



CHEMIA PRZED SWOJĄ INFORMATYCZNĄ MISJĄ

Lucjan Piela

Uniwersytet Warszawski, Wydział Chemii

W połowie XX wieku zakończył się w chemii etap rozpoznawania budulca (atomy, wiązania) i reguł strukturalnych (stereochemia). Czas budowania przyniósł wiele zasadniczych pytań o to, co budować i dłaczego. Przełom w myśleniu nastąpił z chwilą rozpowszechnienia się w chemii koncepcji oddziaływania molekuł wklęsłych z wypukłymi. Powstawać wtedy mogły wielopiętrowe struktury o różnej stabilności poszczególnych pięter i o różnej ich podatności na czynniki zewnętrzne. Czekają nas następne przełomy z chwilą włączenia do chemii osiągnięć matematyki takich jak cykle graniczne w układach równań różniczkowych i osiągnięć teorii informacji. Spotkamy się z szeregiem kluczowych i nowych problemów: problemem znajdowania minimum bardzo złożonego wyrażenia matematycznego, problemem „uczenia molekuł”, problemem miary informacji chemicznej oraz problemem praw rządzących dynamiką informacji w przestrzeni i w czasie. Nowego sformułowania i uwzględnienia wymaga także funkcja pełniona przez molekułę (funkcja molekularna). W tym otoczeniu strukturalnym (i informatycznym) może przebiegać złożona, nieliniowa, nierównowagowa dynamika. Te dwa czynniki: złożoność struktur (o małej stabilności) oraz wspomniana dynamika prowadzą do bogactwa struktur dysypatywnych zależnych zarówno od aspektów strukturalnych jak i parametrów dynamiki.