRB	7

** FI, Fizički institut Filozofskog fakulteta, Zagreb; HAZU, Hrvatska akademija znanosti i umjetnosti, Zagreb; IMI, Institut za medicinska istraživanja i medicinu rada, Zagreb; IRB, Institut Ruđer Bošković, Zagreb; IUC, Interuniverzitetski centar, Dubrovnik; PMF, Prirodoslovno-matematički fakultet, Zagreb; SRCE, Sveučilišni računski centar, Zagreb.

*** FI, Physics Institute of the Zagreb Faculty of Philosophy; HAZU, Croatian Academy of Sciences and Arts, Zagreb; IMI, Institute for Medical Research and Occupational Health, Zagreb; IRB, Rudjer Bošković Institute, Zagreb; IUC, Inter University Centre, Dubrovnik; SRCE, University Computing Centre, Zagreb.

Tablica 1 – (nastavak)
Table 1 – (continued)

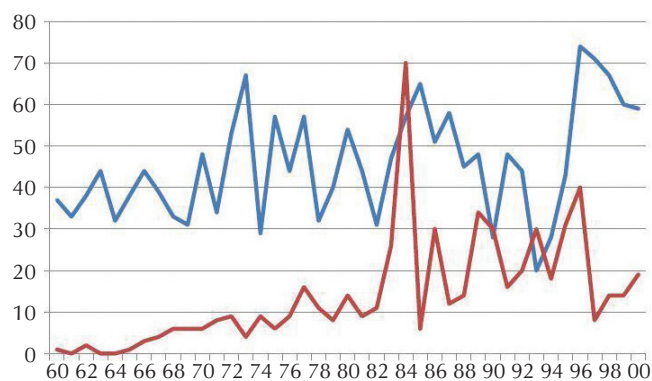
Godina Year	Događaj Event	Ustanova** Institution***	Ref.
1963.	Prvi komercijalni NMR spektrometar u Hrvatskoj, Varian A-60 (60 MHz). The first commercial NMR device in Croatia, Varian A-60 (60 MHz).	IRB	7
1964.	Zavod za organsku kemiju i biokemiju kupuje prvi NMR spektrometar, Varian A-60A (60 MHz). The Department for Organic Chemistry and Biochemistry bought its first NMR device, Varian A-60 (60 MHz)	PMF	7
1965.	Počinje nastava kvantne kemije na Sveučilištu u Zagrebu (M. Randić). The first teaching of quantum chemistry at the University of Zagreb (M. Randić).	PMF	16
1966.	Osnovan Jugoslavenski centar za kristalografiju. Centar je iste godine primljen u Međunarodnu kristalografsku uniju. Foundation of the Yugoslavian Crystallographic Center. The Center joined the International Crystallographic Union in the same year.	HAZU	14,44
1968.	Prva doktorska disertacija iz teorijske kemije u Hrvatskoj (Z. B. Maksić, mentor: M. Randić). The first PhD thesis in the field of quantum chemistry in Croatia (Z. B. Maksić, Mentor: M. Randić).	IRB, PMF	16
1968.	Nabavljen spektrometar masa Varian CH-7. Mass spectrometer Varian CH-7 acquired.	IRB	15
1968.	Zavod za organsku kemiju i biokemiju nabavlja i drugi NMR spektrometar, Varian T-60 (60 MHz). The Department for Organic Chemistry and Biochemistry bought its second NMR device, Varian T-60 (60 MHz).	PMF	7
1971.	Otvoren Sveučilišni računski centar (SRCE) s računalom UNIVAC 1101, koje je omogućilo obradu rendgensko-difrakcijskih podataka i teorijsko-kemijska izračunavanja. Foundation of the University Computer Centre (SRCE) in Zagreb; its UNIVAC 1101 computer enabled processing of X-ray data and theoretical and chemistry computations.	SRCE	17
1971.	M. Randić se počinje za boravka u SAD-u baviti matematičkom kemijom. M. Randić, during his stay in USA, grows an interest in mathematical chemistry.	IRB	16
1974.	Na Zavodu za opću i anorgansku kemiju nabavljen je četverokružni automatski difraktometar Philips PW1100. The Department for General and Inorganic Chemistry bought four-cycle automatic X-ray machine Philips PW1100.	PMF	14,44
1976.	I. Vicković uvodi računalne programe za rendgensku kristalografiju. I. Vicković implemented computer programs for X-ray crystallography.	PMF	14,44
1977.	U Hrvatskoj računalno riješene prve kristalne strukture. Solving of the first crystal structures by computer in Croatia.	PMF, SRCE	14,44
1977.	Instaliran prvi pulsni NMR uređaj s Fourierovim transformacijama NMR (PFT NMR) u Hrvatskoj, Bruker WP-80 (80 MHz) za snimanje jezgara ^1H , ^{11}B , ^{13}C i ^{31}P . Installation of the first pulse Fourier transform NMR (PFT NMR) device in Croatia, Bruker WP-80 (80 MHz), capable of collecting ^1H , ^{11}B , ^{13}C and ^{31}P spectra.	Chromos d.d., Zagreb	7
1977.	Osnovan prvi NMR servis u Hrvatskoj (voditelj: S. Borčić). The first NMR Service in Croatia founded (head: S. Borčić).	IRB	7
1978.	Na SRCE-u instaliran računalni program za molekulska mehaniku (N. Raos, V. Simeon). A computer program for molecular mechanics has been installed at SRCE (N. Raos, V. Simeon).	IMI	17,40
1986.	U Dubrovniku održan prvi međunarodni znanstveni skup MATH/CHEM/COMP (MCC ili MC ²) koji se bavi matematičkom i računalnom kemijom, primjenom teorije grafova u kemiji i molekulskim modeliranjem. Vodi ga A. Graovac (1986. – 2011.). The First International Course and Conference for Mathematical and Computational Chemistry (MATH/CHEM/COMP, MCC or MC ²) held in Dubrovnik. Chairman: A. Graovac (1986–2011).	IRB, IUC	41–43
1990.	Instaliran prvi NMR spektrometar sa supravodljivim magnetom u Hrvatskoj, Varian Gemini 300 (300 MHz). The first NMR device with superconducting magnet in Croatia, Varian Gemini 300 (300 MHz).	IRB	7
1991.	Nabavljen spektrometar masa ionsko-ciklotronske rezonancije uz Fourierovu transformaciju, FT ICR MS, Extrell FTMS 2001 D.D. Mass Fourier transform ion-cyclotron resonance mass spectrometer acquired, FT ICR MS, Extrell FTMS 2001 D.D.	IRB	15

goslavija postane neovisna, i vojno i gospodarski, kako od Istoka tako i od Zapada (politika nesvrstanosti i miroljubive koegzistencije). Godine 1957. dolaskom Stanka Borčića (1931. – 1994.), a potom 1959. Dionisa Emerika Sunka (1922. – 2010.) sa specijalizacije u inozemstvu počinju istraživanja iz fizikalno-organske kemije u Institutu Ruđer Bošković. Drago Grdenić (1919. – 2018.), nakon specijalizacije u Sovjetskom Savezu, uspostavlja 1952. godine Zavod za opću i anorgansku kemiju Prirodoslovno-matematičkog fakulteta te provodi prva određivanja kristalnih struktura.¹⁴ Zaslugom Smiljka Ašpergera (1921. – 2014.), koji je u Sjedinjenim Državama istraživao izotopni efekt ³⁴S u organskim eliminacijskim reakcijama, dolazi 1959. godine u Institut Ruđer Bošković (Laboratorij za kemijsku kinetiku) prvi spektrometar masa (MS-6).¹⁵ U međunarodnoj suradnji razvija se i teorijska, prije svega kvantna kemija,¹⁶ kojoj je začetnik fizičar Ivan Supek (1915. – 2007.). Kod njega je 1954. na temi “Elektronska struktura benzena” diplomirao Milan Randić (r. 1930.), da bi potom 1958. godine obranio doktorat na Cambridgeu (“Some Studies of Infrared Spectra of Molecules”). Molekulsko modeliranje, u pravom smislu riječi, omogućilo je pak instaliranje računala UNIVAC 1101 na Sveučilišnom računskom centru (SRCE) 1971. godine.¹⁷

Izneseni podatci, kao i oni uvršteni u tablicu, ukazuju na to da je hrvatska kemija u tehničkom smislu malo zaostajala za svjetskom znanosti. Sve nove metode koje su se pojavile u svijetu uskoro su došle i do nas, uglavnom zaslugom doktoranada i postdoktoranada koji su se školovali u inozemstvu i vraćali u domaću sredinu. Stoga je i u nas vidljiva pojava nove kemije, koja se očituje u četiri spomenute revolucije (instrumentalne, teorijske, biološke i informacijske). U središnjem hrvatskom kemijskom časopisu *Croatica Chemica Acta* (CCA)^{18,19} dolazi 1984. godine do naglog porasta broja znanstvenih radova iz područja teorijske kemije (slika 1), kao rezultat tiskanja dva dodatna broja (5. i 6.) posvećena kemijskoj vezi i modelima u kemiji.²⁰ Taj se trend održava do kraja stoljeća uz redovito izdavanje tematskih brojeva s radovima s godišnjih skupova MATH/CHEM/COMP u Dubrovniku. Naročito su bili zastupljeni radovi iz matematičke kemije, točnije radovi o primjeni teorije grafova u kemiji (topološka analiza). Tu je tematiku uveo 1971. Milan Randić za svojega boravka u SAD-u te su na njoj nastavili raditi Nenad Trinajstić (r. 1936.), Ante Graovac (1945. – 2012.) i Ivan Gutman (r. 1947.), no i mnogi drugi kemičari i matematičari, ne samo iz Instituta Ruđer Bošković. Tako je topološka analiza postala “hrvatski proizvod”:

*Iako treba priznati da je (topološku analizu) Hrvati nisu izmislili, zagrebačka se škola topološke analize pročula diljem svijeta. Ako se ne varam, prva dvojica hrvatskih znanstvenika (po broju radova a citiranosti) upravo se bave topološkom analizom. U vrijeme kad svi jaučemo zbog nestašice novca, instrumenta, suradnika – a to stanje nije od jučer – teorijska kemija, a naročito ona utemeljena na konceptu grafa molekularne strukture, otvara nam prozor u svijet i čini našu znanost prepoznatljivom.*²¹

Ovaj citat iz mojeg članka objavljenog u rubrici *Mišljenja i komentari* ovog časopisa otvara mnoga pitanja te daje naslutiti uzroke sukoba starih i mladih kemičara u drugoj polovini 20. stoljeća, o čemu se malo, ako išta pisalo.²² Stoga ću nastojati ovim prilogom popuniti tu prazninu.



Slika 1 – Broj teorijskih (crveno) i eksperimentalnih radova (plavo) objavljenih u posljednjih 40 godina 20. stoljeća u časopisu *Croatica Chemica Acta*

Fig. 1 – Number of theoretical (red) and experimental (blue) papers published in *Croatica Chemica Acta* in the last four decades of the 20th century

Fundamentalni sukob eksperimentatora i teoretičara

Najžešći napad na novu, teorijsku kemiju nalazimo kod Krešimira Balenovića (1914. – 2003.),* profesora organske kemije na zagrebačkom Prirodoslovno-matematičkom fakultetu (1946. – 1970.).²³ Iako bi se njegov prilog kako naslovom tako i činjenicom da je objavljen u svesku posvećenom stogodišnjici rođenja Leopolda (Lavoslava) Ružičke (1887. – 1976.) trebao baviti našim prvim kemičarem nobelovcem, autor je očito iskoristio priliku da u njemu iznese i svoje mišljenje o stanju organske kemije u nas. Pod ironičnim podnaslovom “1971. – Zagreb, HKD: natrag flogistonu i Newtonu” Balenović piše:

Od početka 1970., kada je paraliziran na našem Sveučilištu znanstveni rad iz organske kemije preranom smrću profesora Viktora Hahna (1970., Tehnološki fakultet), kao i nadolaskom irb-teoretičara na druga dva fakulteta, naglo se smanjuje broj eksperimentalnih radova tog područja u korist teorijskih, bez eksperimentalnih podataka, tako da će oni u CCA činiti 1988. god. 85 % svih znanstvenih prilo-

* Kao student prve godine bio sam svjedok i sudionik studentskog štrajka na PMF-u 1970. godine koji je pokrenut da bi se profesoru Balenoviću zabranilo predavati na fakultetu, osim izborne kolegije. Pozadina tog (uspjelog) štrajka, kojim je Balenović prestao biti i predstojnik Zavoda za organsku kemiju i biokemiju, još je i danas nejasna. Formalno je bio pokrenut zbog njegova neshodnog odnosa prema studentima i asistentima, o čemu je vrlo malo ostalo zabilježeno (ref. 14, str. 26, ref. 45). Što je u svemu tome istina ne mogu međutim suditi budući da Balenovića nisam poznavao, a i teško je povući jasnu granicu između profesionalnosti (zahtjevnosti, strogosti) i sadomazohističkih odnosa u radnoj sredini (koji opet mogu biti zamaskirani mnogobrojnim oblicima neurotične racionalizacije). Da je njegov odnos prema studentima bio povod, ako već ne i uzrok štrajka, vidimo po tome što je Balenović tražio (i dobio) podršku Ružičke i Preloga, koji su napisali pismo za “Nedjeljni Vjesnik” u kojem stoji: “Poznavajući nivo i način ispita iz organske kemije na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu smatramo da taj ispit nije nimalo prestrog” (ref. 23, str. 157), a još više njihovim člankom u “Hrvatskom sveučilištu” (17. 6. 1971.) kojim su dali bezrezervnu podršku Balenoviću (ref. 23, str. 190–192). Iz toga se vidi kako se kemičare iz IRB-a htjelo uključiti u sveučilište, što je na kraju i uspjelo, jer je D. E. Sunko 1971. godine od Balenovića preuzeo katedru organske kemije. S druge pak strane, sukob Balenović – IRB-teoretičari može se shvatiti i kao sukob klasične (preparativne) i moderne (fizikalne) organske kemije koju je počeo predavati Sunko.

ga. Može se reći da HKD prelazi u Hrvatsko postkemijsko društvo, a posljedice nisu izostale: zamjena s publikacijama drugih kemijskih društava se smanjuje zbog takvog sadržaja i mi danas (u doba radne zajednice "Alpe-Jadran") nemamo više zamjene s "Gazetta Chimica Italiana", niti s nekim drugim časopisima prekinutim iz istog razloga. Lepršanje nad stvarnošću se u ovom razdoblju nastavlja.²³

To "lepršanje nad stvarnošću" Balenović je popratio i preuzetom karikaturom (Pjesnik lebdi nad stvarnošću, Georg Grosz, 1925.) te se skanjuje (str. 158)²³ kako je moguće da predsjednik Hrvatskog kemijskog društva bude "teorijski fizičar – IRB" (Z. B. Maksić) te još da na skupštini HKD-a 1988. godine "predavač: teorijska kemija – IRB" (N. Trinajstić) održi predavanje "Kemija i poezija". Još ga više čudi što je znanstveni savjetnik Muzeja "Lavoslav Ružička" u Vukovaru "teoretičar, član IRB-a, dalek od organske kemije" te zaključuje: "Istočni grijeh površnosti započete 'Rubberovom membranom' prenosi se tako u IRB-u iz naraštaja u naraštaj" (str. 162).²³

Ne treba nas čuditi što je kemičaru odgojenom na kemiji 19. stoljeća, kakav je bio Balenović, bilo teško shvatiti da se kemijsko istraživanje više ne temelji na metodi pokušaja i pogreške, da osnovna vrlina kemičara više nije Liebigova upornost i strpljenje (*eine unermüdlige Geduld und eine Ausdauer ohne Grenzen*), niti da se kemičar treba uzdati u slučaj "koji pomaže spremnom umu" (Pasteur). Teorija nisu "štaka" (Dumas), koje treba odbaciti kada se dođe do rezultata, a to može biti samo tvar dobivena sintezom ili izolacijom iz prirodnog materijala. Teorija je nužan uvjet i posljedica istraživačkog rada i s eksperimentom čini nezadrživu, upravo organsku cjelinu. Toga su bili svjesni i prvi hrvatski kemičari-teoretičari koji su nastojali novo viđenje kemije objasniti svojim skeptičnim kolegama.

Njima je, teorijskim kemičarima, smisao teorije u kemiji bio mnogo jasniji nego kemičarima staroga kova. Tako primjerice N. Trinajstić ukazuje na to da je teorija sastavni dio svakog istraživanja uz konstataciju da je "teorija bez eksperimenta fikcija, a eksperiment bez teorije rutina",²⁴ što je svojevrsna parafraza Kantove maksime da su pojmovi (misli) bez zorova (empirijskog sadržaja) prazni, a zorovi bez pojmova slijepi (*Gedanken ohne Inhalt sind leer, Anschauungen ohne Begriffe sind blind*). No o čemu se tu zapravo radi, otkriva nam drugi citat istog autora:

Kemija je prije svega eksperimentalna znanost te bi se mogla slobodno definirati kao znanost o molekulama i njihovim transformacijama. No klasična kemijska strukturna teorija 19. stoljeća i kvantno-kemijska teorija 20. stoljeća pretvorila je kemiju u znanost koja se može lako matematizirati.²⁵

Upravo je "matematiziranje" kemije omogućilo da kemijska teorija ("koja često nije drugo nego opis i upotreba modela")²⁴ više ne bude samo pomoćnica u izvođenju pokusa, *ancilla experimenti* (poput stehiometrije), nego temelj samostalnih grana kemije, kemijskog (molekulskog) modeliranja, koje bi trebalo pružiti dublji uvid u prirodu kemijskih transformacija nego što ga ijedan eksperiment može dati. Upravo je to odvajanje kemijske teorije od konkretne prakse kemijskog laboratorija, a ne teorija kao takva, bilo ono što je najviše smetalo kemičarima staroga kova. Zato se Balenoviću čini da predavanje "jednog ordinariusa 'te-

oretičara' s PMF-a 'Theory vs. Experiment in Organic Chemistry'" ruši same temelje znanosti jer se "među ostalim obračunava sa suštinskim područjima organske kemije" (str. 162).²³ Koja su to "suštinska područja" ne možemo saznati iz Balenovićeve priloga, no da je predavanje bilo upereno protiv slijepa prakse kemijskog laboratorija ("*Anschauungen ohne Begriffe sind blind.*") dade se naslutiti iz autorova prigovora kako je došlo do "srozavanja praktiku- ma iz organske kemije na 1/10 današnjeg europskog standarda" i da "PMF ne prihvaća asistente – postdiplomande s područja organske sinteze, bioorganske kemije i kemije prirodnih spojeva" (str. 162).²³

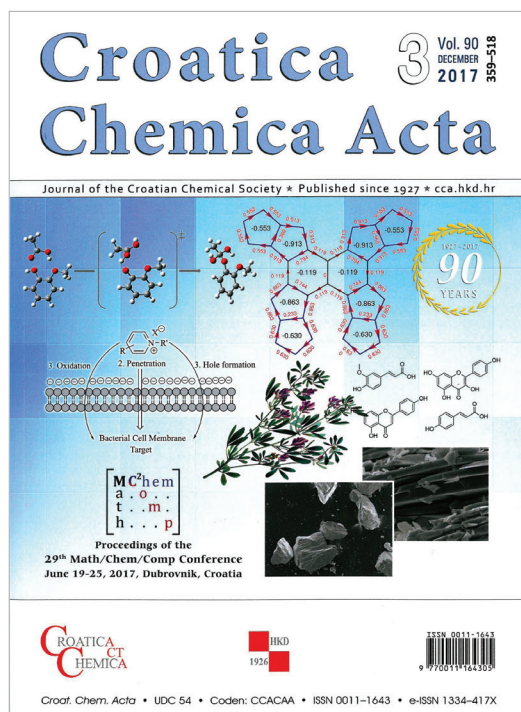
Pragmatički sukob teoretičara i eksperimentatora

Drugi uzrok sukoba kemičara-eksperimentatora i kemičara-teoretičara proizlazio je iz znanstvene politike Jugoslavije, ili točnije – kako se tada govorilo – iz teorije i prakse samoupravnog socijalizma. Prema Marxovu učenju, ljudski rad ne smije biti roba (jer onda je "otuđen"), pa stoga, logično, ni rezultat rada ne može biti roba. Do tog zaključka teorija samoupravnog socijalizma nije došla, ali je došla njegova praksa. Drugim riječima, u drugoj Jugoslaviji nije postojalo pravo tržište, pa tako ni tržište proizvoda znanstvenoga rada. Stoga su svi pokušaji da se znanost poveže s "udruženim radom", poput pokretanja časopisa "Inventivni radnik" ili analize produkcije tehničkih inovacija,²⁶ već unaprijed bili osuđeni na neuspjeh. "Znanstvene informacije" nisu se proizvodile za tržište. Kako bez tržišta stimulirati znanstvenike? Kako stimulirati nekoga da proizvodi nešto što se ne može prodati?

Znanstveni se rad ne može normirati, to je jasno. No može ga se stimulirati, i bez tržišta. Najlakše ga je stimulirati prema broju objavljenih radova, broju citata i sličnim scientometrijskim pokazateljima. To je u posljednja dva desetljeća prošloga stoljeća dovelo do naročite popularnosti scientometrije, koja je, kao što sam ironično napisao, postala "najpopularnija znanstvena disciplina u Hrvata".²⁷ Kako je smisao rada da se sa što manje napora napravi što više, iz toga je nužno slijedilo da su se znanstvenici prihvaćali onih istraživanja koja su mogla najbrže i najlakše dovesti do objavljivih rezultata, bez obzira na njihovu kvalitetu i upotrebnu vrijednost:

Ma kako to ružno izgledalo, vrednovanje znanstvenoga rada svelo se u nas na puko prebrojavanje; znanstvenici su došli u položaj proizvođača luster. U prvom je planu imponantna lista naslova. Poznat mi je slučaj da je jedan dobar znanstveni rad "isjeckan" i objavljen u deset komada. Ta dalek je put do troznamenastog popisa radova! Razni scientometri, kroz projekte "znanost o znanosti" dolaze do zaključka da bi kod nas vrhunski znanstvenici bili oni s popisom od nekoliko stotina radova ili više; dobri znanstvenici imali bi stotinjak radova; trpilo bi se i osrednje znanstvenike koji*

* Tu autor aludira na ono što je rekao u istom članku, naime da se u bivšem SSSR-u proizvodnja luster mjerila tonama, pa je svatko nastojao proizvesti što teži luster, bez obzira na očitu nepraktičnost takvog proizvoda.



Slika 2 – Slika nove, ujedinjene kemije: naslovnica jubilarnog broja časopisa Croatica Chemica Acta (90 godina izlazenja)

Fig. 2 – Image of the new, unified chemistry: cover page of the 90th anniversary edition of Croatica Chemica Acta

mogu pokazati samo dvadesetak radova. Sve ispod toga bili bi prave znanstvene bijede. Da se skriju!²⁸

U tome su pogledu, po broju znanstvenih radova, kemičari-teoretičari bili u prednosti, jer s jedne strane treba utrošiti manje rada da bi se došlo do objavljenih teorijskih nego do objavljenih eksperimentalnih rezultata, a s druge strane za teorijska istraživanja treba raspolagati s manje materijalnih sredstava nego za eksperimentalna. Stoga nije čudno da je to otvoreno pisanje nuklearnog fizičara Nikole Zovka (r. 1936.) o paradoksalnom načinu vrednovanja znanstvenog rada izazvalo reakciju kemičara-teoretičara. Nenad Trinajstić je najprije pokazao da u svijetu (ali ne i u nas!) kemičari-eksperimentatori objavljuju više od kemičara-teoretičara da bi zatim konstatirao:

Želio bih naglasiti kako je jedan od razloga nezadovoljstva domaćih kemičara produkcijom teoretskih kemičara njihovo nerazumijevanje teorijskog istraživanja posebice s obzirom na računalne radnje. Rad na računalu doista ima mnogo zajedničkoga s eksperimentalnim radom – i jedno i drugo služe testiranju teorije... Kompjutor je stroj, baš poput IR-spektrometara ili rendgenskog uređaja, konstruiran ili vođen nekom teorijskom zamisli.²⁹

Drugim riječima, i teorijska se kemija temelji na eksperimentu, no njezin se eksperiment ne izvodi kemijskim priborom i kemikalijama, nego računalom i ulaznim podatcima. To je točno, no ipak ne mijenja činjenicu da se može

brže i lakše napraviti znanstveni rad na temelju računalnog nego stvarnog kemijskog eksperimenta, a još više da je teško, ako je uopće moguće, odrediti stvarnu vrijednost znanstvenog rada, što je osnovni problem na koji ukazuje članak N. Zovka.²⁸ No ta tendencija, tendencija vrednovanja znanstvenika prema broju objavljenih radova nije od jučer. Ona nije specifičnost samoupravnog socijalizma iako joj je on pogodovao. Ona postoji svugdje i oduvijek ili, točnije, otkada su se znanstvenici počeli – zbog taštine, karijerizma ili drugih razloga – natjecati u broju znanstvenih radova.^{30–33} O tome svjedoči i Fran Bubanović (1883. – 1956.), prvi profesor kemije na zagrebačkom Medicinskom fakultetu:

Pojav kemije iz knjiga za knjige, koji također nagrđuje značaj kemije kao egzaktne prirodne nauke, nestat će – kako rekoh – sam po sebi, kao nešto abnormalno, bolesno, kao dnevna moda, što je nikla u jagmi za što većim brojem publikacija.³⁴

Zaključak

“Jagma za što većim brojem publikacija” koju spominje Bubanović nije, ja bih rekao, “nešto abnormalno, bolesno”, nego naprosto nezrelo. Nova znanstvena disciplina koja još ne nalazi primjenu, pa stoga ni dodirne točke s drugim disciplinama, nužno se zatvara u sebe i ide nekim svojim, samo njoj znanim putevima. Autistički tip znanstvenika, znanstvenika koji “živi u kuli bjelokosnoj” poznat je oduvijek (grčki *bios theoretikos*).^{*} Nezrela znanost rađa nezrele znanstvenike koji “rade za taštinu i ponašaju se kao mala djeca”.²⁷

Je li nova kemija, a ovdje prije svega mislim na teorijsku kemiju, sazrela? Čini se da jest, jer se pojavljuje sve više znanstvenih radova koji integriraju molekulsko modeliranje i eksperimentalno istraživanje, pa i u našoj sredini^{35,36} (slika 2). Više se ne može reći da teorijsko istraživanje ne može zamijeniti kemijski eksperiment.³⁷ Ako se povedemo za načelom arhitekta Richarda Buckminster-Fullera (1885. – 1983.) “chemistry is the basic structure, ergo architecture”,³⁸ vidimo da je molekulsko modeliranje preuzelo funkciju projektiranja molekula sa željenim svojstvima, dok je eksperimentalni rad u laboratoriju preuzeo funkciju “građevinske operative” (organska sinteza) i “inspekcijskog nadzora” (analitičke metode, prije svega rendgenska kristalografija). I da dovedemo analogiju do kraja, izložba make-ta arhitektonskih projekata može pobuditi pažnju kritičara originalnim estetskim rješenjima, no kada dođe do izvedbe, treba prije svega misliti na ljude koji će u “plastici” živjeti. Kao što arhitektura treba graditi kuće za ugodan život ljudi, tako i kemija mora služiti zadovoljavanju materijalnih potreba čovjeka, što je bilo jasno u tehnički naprednim sredinama (Njemačkoj) još u 19. stoljeću.³⁹ Kada se tako postave stvari, kada se “teorijska kemija” shvati kao integrirani i integrativni faktor “ujedinjene kemije”, nestaje razloga za sukob starih i novih kemičara.

^{*} “Jedino on (tj. filozof) živi pogleda uprta u prirodu i u ono što je božansko, te poput kakva doba kormilara vezuje životna počela uz ono što je vječno i trajno, baca sidro i živi po svojemu”, *Aristotel, O duši*. Nagovor na filozofiju, Filozofska biblioteka, Naprijed, Zagreb, 1996., str. 123.

Literatura References

1. P. Laszlo, On the self-image of chemists 1950 – 2000, *Hyle* **12** (1) (2006) 99–130, doi: https://doi.org/10.1142/9789812775856_0013.
2. F. W. Westheimer, Reflections – Musings, *J. Biol. Chem.* **278** (14) (2003) 11729–11730, doi: <https://doi.org/10.1074/jbc.X300001200>.
3. S. C. Rasmussen, Advances in 13th century glass manufacturing and their effect on chemical progress, *Bull. Hist. Chem.* **33** (1) (2008) 28–34.
4. N. Raos, Eudiometrija u djelu Josipa Franje Domina, *Kem. Ind.* **69** (3-4) (2020) 105–110, doi: <https://doi.org/10.15255/KUI.2019.023>.
5. B. Kojić-Prodić, K. Molčanov, Stogodišnjica rendgenske kristalografije, *Kem. Ind.* **62** (7-8) (2013) 247–260, doi: <https://doi.org/10.15255/KUI.2013.040>.
6. D. Grdenić, Struktura kristala difrakcijom rendgenskih zraka, *Povijest kemije, Novi Liber i Školska knjiga*, Zagreb, 2001, str. 888–903.
7. D. Vikić-Topić, NMR spektroskopija, *Kem. Ind.* **50** (7) (2001) 413–419.
8. K. A. Nier, A History of Mass Spectrometer, *Instruments of Science: An Historical Encyclopedia* (Eds. R. Bud, D. J. Warner), Science Museum, Smithsonian Institution and Gerland Publ. Inc., 1998., str. 552–556.
9. M. Tswett, Adsorptionanalyse und chromatographische Methode. Anwendung auf die Chemie der Chlorophylls, *Ber. Deutsch. Botan. Ges.* **24** (1906) 384–392.
10. A. J. P. Martin, The principles of chromatography, *Endeavour* **6** (1947) 21–28.
11. J. D. Watson, F. H. C. Crick, Molecular structure of nucleic acids. A structure for deoxyribose nucleic acid, *Nature* **171** (1953) 737–738, doi: <https://doi.org/10.1038/171737a0>.
12. H. Vančik, Opus Magnum: An outline for the philosophy of chemistry, *Found. Chem.* **1** (1999) 241–256.
13. N. Trinajstić, M. Kaštelan-Macan, S. Paušek-Baždar, H. Vančik, Hrvatska kemija u XX. stoljeću. II. Razdoblje od sloma Nezavisne Države Hrvatske 8. svibnja 1945. do uspostave Republike Hrvatske 25. lipnja 1991, *Kem. Ind.* **58** (7-8) (2009) 315–336, doi: <https://doi.org/10.15255/KUI.2008.030>.
14. D. Grdenić, U povodu 50. obljetnice Zavoda za opću i anorgansku kemiju Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu, Pedeset godina Zavoda za opću i anorgansku kemiju Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu (ur. I. Vicković), Zagreb, 2002., str. 20–26.
15. L. Klasinc, D. Srzić, S. Kazazić, M. Rožman, 50 godina spektrometrije masa na Institutu Ruđer Bošković, *Kem. Ind.* **59** (12) (2010) 591–597, doi: <https://doi.org/10.15255/KUI.2010.024>.
16. N. Trinajstić, Quantum chemistry in Croatia – Beginnings, *Kem. Ind.* **50** (7-8) (2001) 427–429.
17. N. Raos, Prvih pet godina, IMI očima suradnika (ur. N. Raos), Institut za medicinska istraživanja i medicinu rada, Zagreb, 1999., str. 96–104.
18. N. Trinajstić, “Croatia Chemica Acta” – najjači hrvatski časopis u prirodnim znanostima, Oglеди o znanosti i znanstvenicima, Matica hrvatska, Zagreb, 1998., str. 125–142.
19. N. Raos, Science and politics: a case study of the Croatian chemical journal, *Bull. Hist. Chem.* **40** (1) (2015) 40–44.
20. Z. B. Maksić, Prologue. On the significance of theoretical models of chemical bonding, *Croat. Chem. Acta* **57** (5) (1984) I–III.
21. N. Raos, Topološka analiza, *Kem. Ind.* **52** (1) (2003) 17; N. Raos, Misli o (hrvatskoj) znanosti, HDKI/Kemija u industriji, Zagreb, 2007., str. 22–23.
22. M. Randić, On history of Randić index and emerging hostility toward chemical graph theory, *MATCH Comm. Math. Comput. Chem.* **59** (1) (2008) 5–124.
23. K. Balenović, Lavoslav Ružička: Stara domovina i kemija u Hrvatskoj 1918 – 1988, *Rad Jugosl. akad. znan. umjet., kem.* **[443]** 7 (1989) 131–198.
24. N. Trinajstić, On the nature of theoretical research, *Croat. Chem. Acta* **69** (3) (1996) 1013–1022.
25. S. Nikolić, N. Trinajstić, On the concept of chemical model, *Croat. Chem. Acta* **70** (3) (1997) 777–786.
26. G. Devetak, Tehničke inovacije u svijetu i u nas, Školska knjiga, Zagreb, 1983.
27. N. Raos, Sumrak scientometrije, *Kem. Ind.* **45** (2) (1996) 61; N. Raos, Misli o (hrvatskoj) znanosti, HDKI/Kemija u industriji, Zagreb, 2007., str. 3–5.
28. N. Zovko, Prilog raspravi o vrednovanju znanstvenog rada, *Encycl. Moderna* **14** (2) (1993) 173–175.
29. N. Trinajstić, Experimental and theoretical research in the natural sciences, *Encycl. Moderna* **14** (4) (1993) 359–360.
30. I. A. Williams, IFs and but: How accurately do journal impact factors reflect the quality of work that is published?, *Chem. Brit.* **32** (2) (1996) 31–33.
31. The Impact Factor of Scientific and Scholarly Journals. Its Use and Misuse in Research Evaluation (Ed. T. Braun), *Scientometrics Guidebooks Series, Vol. 2*, Akadémiai Kiadó, Budapest, 2007.
32. A. Grudniewicz et al., Predatory journals: no definition, no defence, *Nature* **576** (2019) 210–212, doi: <https://doi.org/10.1038/d41586-019-03759-y>.
33. S. R. Cranford, C.R.E.A.M. Citation Rule Everything Around Me, *Matter* (2) (2020) 1343–1347, doi: <https://doi.org/10.1016/j.matt.2020.04.025>.
34. F. Bubanović, Slike iz kemije, Matica hrvatska, Zagreb, 1917., str. 220.
35. I. Novak Jovanović, A. Miličević, A new, simplified model for the estimation of polyphenol oxidation potentials based on the number of OH groups, *Arh. Hig. Rada. Toksikol.* **68** (2017) 93–98, doi: <https://doi.org/10.1515/aiht-2017-68-2988>.
36. V. Havaić, S. Djaković, J. Lapić, T. Weitner, D. Šakić, V. Vrčec, Reduction potential of ferrocenyl-substituted nucleobases. Experimental and computational study, *Croat. Chem. Acta* **90** (4) (2017) 589–594, doi: <https://doi.org/10.5562/cca3229>.
37. T. A. Boyd, Theorizing – no substitute for trying, *Chem. Eng. News*, Feb. 3 (1958) 70–72, doi: <https://doi.org/10.1021/cen-v036n005.p070>.
38. H. Aldersey-Williams, The Fuller View, The Most Beautiful Molecule. The Discovery of Buckyball, Wiley, New York, 1995., str. 150–155.
39. M. Blondel-Mégrelis, Liebig or how to popularize chemistry, *Hyle* **12** (1) (2007) 41–42, doi: https://doi.org/10.1142/9789812775856_0007.
40. N. Raos, Konformacijska analiza kompleksa bakra s bioligandima, Magistarski rad, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb, 1981., str. 40–42.
41. A. Graovac, D. Vikić-Topić, Cilj je privući mlade znanstvenike, O. Carević, D. Vikić-Topić, *Znanost, humanost i ekologija*, Graphis, Zagreb, 2010., str. 29–31.

42. N. Raos, Obnovljen znanstveni skup o matematičkoj kemiji, *Kem. Ind.* **64** (9-10) (2015) 569.
43. Ante Graovac – Life and Works (Eds. I. Gutman, B. Pokrić, D. Vukičević), *Mathematical Chemistry Monographs*, Vol. 16, Kragujevac, Srbija, 2014.
44. D. Grdenić, Mojih pedeset godina kemije, Hrvatski kemičari i kemijski inženjeri, Knjiga 1, HDKI/Kemija u industriji, Zagreb, 2000.
45. N. Trinajstić, Krešimir Balenović 1914. – 2003., Spomenica preminulim akademikima, Sv. 120, HAZU, Zagreb, 2004., str. 15.

SUMMARY

The Clash of Old and New Chemistry in Croatia

Nenad Raos

New chemistry, the chemistry of the 20th century, developed through four revolutions (instrumental, theoretical, biological, and informational). This development was also evident in Croatia, especially after WWII, when many young Croatian chemists had been educated at British, American, but also Russian universities. This led to the clash of old, traditional (K. Balenović), and young, modern chemists (M. Randić, N. Trinajstić), who introduced theoretical (computational), quantum, and mathematical chemistry in Croatia. There were two aspects of the clash. The first was fundamental; traditional chemists were unable to comprehend chemical research without a chemical laboratory. The second, pragmatic aspect of the clash, materialized in scientometrics, *i.e.* discussions about the value of chemical research in terms of the number of published papers. Theoretical chemists, namely, published much more than their colleagues engaged in laboratory practice, mostly because of scarce resources and bad organization of scientific research in communist Yugoslavia (1945–1991).

Keywords

History of chemistry, chemistry in Croatia, quantum chemistry, mathematical chemistry, computational chemistry, Krešimir Balenović, scientometrics

*Institute for Medical Research
and Occupational Health
Ksaverska c. 2
10 000 Zagreb, Croatia*

Review
Received May 19, 2020
Accepted June 24, 2020