

OBSAH

VIZE SKRYTÉ REALITY

1	
METODOLOGIE CHEMIE	9
Místo předmluvy	11
Cestou k modelům	13

ČAS PAMĚTI

2	
STRATEGICKÉ INFORMACE	35
Informace o objektech	38
Informace o vazbách	59
Informace o podstatě chemických reakcí	90

ČAS LOGIKY

3	
VĚDNÍ OBOR JAKO SOUSTAVA METOD A OBECNÝCH NÁVODŮ	
Pravidla hry	121
Logika myšlení	134
Logika modelování reakčních mechanismů	195

ČAS KOMPOZICE

4	
JAK BY MOHL MYSLIT CHEMIK	205
Reakční mechanismus je logickou konstrukcí	208
Skutečnost je složitá, ale principy, kterými se řídí, jsou jednoduché	228
Soupravy modelů reakčních mechanismů	239
Grafová podoba modelů reakčních mechanismů	294

REJSTRÍK	315
-----------------	-----

VIZE SKRYTÉ REALITY

1

METODOLOGIE CHEMIE

9

Místo předmluvy

11

Cestou k modelům (princip poznávání skutečnosti)

13

Přeměna informace

13

Člověk jako tvůrce dějin i sebe sama

14

Chemie je povahy tazavé

14

Vědět = znát příčiny

16

Konstanty a proměnné

17

Stupně poznání skutečnosti

20

Sjednocování chemické zkušenosti

24

Lidské poznání má povahu fraktálů

26

Tvořivá činnost chemika

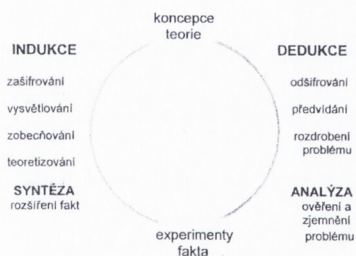
29

Vědecká metoda

31

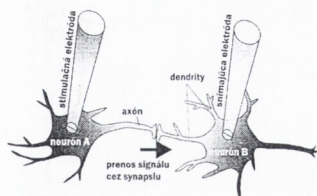
Poznávací proces

32



STRATEGICKÉ INFORMACE

Informace o objektech (princip trvání)	35
Metodologie chemie	37
Informace o objektech chemie	38
Evoluční proces ve světě atomů	39
Teorie atomu v molekule (AIM)	42
Valenční stavy atomů	43
Parametry atomů v molekulách	45
Vektory valenčních stavů	47
Deskriptory valenčních stavů atomů (VSA)	53
Prostor valenčních stavů atomů	57
Informace o vazbách, o důsledcích jejich existence a o povaze jejich změn (princip složitosti)	59
Chemická vazba	59
Základní kvantita: elektronová hustota	60
Parametry DFT	61
Modely vzniku a zániku vazeb	64
Účetnictví valenčních elektronů	66
Konverze valenčních stavů atomů	69
Grafy konverzí valenčních stavů atomů	70
Grafy elementárních konverzí stavů atomových vektorů (ECSAV)	72
Elementární proces (EP) a epizoda (EPI)	83
Rozbor epizod EP	84
Informace o podstatě chemických reakcí (princip změny)	90
K podstatě chemických reakcí	90
Modely hraničních orbitalů	90
Interakce hraničních orbitalů	100
Aktivační energie	110
Lewisovy kyseliny a Lewisovy báze	111



VĚDNÍ OBOR JAKO SOUSTAVA METOD A OBECNÝCH NÁVODŮ

Pravidla hry (princip hledání)	121
Logická složka chemie	121
Věda o pravdě	122
Myšlení chemika	123
Jak probíhají reakce	124
Elementární kroky (EP) a jejich epizody (EPI)	130
Logika myšlení (princip reálného usuzování)	134
Chemický vzorec \equiv kondenzovaná informace	134
Chemie je také jazyk	135
Logika a poznávání skutečnosti	137
Analýza	142
Syntéza	142
Nacházení nových vztahů	145
Zobecnování	146
Podobnost	148
Chemická podobnost v izomerii	149
Operační myšlení	151
Pravděpodobnostní úsudky	153
Reduktivní úsudek	154
Hypotetické usuzování	154
Neúplná indukce	155
Fuzzy logika	157
Úsudek z analogie	160
Teorie informací	166
Přirozená dedukce	169
Induktivní usuzování	171
Řešení problémů	174
Řešení problémů jako kognitivní proces	176
Zásady a fáze řešení problémů	180
Postupy řešení problémů	185
Logika modelování reakčních mechanismů (princip reprezentace)	195
Předpoklady pro modelování reakčních mechanismů	195
Dominantní procesy interakcí	195
Kvalitativní a kvantitativní myšlení	196
Báze znalostí	197
Rekapitulace poznatků	198
Kategorie chemie	201
Zobrazení modelů reakcí na vzory typových reakčních mechanismů (TRM)	201

JAK BY MOHL MYSLIT CHEMIK	205
Reakční mechanismus je logickou konstrukcí (princip podobnosti)	208
Nejmenší akce, postačující pohyb	208
Složitá příroda a jednoduchý obraz	212
Operační manuál	213
Odstupující skupiny	217
Marcusova teorie	218
Reorganizační energie eduktů	218
Dynamika vývoje v chemii	223
Pronikání do mikrosvěta	226
Cíl vědy: dosáhnout obecného poznání	227
Skutečnost je složitá, ale principy, kterými ji popisujeme, jsou jednoduché (princip dvojitého kontrapunktu)	228
Matematický model reakčních mechanismů	228
More O'Ferrallový diagramy (MOF)	229
Znovu alfanumerické kódy (ANCOD)	231
Co očekáváme od metod DFT v naplňování modelů reakčních mechanismů	233
K typovým reakčním mechanismům (TRM)	234
Soupravy modelů reakčních mechanismů (princip zrcadlení)	239
Substituce	239
modely mechanismů nukleofilních substitucí	239
modely mechanismů radikálových substitucí	246
modely mechanismů elektrofilních substitucí	247
Eliminace	251
modely mechanismů nukleofugních eliminací	251
modely mechanismů oxidativních a redukčních eliminací	256
modely mechanismů elektrofugních eliminací	258
modely mechanismů radikálových eliminací	259
Adice	261
modely mechanismů nukleofilních adicí	264
modely mechanismů reakcí systémů RCOY	268
modely mechanismů elektrofilních adicí	276
modely mechanismů oxidativních adicí	281
modely mechanismů radikálových adicí	284
modely mechanismů polymerací	286
modely mechanismů cykloadicí	288
Reakční cesta a sekvence elementárních kroků	289
Grafová podoba modelů reakčních mechanismů (princip molekulové a chemické podobnosti)	294
Operace nad prostorem konverzí valenčních stavů atomů	296
Vyvození možných prekurzorů	296
Plausibilní náměty interakcí eduktů	298
Kvantově řízené disociace vazeb	301
Návrhy pravděpodobných reakčních produktů	302
Počítačové návrhy organických syntéz	303
Překvapení jsou zdrojem poznání	304
Hledání logické struktury chemie	307