

A matematika meghökkentő hatékonysága és a hallgatólagos tudás találkozik egy lombikban

SCHILLER RÓBERT

KFKI Atomenergia Kutatóintézet
1525 Budapest, Pf. 49.

© Polanyiana 2003/1 – 2: 179-184

A fizikai kémiai kinetika egy részletkérdésének irodalmát áttekintve, a probléma legtömörebb összefoglalását Babits Mihály egy versében találtam meg. A vers egyik részletét idézem.

Egy új tudósról fogok énekelni,
ki Budapesten majdan élni fog,
.....
Az én tudósom [.....]
nem fog kergetni régi délibábot,
okosan megelégszik a viszonyal,
amely az észnek jelzi a világot
s a valóság jeléül a haszonnal:
ezenkívül más lényegig ki látott?
ami remélhetetlen, nem reméli:
a viszonyt tudja, a lényegét éli.

Babits Mihály: Hadjárat a semmibe (1913)

A vers keletkezésének évében mindkét nagy tudós, akiről most szó lesz, Budapesten élt; Polányi Mihály huszonkét éves volt ekkor, Wigner Jenő pedig tizenegy. Tizenkét évvel később, már Berlinben, a Kaiser Wilhelm-Institut für physikalische Chemie und Elektrochemie munkatársaiként együtt dolgoztak azon, hogy Polányi egy régebbi, a kémiai reakciók elméletét megalapozó gondolatát összhangba hozzák az épp születőben lévő kvantummechanikával. Ez a közös munka nemcsak a kémiai elmélet fejlődése vagy a kvantumfizika alapvetése szempontjából jelentős.

Kitűnik belőle két gondolkodásmód különbözősége, a fizikai valóság felismerésének két, egymástól eltérő és ebben a szerencsés esetben egymást kiegészítő módja. Babits szavait felhasználva, ez a közös munka elárulja, milyen módon élte meg tudását Polányi és Wigner.

Nem kell itt önkényes találgatásokra hagyatkoznunk. Pályájuk későbbi szakaszában mindketten megírták, mit gondolnak a tudományos megismerésről, a kutató elme működésének rendjéről.

Polányi, aki élete derekán felhagyott a fizikai kémiai kutatásokkal, és azontúl filozófiai, társadalomelméleti kérdésekkel foglalkozott, több művében is kifejtette a *hallgatólagos tudás* gondolatát. (Angolul *tacit knowledge* ennek az elvnek a neve. Találóbbrak érezném a *néma tudás* vagy *néma felismerés* kifejezést, de a fordítások már meghonosították az előbb írtat.)

A kérdést, amelyre Polányi választ keres, már Platon feltette egyik dialógusában, a *Menonban*: „*És miképpen fogod kifürkészni, Szókratész, azt, amiről egyáltalán nem tudod, hogy mi? Ki tudsz-e tüzni valamit azok közül a dolgok közül, amiket nem ismersz, magad elé, hogy kutasd? Vagy ha nagyszerűen rátaláltál is, honnan fogod tudni, hogy ez az, amit előzetesen nem ismertél?*”

Valóban, mi vezeti a kutatót a feltáratlan jelenségek és megfogalmazatlan kérdések rengetegében? Honnan tudja, hogy mit nem tud? Polányi válasza erre az *a priori* hallgatólagos tudás eszméje. Ez egy mondatban is összefoglalható: „*Többet tudunk, mint amennyit elmondhatunk.*” Ezen az alapon a természettudományos intuíció elméletét talán nem lehetne megalakítani. Ez az intuíció fenomenológiája.

Lehet a hallgatólagos tudásra hétköznapi példákat könnyen találni. A kerékpárosét, aki leesne a nyeregből, ha a kormány minden mozdulatát meg kellene magyaráznia, a zongoraművészt, aki képtelen lenne muzsikálni, ha megfogalmazott tervek szerint kellene minden billentyűt leütnie. Az ő ismereteik is hallgatólagosak, némák. Polányi az alaklélektan tapasztalataihoz, fogalmaihoz fordul. Példaként az optikai csalódásokról ír, meg a mérések eredményeit elrejtő ingadozásokról, vagy az olyan észleletekről, amelyeket az uralkodó elméletek ismeretében senki nem várna. Ilyen esetekben a megfigyelő és értékelő elme csak azért jut eredményre, mert fel tudja ismerni a perifériális, mellékesnek látszó vonásokat és ezeket a gondolkodás fókuszába tudja helyezni. „*A tudományos lángész ismérve valóban éppen az a képessége, hogy ott is meglát dolgokat, ahol mások nem érzékelnek semmit, s ez az adottság csak homályos kritériumokhoz igazodhat, hasonlóan az éleslátás teljesítményeihez.*” Az intuíció felfoghatatlan erejét próbálja ez a gondolatsor felfoghatóvá tenni.

Wigner másban látja a tudományos felismerés igazi csodáját – magában a természeti törvény létezésében. „...bizonyos, hogy a [természeti] törvényeknek a precizitása magán viseli a csoda minden elgondolható jegyét.” – írja. Ezzel Einstein is, Schrödinger is egyetértett. Itt Wigner még csak a törvény létezéséről szól. Csodálkoznunk azonban ezen túl is kell; azon, hogy a törvényt fel tudjuk ismerni és meg tudjuk fogalmazni. Erről, a második meglepetésről szól nagy tanulmánya, *A matematika meghökkenítő hatékonysága a természettudományokban* című.

Wigner szerint – egyetértésben sokakkal – a matematika elvontabb fogalmait nem a „való világ közvetlen sugallatára” alkották meg. Polányit idézi: „...a matematika meghatározása nem lehetséges anélkül, hogy ne ismernénk el legnyilvánvalóbb sajátóságát, azt tudniillik, hogy érdekes”. A matematika a matematikus elméjének terméke. Az így kialakult fogalmak és módszerek hatalmas tárából a fizikus kiválasztja a vizsgálandó probléma tárgyalásához szükséges és megfelelő eljárást. De egyáltalán nem magától értetődő, hogy a tiszta matematika bőségében hogyan talál rá erre. Wigner nagy példája a komplex szám elvont, a természeti jelenségek szemléléséből semmilyen módon nem levezethető fogalma. „Csaknem szükségszerű, hogy a kvantummechanika törvényeit a komplex számok felhasználásával fogalmazták meg.” – írja. De hogyan akadt a fizikus éppen erre az eszközre? „Nehéz szabadulni attól a benyomástól, hogy itt egy csodával állunk szemben...”, ez a meglepő konklúzió. Egyebek mellett azért is, mert utóbb gyakran kiderül, a választott módszer a megoldandó problémán túl is jónak bizonyul; másra is lehet használni, mint éppen arra, amire kitalálták.

Polányi és Wigner gondolatait ismeretelméleti vagy tudományfilozófiai szempontból bizonyára lehet bírálni. Teszik is sokan. Gondolom, tévednek a bírálók, ha a most ismertetett gondolatokat filozófiai tételeknek tekintik. Ezek sokkal inkább úti beszámolók, visszatekintések a természet matematikai leírása során nyert tapasztalatokra. Most egyetlen, a kvantummechanika megalkotásához képest igen szerény példán szeretném megmutatni, hogy milyen személyes élmények vezethették a szerzőket felismeréseikre.

Polányi már 1920 óta érdeklődött a kémiai kinetika problémái iránt. A kémiai reakciók időbeni viselkedése, a reakciósebesség fogalma és kísérleti meghatározása ebben az időben már meglehetősen jól kutatott terület volt; hetven éve volt már annak, hogy Wilhelmy a nádcukor inverziójára vonatkozó méréseivel megalapozta a reakciókinetika tudományát. A makroszkópos folyamatok és a molekuláris események közti összefüggések felderítésére Polányinak igen szemléletes eszméje támadt: egy-egy gázsugár nyalábot kellene létrehozni a reaktánsokból, és ezeket egymás-

sal keresztezve lehetne a kémiai átalakulások részleteit tanulmányozni. Az idea ugyan nem volt megvalósítható a laboratóriumi technika akkori szintjén, a gondolat azonban kiváló: ilyen elven működő keresztsugaras berendezéseken végzett kutatásaiért kapott 65 évvel később Nobel díjat J.C. Polányi.

Ebből az ötletéből ha nem is lett kísérlet, hagyományos módszerekkel végzett reakciókinetikai megfigyelései egy alapvető, a későbbi elméleteket megalapozó, máig élő modell megalkotásához vezették el Polányit. A cél nem volt kisebb, mint hogy a fizikai kémia elméletileg jól megértett, matematikailag megfogalmazott két területe: a fenomenologikus termodinamika és a statisztikus mechanika alapján tárgyalja a reakciókinetika törvényeit. Szorosabban szólva, hogy a reagáló anyagok egyensúlyi tulajdonságainak ismeretében számítsa ki a reakció sebességét meghatározó sebességi koefficiens. Az igazi újdonság ebben a gondolatban az a felismerés, hogy időtől független mennyiségeket fel lehet használni időtől függő jelenségek leírására. Vagyis, hogy az egyensúlyi viselkedés alapján következtetni lehet egy disszipatív folyamat törvényeire.

Ennek a gondolatnak az általános statisztikus fizikai megfogalmazása még évtizedeket váratott magára. Polányi alapvető eszméje, némileg persze korszerűsített változatban, ma is olvasható minden fizikai kémiai tankönyvben. A leglényegesebb benne az a feltevés, hogy az átalakulás első lépéseként a reaktánsok egy ütközési komplex alakjában egyesülnek, amelynek az élettartama eléggé hosszú ahhoz, hogy a tulajdonságait egyensúlyi törvényekkel lehessen leírni. Ezek a Boltzmann-féle statisztikus mechanika egyenletei, amelyek alapján (és egyes további, gázkinetikai megfontolások segítségével – így némi turpisság árán sikerült az időfüggést becsempészni a végső kifejezésekbe) a sebességi koefficiens már kiszámítható. A számítások tűrhetően egyeztek a $\text{Br} + \text{H}_2 \leftrightarrow \text{HBr} + \text{H}$ reakcióra vonatkozó mérésekkel.

Az önkényesnek tetsző, intuitív lépés szembeötlő a modellben: semmi közvetlen evidenciája nem volt egy egyensúlyi állapotba kerülő, átmeneti molekula keletkezésének. Volt azonban súlyosabb ellenvetés is. Az idő a Bohr-Sommerfeld féle „naiv” kvantummechanika kialakulásának és közelítő válságának volt az ideje. Polányi, aki természetesen Boltzmann klasszikus mechanikai elveken nyugvó statisztikáját alkalmazta, folyamatosan energiaváltozásokkal számolt. Born és Franck ezt, a diszkrét energiaspektrumok ismeretében, semmi módon nem fogadhatta el. A feltételezett átmeneti komplexnek – írták – meghatározott, éles energiája, kell hogy legyen. Az ütközés előtt szabadon mozgó reaktáns molekulák mozgási energiája azonban nincsen kvantálva. Hogyan képzelhető el, hogy ütkö-

zéskor mégis éppen a komplex megkívánta, határozott, éles energiával rendelkeznek? A Bohr-Sommerfeld elmélet keretein belül erre nem volt válasz.

Wigner 1925-ben kezdett ezzel a kérdéssel foglalkozni. Ebben az évben meg a következőben jelentek meg a kvantummechanikát megalapozó cikkek, ezekről Wigner persze még nem tudhatott. A határozatlansági relációt, legkorábbi alakjában is, pedig csak két évvel később mondta ki Heisenberg. Wigner mégis azzal védi meg Polányi modelljét, hogy kijelenti: az átmeneti komplex energiájának nincsen határozott értéke, hanem egy $\Delta\varepsilon$ szélességű sávon terül el; ha a komplex élettartama τ , úgy a sáv szélességet ez a kifejezés határozza meg,

$$\tau\Delta\varepsilon = h,$$

ahol h a Planck állandó. Ezen felül még azt is felismerte, hogy az impulzusmomentum nem-korlátos pályákra is kvantált. Az olvasó kicsit megrendülhet azon, hogy Wigner egy mellékesnek tetsző részprobléma kapcsán eljut a határozatlansági relációhoz. A szövegben Bohrnak egy 1923-as cikkére utal, abban azonban nagyon bizonytalan, kvalitatív megjegyzéseknél egyebet erről a kérdéstről nem lehet olvasni.

Értetlenségemben Hraskó Péterhez fordultam. Ő előbb világossá tette, hogy az energia határozatlanság létezése összefüggésben áll azzal, hogy az impulzusmomentum végtelen mozgásban is kvantált. A határozatlanság mértékét pedig, véleménye szerint, a klasszikus csillapított harmonikus oszcillátor viselkedése alapján találhatta meg Wigner. Az oszcillátor csillapodásának τ időállandója és a rezgés frekvenciájának $\Delta\nu$ kiszélesedése ugyanis fordítottan arányos egymással, $\tau\Delta\nu = 1$. Ehhez aztán már csak az $\varepsilon = h\nu$ összefüggést kellett tudnia ahhoz, hogy a maga határozatlansági relációjához eljusson.

Nem lett csekély hozadéka később ennek a reakciókinetikai munkának: a magok neutronabszorpciójának hatáskeresztmetszetét hasonló elvek alapján határozta meg Wigner.

Két nagy ember útja keresztezte egymást. Ilyen kilátás a nyílik az útkeresztelésből.

Köszönettel tartozom dr. Gábor Éva és dr. Hraskó Péter hasznos tanácsaiért. Az MTA Fizikai és Kémiai Osztályainak 2002. november 8-án, Wigner Jenő születésének századik évfordulója alkalmából rendezett együttes ülésén tartott előadás szerkesztett szövege.

IRODALOM

- Polanyi, M.: *The Tacit Dimension*, Routledge and Kegan, London, 1967
- Polányi, Mihály: *Filozófiai írásai*, Atlantisz, Budapest, 1992
- Polányi, M.: Reaktionsisochore und Reaktionsgeschwindigkeit vom Standpunkt der Statistik, *Z. f. Elektrochemie*, **26**, 49-56 (1920)
- Polanyi, M. und E. Wigner: Bildung und Zerfall von Molekülen, *Z. f. Physik* **33**, 429-434 (1925)
- Wigner, Jenő: *Szimmetriák és reflexiók*, Gondolat, Budapest, 1972
- Wigner, E.P. and R.A. Hodgkin: *Michael Polanyi*, Biographical Memoires of Fellows of the Royal Society, **23**, 413-448 (1977) (Magyarul Polanyiana 2002(11)1-2:19-48.)