

Den Naturvidenskabelige Forklaring

Noter til anden dag af et tidligere kursus i
Videnskabsteori og etik for de kemiske fag

Naturvidenskabelig teoridannelse

- Observationen

- Det begrundede gæt

Simple og sammensatte systemer

- Idealiserede beskrivelser

- Beregning, forståelse, forudsigelse

- Tilnærmelser og forbehold

Helges Regler

Randbetingelser og præciseringer

Occams ragekniv

Popper og Kuhn

- Falsifikation

- Paradigmer

- Paradigmeskift

Poppers sondring (demarkationsproblemet)

En model, nukleofil substitution

- Mangeparametersituationer

Noterne ligger i forlængelse af noter til kursets første dag, om den naturvidenskabelige metode. De søger fortsat at tage fuglenes parti (i Feynmans forstand), ved fortrinsvis at fokusere på de kemiske fags egne metoder og redskaber.

Naturvidenskabelig teoridannelse

Hvor stor er en teori? Dagligsproget er uklart, 'teori' er et gummiord. Det kan betegne en svagt underbygget antagelse, en formodning ('det er jo bare en teori'), eller betyde det velfunderede, sammenfattende grundlag for større forskningsområder (relativitetsteorien, evolutionsteorien), eller forskelligt herimellem.

Det er nyttigt at have en ordnet terminologi, som ikke er mere tung end at den kan anvendes på såvel store problemstillinger som beskedne undersøgelser, og som følger sammenhængen mellem observationer, gætterier, antagelser, hypoteser, modeller, forklaringer, teorier og love, uden dog at insistere på skarpe grænser mellem disse.

Det første spørgsmål er: Er det reelt muligt at observere uden først at have været forundret?

At foretage en observation er ikke det samme som blot at registrere at noget findes eller at noget har fundet sted. Interessen skal først fanges. Vi lægger egentlig kun mærke til de ting der kunne have været anderledes, og derved er vore forventninger (dvs vor viden) udgangspunkt for den første undren. En forudsætningsløs observation er ikke mulig.

Er der tale om en naturvidenskabelig problemstilling kan observationen føre til en systematisk bearbejdning, der indledes med et begrundet gæt. Dette tager afsæt i den første undren. Ved det videre arbejde præciseres observationen; gæt bliver til arbejdshypotese hvis forudsigelser afprøves, successivt forbedrede hypoteser og yderligere afprøvninger følger efter.

Resultatet kan være en påvist årsagssammenhæng, eller måske endog en forklaringsmodel, dvs en samlet (men måske uprætentiøs) beskrivelse af flere beslægtede problemstillinger; kan savne en solid teoretisk underbygning, sigtet omfatter måske kun et mindre område. Dette er ofte det endelige mål.

Til teorien (og loven) kommer man når ambitionsniveauet er højt. Teorien er den endelige formulering af forklaringer der vedrører et felt (fremfor et emne), med randbetingelser, forudsigelser, overensstemmelse med det overordnede begrebsapparat. Teorien udtaler sig om hvordan det forholder sig, og ofte også om hvorfor.

Love er i reglen ligninger der udtrykker kvantitative sammenhænge; de indeholder teoriens umiddelbare konsekvenser, men hverken dens begrundelser eller dens forklaringer.

Strengt taget er det nok sådan, at vi med teorier ikke beskriver naturen, men beskriver hvordan vi opfatter naturen.

Observationen spiller en central rolle når naturvidenskabelige forklaringer opbygges og efterprøves. En ofte set beskrivelse heraf kaldes den induktive metode; den bygger på *observation* fulgt af *deduktion* og derpå *generalisation*. Dette billede er imidlertid ikke dækkende. Vi lægger kun mærke til det usædvanlige, og vi slutter os ikke til forklaringen, vi bearbejder en gættet sammenhæng.

En egentlig observation forudsætter nemlig at opmærksomheden først er fanget. Vi kan nok være til stede, men bliver kun nysgerrige hvis der er uoverensstemmelse mellem den umiddelbare forventning og den faktiske hændelse (alle billerne kravler samme vej, æblet falder opad, torden-skyerne udløste ikke regn). Observationens nødvendige forudsætning er den måske ubevidste forventning.

Enhver ny observation er således betinget af iagttagerens forudgående viden; omstændighederne kan være selvvalgte (vi foretager et eksperiment) eller implicitte (vi overraskes mens vi laver noget andet).

Har observationen vakt vor interesse præciseres den. Er fænomenet reproducerbart? går det hurtigere ved opvarmning? katalyseres det af syre? osv. De eksperimenter og overvejelser der forekommer relevante og let-gennemførlige udføres.

Den præciserede observation er udgangspunkt for et begrundet gæt (Poppers *conjecture*) på fænomenets oprindelse og dermed for formulering af en arbejdshypotese. Vi kan ikke stille spørgsmål med mindre vi tror der er et svar, så vi må forestille os en konkret, mulig årsagssammenhæng, og derudfra tilrettelægge undersøgelser og opstille eksperimenter. Vor viden og begrebsapparat bestemmer dermed hvilke spørgsmål der kan stilles og hvilke svar man kan få. Når sammenhængen er afprøvet kan hypotesen forfines, den ny sammenhæng afprøves, hypotesen forfines igen, osv osv, indtil der er nogenlunde overensstemmelse. De endelige forklaringer fremkommer ved iteration.

Når vi søger systematik i en række beslægtede resultater kan det synes at vi går induktivt til værks. Imidlertid ligger der i selve udvalget af resultater en (begrundet) forventning om relevans, dvs om årsagssammenhæng; vi har altså allerede en mening om hvad forklaringen går ud på.

Det er ikke al søgen efter naturvidenskabelige forklaringer der tager udgangspunkt i konkrete hændelser. Den første undren kan have sin

oprindelse ved skrivebordet – måske foranlediget af fravær af systematik i (andres) resultater eller konstatering af tilsyneladende uerkendte sammenhænge på et bestemt område. Men også denne første undren er baseret på vor forudgående viden, og fører til det gæt der danner grundlag for en arbejdshypotese.

Den korte sammenfatning: vi ved noget, som lader os se noget, som lader os gætte på en sammenhæng. Når det begrundede gæt er præciseret kan vi finde frem til en afprøvning, og derpå konkretisere afprøvningens mulige udfald og de deraf afledte mulige tolkninger (den naturvidenskabelige metode).

Implikationen er, at vi har svært ved at se noget der ligger udenfor vor horisont (det vi ved), lige så lidt som vi ville kunne forklare det. Derfor er præmature opdagelser vanskelige. Observationen kan kun gøres af iagttagere med de rette forudsætninger, personer der ved nok til at kunne se at dette vist er lidt underligt.

Dans le champs de l'observation, le hazard ne favorise que les esprits préparés (Louis Pasteur, 1854) – hvad angår observation tilsmiler heldet kun de forberedte sind. Heldet følger den forberedte.

Modellers funktion – Simple og sammensatte systemer

Indenfor kemi har vi kun få entydige love uden særlige tilnærmelser og forbehold, som fx bevarelsesætningerne (at masse og energi i lukkede systemer er konstant). Derimod har vi en række idealiserede beskrivelser, hvor forskellene mellem forudsigelser og den konkrete virkelighed er små og til at forstå; idealgasloven, massevirkningsloven, transition state teorien.

Til disse føjer sig en række tilnærmede beskrivelser, modeller, der kan være udgangspunkt for begrundelser, men ikke umiddelbart for strengt afprøvelige kvantitative forudsigelser. Dette gælder for de fleste beskrivelser af kollektive vekselvirkninger. Hertil kommer simplificerende forklaringer, som oktetreglen og de Lewis formelbilleder, der ofte anvendes ved beskrivelse af struktur og reaktionsforløb. Det er vigtigt at også modeller af den art lever op til de krav vi gerne stiller til egentlige teorier (se Helges regler, nedenfor).

Den naturvidenskabelige omverdensbeskrivelse tager afsæt i 15-1600-tallets astronomi og fysik, hvorfra den får som mål at formulere stringente forklaringer der angiver sammenhængen mellem bestemte egenskaber, så vidt muligt kvantitativt. Dette sigte genfindes traditionelt i forventning-

erne til teoridannelse i de kemiske fag. Systemerne anses i princippet som styret og forklaret ud fra grundlæggende fysiske love, men den konkrete anvendelse af disse fejler på grund af systemernes kompleksitet.

Som hovedregel er det derfor kun sjældent muligt at påvise at lovene følges strengt, eller at udlede detaljerne i kemiske systemers opførsel derudfra (se Christie og Christie, *Chemical laws and theories*). Forsøg på at finde eller konstruere tilstrækkeligt simple konkrete systemer, hvor kun ganske få kendte, velbeskrevne fænomener øver afgørende indflydelse, løber gerne ind i uoverstigelige vanskeligheder. Af samme grund bliver forsøg på komplette beskrivelser i reglen helt uoverskuelige.

Idealisering. I stedet søges tilstrækkeligt forenklede beskrivelser, dvs sigtet forskydes henimod opbygning af modeller, der skal afbilde en afgrænset del af virkeligheden så godt som muligt. Overordnet set sondres mellem modeller der sigter på forklaring, og modeller der sigter på numerisk forudsigelse (se Weisberg, *Three kinds of idealization*).

I **simple modeller** med numerisk forudsigelse som formål rettes metoderne til, så et resultat kan opnås indenfor rimelige ressource-mæssige og tidsmæssige rammer. I denne henseende anvendes såvel teoretiske som beregningstekniske tilnærmelser.

Et eksempel kunne være den anvendte kvantekemi, hvor der hugges en hæl og klippes en tå for at nå et brugbart resultat på en rimelig tid. Meget små bidrag udelades og meget bekostelige delberegninger erstattes af tilnærmelser, uanset om begrebsmæssigt vigtige forhold berøres; overvejelserne er tekniske/praktiske.

Modeller af denne art er i reglen hjælpemidler, og indeholder ikke nødvendigvis et vigtigt element af forklaring. De kan først opstilles når de overordnede årsagssammenhænge er kendt.

Hvis **forklaring** er modellens formål skal simplifikationer derimod tjene til at formindske uoverskueligheden, så de vigtigste årsagssammenhænge fremstår tydeligt; en eventuel numerisk overensstemmelse tillægges mindre betydning. Dette er især påkrævet når det gælder fænomener hvor adskillige effekter af samtidig betydning er i spil, som fx vekselvirkninger i opløsning eller kemiske reaktioners forløb. De fleste vigtige elementer lader sig nok beskrive og adlyder en kendt lov-mæssighed, men samtidig variation og indbyrdes afhængighed stiller sig i vejen for skarpe forudsigelser.

Af denne grund kommer en formel beskrivelse af kemiske reaktionsforløb og mekanismer nemt til at indeholde en stribe forbehold og tilnærmelser, og det kan dermed være vanskeligt at tage kritisk stilling til konkrete forudsigelser. Mangeparameterteorier kommer så at sige ofte med bortforklaringerne indbygget. Det springende punkt er den simplificerende forklarings stringens.

Det er værd at bemærke at det var kemikernes modelforstillinger der førte frem til begreber som atomet og elektronen, længe før disse blev nyttige eller nødvendige i andre discipliner. De var hensigtsmæssige bestanddele af modellerne, ikke frugten af eksperimentelt arbejde eller teoretiske udledninger.

De almindeligste tilnærmelser går ud på at komplicerede inter- og intramolekylære vekselvirkninger kan ignoreres (fx antagelsen om stive rotorer, harmoniske oscillatorer, uendelig fortynding, idealgasopførsel). Dernæst forventes gerne homogenitet og statistisk energifordeling, og at et eventuelt solvent ingen særlig indflydelse har (hvilket når talen er om ioner er en i særklasse lidet realistisk antagelse).

Den måske mest problematiske almindelige antagelse bygger på forventningen om separabilitet, at de forskellige vekselvirkninger kan betragtes hver for sig og ikke indgår i kooperative relationer. Er denne antagelse fejlagtig vil ensembles opførsel ikke afspejle den simple sum af komponenternes egenskaber, og dermed vanskeliggøres beskrivelse af fx biologiske systemer. Det er nødvendigt at forstå hvad de enkelte vekselvirkninger beror på, men samtidig urimeligt at antage at de er indbyrdes uafhængige. Reduktionisme er nødvendig og utilstrækkelig.

Mange modeller der søger at gøre rede for virkelige kemiske hændelser vha simple og systematiske forklaringer forudsætter dermed, at det er muligt a priori at udpege de vekselvirkninger der i det konkrete tilfælde vil være særlig vigtige. Herved stilles krav om erfaring, hvilket kun vanskeligt kan afprøves eller beskrives objektivt.

Forklarende beskrivelser af kemiske reaktioners forløb kan ofte med fordel bygges op omkring et eller flere idealtilfælde, dvs omkring en redegørelse ved eksempel for de egenskaber og forhold der kan øve afgørende indflydelse på reaktionsforløbet, sammen med en nøgle til de forhold der kunne bevirke afvigelse fra idealtilfældet. Den systematiske beskrivelse af nukleofil substitution på carbon illustrerer dette (sidste afsnit).

Det er imidlertid vigtigt at simplifikationer fremgår explicit, og at forudsigelserne er konkrete, så vidt muligt afprøvelige, og ikke-trivielle. Tomme postulater om reaktioners mekanisme eller enzyms funktion har intet formål.

På nogle områder anvendes ind imellem inkompatible modeller, beskrivelser der kan bygge på uforligelige antagelser. Fra dagligdagen kendes vejr-udsigterne, der bygger på flere ret forskellige fremskrivninger af de atmosfæriske forhold, men også valensbånd beskrivelser og molekyl-orbitalteori kan ses som uforligelige modeller. De tjener lidt forskellige formål, men samtidig anvendelse giver ikke anledning til problemer; tværtimod, de kompletterer hinanden.

Den begrebsmæssige ramme for systematisk arbejde med kemi og beslægtede molekylærvidenskaber består dermed dels af love og lovmæssigheder, mest af fysisk og fysisk-kemisk art, der tillader kvantitative forudsigelser med rimelig nøjagtighed; fx massevirkningsloven.

Dertil kommer teoretisk velfunderede modeller (og nogle ikke-helt-så-velfunderede), der bidrager til forståelse af observationer og begrundelser, men som kun sjældent med rimelighed kan bruges kvantitativt; fx transition state teorien.

Endelig har vi modeller der med udgangspunkt i konkrete årsag-virkningsforhold kan beskrive og kvalitativt forklare kollektive veksel-virkninger og reaktionsforløb. Disse er gerne mange-parameterbeskrivelser der kun undtagelsesvis kan være på én gang nyttige og simple. De fører ofte til afprøvelige forudsigelser, men tilnærmelserne kan stille sig i vejen for strenge forsøg på falsifikation (se nedenfor). Ledetråden er her som så ofte at *Models are to be used, not believed* (H. Thiel).

Det er især nødvendigt med retningslinier i de tilfælde hvor kvantitativ efterprøvning af forklaringsmodellen frembyder vanskeligheder. Helge Kragh (*Videnskabens Væsen*) har sammenfattet en række forventninger til den naturvidenskabelige forklaring, som influerer på hvordan den formuleres og på hvordan den afprøves; jeg har tilføjet forskellige afgrænsninger.

Helges regler

En god forklaring angiver ikke blot en korrelation mellem størrelser, men også en mekanisme der viser hvordan korrelationen kan forstås [*dvs hvad sammenhængen skyldes*]. Denne mekanisme bør desuden være i overensstemmelse med etableret viden.

En forklaring med bredde, dvs en der kan forklare mange fænomener, er at foretrække frem for en forklaring der kun kan belyse et enkelt forhold.

En simpel forklaring er bedre end en kompliceret forklaring [*Ockhams ell. Occams rasekniv*].

En god forklaring bør være integreret med andre accepterede forklaringer og teorier, og ikke fremstå som teoretisk isoleret.

En god forklaring er frugtbar, i den forstand at den resulterer i interessante spørgsmål og nye problemstillinger.

En god forklaring eller teori bør være konsistent.

En god forklaring kan såvel forklare som forudsige, og forudsigelserne skal være ikke-trivielle og skal kunne undersøges (Poppers falsifikationskrav), dvs det skal være muligt at vise at forklaringen er gal.

Også forklaringer med relativt begrænset sigte bør såvidt muligt være i overensstemmelse med Helges regler; disse danner også ramme for den daglige samtales argumenter og begrundelser.

Randbetingelser og præciseringer (Steens postulater)

En teori er en sammenhængende forklaring på hvordan og hvorfor tingene på et bestemt område hænger sammen. Som forklaring er en ligning ikke tilstrækkelig, en eventuel kvantitativ sammenhæng er ikke i sig selv en teori. Forklaringer tillader os at forudsige omgivelsernes opførsel, og de letter desuden vor rubricering af hændelser og observationer.

Naturvidenskabelige aktiviteter har ikke alle teoridannelse for øje. Undersøgelser af nye områder begynder ofte med en naturhistorisk fase; det er nødvendigt først at vide hvad der sker førend vi forsøger at forklare det. Men udforskningen kan ikke finde sted i blinde; sigtet bør være explicit og begrundet.

En undersøgelses mulige resultater skal kunne konkretiseres og tolkes på forhånd ("*Når du kender udfaldet af dit eksperiment, hvad ved du så?*"). Hvis udfaldet sandsynligvis ikke vil tillade konklusion er eksperimentet kun værd at udføre hvis det er nemt. For at vide mere er noget andet end at blive klogere; lærer man en side af telefonbogen udenad ved man mere, men er ikke blevet klogere.

Det vigtigste er spørgsmålet, dernæst eksperimentet. Når udfaldet tolkes er resultatet afgørende, ikke redskabet; problemstillingen, ikke metoden; svaret, ikke spektret. Eksperimentet er ikke sit eget formål.

Teorier har oftest randbetingelser. Er disse ikke opfyldt finder teorien ikke anvendelse, og dens gyldighed kan ikke undersøges.

Det er ikke gyldigt at argumentere ved udelukkelse ("*Hvad skulle det ellers være?*"), med mindre samtlige mulige forklaringer er kendt. Man kan ikke lade sin manglende fantasi være et videnskabeligt argument. Det er altid en ret, ind imellem måske endda en pligt, at kunne sige "*Det ved jeg ikke*".

Menckens lov, "*Til ethvert kompliceret spørgsmål hører et simpelt svar – og det er galt!*". Mangeparameter problemstillinger kan ikke beskrives tilfredsstillende med én-parameterforklaringer. Dette negligeres hyppigt af undervisere og agitatorer.

Ad hoc forklaringer er lidet nyttige. Det er usandsynligt at fænomenet er enestående, og det er derfor utilstrækkeligt at opfinde en isoleret begrundelse. Henvisninger til uundersøgelige sammenhænge har kun metafysisk interesse, og tilsyneladende korrelationer påviser ikke årsager (*post hoc ergo propter hoc*).

Det interessante spørgsmål er *Hvorfor*, ikke *Hvordan*. Naturvidenskabernes sigte er at forstå naturen, ikke at blive bedre til at udnytte den. *Science is about discovery, not invention* (J. Christie).

William of Occam (~1285-1349)

Occams ragekniv er en formaning om at forklaringer skal være så simple som muligt (*Pluralitas non est ponenda sine necessitate*, fremfør kun flere årsager hvis nødvendigt). Ragekniven er nyttig når forskellige iøvrigt rimelige forklaringer sammenlignes, først og fremmest som metafor for at skære ind til kernen, og som værn mod overfortolkning. At princippet udgør en fornuftig rettesnor skyldes tildels at simple forklaringer er nemmere at forstå og nemmere at afprøve; vigtigere er dog, at den komplicerede

forklaring indeholder en (implicit og gerne uunderbygget) påstand om at de yderligere effekter rent faktisk er af betydning.

På engelsk benævnes ragekniven somme tider *the principle of parsimony* (nøjsomhed).

At Occams ragekniv ikke altid er et godt princip illustreres af Menckens lov. Udsagnet "*eksperimentets udfald skyldes A*" er simpelt, men udsagnet "*udfaldet skyldes $x_A + y_B$* " er mere produktiv ('frugtbart', i Helges terminologi), fordi det søger nærmere undersøgelse af B og af Bs betydning. Som sammenfattet af Einstein, *Make everything as simple as possible, but not simpler.*

Popper og Kuhn

En af de få videnskabsfilosoffer hvis tanker har gjort indtryk hos praktiserende forskere er Karl Popper (1902-94). Han fremhæver at

teorier ikke kan bevises (men dog underbygges)
 teorier skal føre til ikke-trivielle forudsigelser
 teorier skal være falsificerbare (gerne indebære en "*risky prediction*")
 teorier bør være internt modsigelsesfri
 teorier kan revideres, men ikke 'forbedres' ved ad hoc modifikationer

Disse synspunkter understøtter at modsigelse fremfor bekræftelse er den videnskabelige udviklings drivkraft.

Popper tager afstand fra den rene induktive metode og påpeger, at forklaringer ikke kommer fra nøgne data, men udvælges ved sammenligning med andre forklaringer; vi bruger den bedste af dem vi har (hvorved falsifikationskriteriet blødes betydeligt op).

For Popper er sondringen mellem videnskab og ikke-videnskab afgørende vigtig, og det er her han finder den egentlige begrundelse for falsifikationskravet (demarkationsproblemet; en oversat beskrivelse heraf findes nedenfor). Hans (og Helges) kriterier er praktiske, dvs konkret anvendelige, men kan komme under pres dersom teoriens faglige grundlag bliver omstridt.

Paradigmer. Videnskabelige aktiviteter finder sted indenfor bestemte begrebsmæssige rammer, af Thomas Kuhn (1922-96) betegnet paradigmer (paradigme, forbillede, mønstergyldigt eksempel). Disse udgøres af de antagelser og metoder der er fælles for det pågældende videnskabelige samfund, en faglig matrix. Paradigmet er forskningens logiske ramme, ganske som vor forudgående viden er observationens. Systematisk falder paradigmer iflg Kuhn i fire dele, generaliseringer, begrebsapparat, værdier og forbilleder.

Generaliseringerne er de alment accepterede forestillinger og love der udgør det fælles grundlag for vor tankevirkksomhed (naturlove og aksiomer, som at virkning forudsætter årsag, massevirkningsloven, hovedsætningerne, Schrödingerligningen).

Begrebsapparatet styrer hvordan viden opsøges og (dernæst) struktureres, og angiver hvilke formodninger vi gør os om virkelighedens indretning. Det udgøres af de overordnede modeller og anskuelser der afgrænser vore overvejelser (fx forestillingen om valens, om at molekyler er opbygget af atomer, om ligevægt, om overgangstilstande). Det er begrebsapparatet der bestemmer hvilke spørgsmål der kan stilles, og hvilke svar man kan få (og forstå).

Værdierne er den fælles målestok for vurderinger, fx Helges regler og Mertons normer, og at vi lægger vægt på forhold som omhu, nøjagtighed, reproducerbarhed, konsistens, enkelhed, perspektiv, objektivitet, kvalitet.

Forbillederne udgøres af det regelsæt og det indhold som den videnskabelige opdragelse og metode har (påvirkning fra store forskere, fra vigtige værker, manualer, øvelsesvejledninger, etc).

Det indhold der ligger i generaliseringer og begrebsapparat hænger nøje sammen med det der udgør paradigmets værdier og forbilleder. Paradigmet afgrænses af generaliseringer og værdier, mens begrebsapparat og forbilleder i højere grad har en udfyldende funktion.

Paradigmet udgør et fælles udgangspunkt for forskere indenfor samme felt, men det er en iøjnefaldende svaghed at det konkrete paradigme ikke er klart defineret. Man kan ikke slå dets indhold og afgrænsninger op nogetsteds. Der er tale om en ikke-explicit fælles opfattelse af hvad der er vigtigt og mindre vigtigt.

De parentetisk angivne eksempler i det ovenstående peger på nogle af de elementer der kunne indgå i et paradigme der var fælles for de kemiske fag. Dog kan begrebsapparatets elementer nok udbygges lidt forskelligt,

og valg af forbilleder og forbilledlige undersøgelser vil nok variere noget mellem subdiscipliner. Deres funktion er både instruktion og illustration, og det er ikke afgørende om alle detaljer er fælles for alle der omfattes af paradigmet.

Paradigmets værdier afspejles bl.a. i de normer som finder udtryk i Mertons retningslinier, hvor det dog er uklart hvordan de anvisninger der gælder ikke-diskrimination med hensyn til køn, etnicitet, tro eller seksuel orientering kan bringes i overensstemmelse med evt politiske forventninger om positiv særbehandling af bestemte grupper. Sådanne overvejelser vanskeliggøres af at indholdet bygger på udtalte vedtagelser.

Paradigme-betegnelsen kan også anvendes på (et udsnit af) forbillederne, da disse kan tjene som model for hvordan normalvidenskabens problemer bearbejdes og præsenteres.

Paradigmets afgrænsninger er såvel positive som negative i henseende til emner og forklaringer. Er disse ikke mulige/rimelige/fornuftige indenfor paradigmets logiske univers forkastes de uden nærmere overvejelse, som fx at der skulle kunne være en kausal sammenhæng mellem fødselstallet og antallet af rugende storke, at man med pilekviste skulle kunne finde vand, eller at man ved tankens kraft skulle kunne få legemer til at svæve.

Indgriben fra overnaturlige kræfter udelukkes ligeledes, og overensstemmelse med religiøse værker tillægges ingen betydning. Heri ligger ingen afstandtagen, blot har disse ikke genstandsfelt til fælles med naturvidenskaben.

Paradigmeskift. Med lange mellemrum er det indenfor flere naturvidenskabelige discipliner sket at grundlaget for begrebsdannelsen, paradigmet, ændres fundamentalt. Kuhn har kaldt dette et paradigmeskift, dvs et begrebsmæssigt jordskælv, som fremkomsten af det heliocentriske solsystem, af relativitetsteori og kvantemekanik indenfor fysikken, eller evolutionsteorien indenfor biologien. Under et paradigmeskift er det usikkert hvordan nyudviklede teorier skal forankres i det overordnede begrebsapparat (det gamle eller det nye paradigme?), og afprøvningsprincipperne kan ligeledes forrykkes.

En videnskabelige revolution der fortjener betegnelsen paradigmeskift indebærer enten en radikal nyfortolkning af kendte resultater, er en konklusion på en langvarig uenighed hvorved nye problemstillinger kan inddrages, eller indvarsler en teoretisk forståelse på helt nyt niveau.

Imidlertid er sådanne videnskabelige revolutioner sjældne. Teorier modificeres, nye kommer til, hvilket Kuhn betegner som normalvidenskab, og her fungerer den Popper-inspirerede forståelse af teoriudvikling udmærket. Med jævne mellemrum annonceres paradigmeskift blot fordi nogen får en god ide, men det er i reglen kun en banal misforståelse af begrebet. Sådan nogen er STORE.

Kun ganske betydelige og pludselige ændringer af det pågældende forskningsfelts tankesæt udgør paradigmeskift i traditionel kuhnsk forstand. Sådanne indtræffer så sjældent, at de indenfor visse discipliner nok aldrig har fundet sted. Det er derfor uhensigtsmæssigt at lade en generel beskrivelse af den videnskabelige udvikling hvile på forekomsten af den slags atypiske hændelser. Paradigmet kan i stedet opfattes elastisk, i den forstand at det kan modificeres løbende efterhånden som den normalvidenskabelige indsats ændrer på dets forudsætninger.

Derved kan selv forholdsvis store begrebsmæssige ændringer glidende blive accepteret indenfor paradigmet, således at forskernes overtagelse af det modificerede udgangspunkt sker ved samtale og ikke indebærer et skisma. Dette åbner mulighed for at se de sjældne videnskabelige brud som enkeltstående begivenheder, uden at der skulle være et påtrængende behov for at betragte dem som nødvendige dele af en overordnet model for videnskabelige fremskridt. Den slags dynamiske paradigmer har en del til fælles med andre beskrivelser 'forskningsprogrammer' eller 'forskningstraditioner'.

Modifikation af paradigmet sker når rigtig vigtige nye opdagelser bevirker tilføjelse eller bearbejdelse af begrebsapparatet og føjes til forbillederne. Regelrette paradigmeskift ville derudover indebære at vigtige generaliseringer erstattedes.

Visse dele af paradigmet er træge, kan kun vanskeligt modificeres eller erstattes; dette gælder især værdierne. Andre, især blandt forbillederne, er illustrationer og kan skiftes ud uden større ståhej.

I den videnskabsteori som praktiserende forskere har taget til sig har Poppers tanker været af stor betydning, ikke mindst i kraft af hans forkastelse af induktionen og hans introduktion af falsifikationsprincippet. Kuhns præcisering af paradigmets betydning, både når det er stabilt og når det ændres, har ligeledes spillet en stor rolle, men ellers har mange uenigheder om disse ting nok større betydning for videnskabs teorien end for naturvidenskaben. De der bedriver denne prioriterer

anderledes end de der beskriver den. Det er som med ornitologien; fuglene kerer sig ikke meget.

Når teorier forankres tilstrækkeligt dybt i det eksisterende paradigme kan sammenhænge og begrundelser til sidst henvise til postulater om virkeligheden der tilsyneladende savner retfærdiggørelse. Plus tiltrækker minus. Sådan er det bare. Lysets hastighed i vacuum er konstant. Sådan er det bare. Naturkonstanter sat på ord. Hvad denne tingenes tilstand skyldes har nok mest metafysisk interesse, så længe skaberen (bemærk, lille 's') ikke ellers blander sig i det der foregår.

Analyse og fremgangsmåder som beskrevet her finder kun begrænset anvendelse på problemløsning med udefra afgrænsede emner og specifikt angivne mål (jfr Ziman). Her kan naturvidenskabelig metode og håndværk være vigtige, men de specifikke krav kan gøre påvisning og afprøvning af årsagssammenhænge irrelevant. Formålet er at producere resultater, ikke viden; at det virker kan være nok.

Personificeret ved Lavoisier begynder den moderne kemi at tage form lidt før år 1800, hvilket indebærer et fuldstændigt brud med alkymisternes tankesæt. Havde Lavoisier kendt til Kuhn ville han have dømt paradigmeskift, men det er tvivlsomt om der egentlig var noget veldefineret at skifte ud; paradigmet skabtes af Lavoisier. Faktisk befinder kemien sig før Lavoisier i hvad netop Kuhn kalder en præ-paradigmatisk fase. Den efterfølgende udvikling indebar betydelige ændringer af begrebsdannelsen, men i reglen uden at det hidtidige grundlag blev opgivet.

Denne opbygning og modifikation af teorier er emne for kursets anden del, et gennemløb af hvordan valensbegrebet opstod og udvikledes, og en diskussion af nogle eksempler på banebrydende (men oprindeligt omstridte) opdagelser.

J. R. Christie og M. Christie, *Chemical laws and theories*, Found. Chem., **5**, 165 (2003).

M. Weisberg, *Three kinds of idealization*, J. Philos., **104**, 639 (2007).

H. Kragh, *Videnskabens Væsen*, Fremad, 1999.

Beslægtede noter, om Den Naturvidenskabelige Metode og om Valensbegrebets Udvikling, findes på <http://www-mf.kiku.dk/videnskabsteori>.

Poppers sondring mellem videnskab og ikke-videnskab

(oversat og bearbejdet uddrag af artikel om Popper i Stanford Encyclopedia of Philosophy; <http://plato.stanford.edu/entries/popper>)

Popper tager falsificerbarhed som det kriterium der gør det muligt at sondre mellem naturvidenskab og ikke-naturvidenskab. Ville en konkret forklaring kunne være uforligelig med bestemte mulige eksperimentelle observationer (dvs kunne vises at være gal) er den videnskabelig. Modsætningsvis er en beskrivelse der ville være forligelig med et hvilket som helst udfald ikke-videnskabelig. Heri ligger dog ikke at den nødvendigvis er meningsløs.

Som Popper ser det er denne sondring et af videnskabsfilosofiens centrale problemer, at kunne kende forskel på (natur-)videnskab og det han betegner ikke-videnskab; hertil regner han områder som fx logik, metafysik og psykoanalyse. Han godtager Humes kritik af induktionen (se efterskrift), og går endog så langt, at han mener at forskeren kun sjældent konkret betjener sig heraf. Synspunktet er at Bacons og Newtons beskrivelse, som indebærer at observationen er det første trin når naturvidenskabelige teorier skabes, er aldeles forfejlet. Al observation er selektiv og sker på baggrund af (implicitte) forventninger, og det er derfor ikke muligt at gøre rene, forudsætningsløse observationer. Herved svækkes den traditionelle antagelse, at anvendelsen af den induktive metode udgør det kriterium der gør det muligt at skelne videnskab fra ikke-videnskab. Tværtimod mener Popper, at der ikke findes nogen særlig metode der kun anvendes indenfor naturvidenskaben.

I stedet for at antage at induktion er karakteristisk for videnskabelig teori-dannelse anvender Popper *falsificerbarhed*. Det er i reglen ganske ligetil at finde data der understøtter bogstavelig taget enhver teori; han mener at det nærmeste man videnskabeligt set kan komme en 'bekræftelse' er at efterprøve en ægte 'risky prediction', dvs udføre et eksperiment der meget vel kunne have haft et andet udfald, måske endda burde have haft det andet udfald, dersom teorien ikke havde været gyldig. Enhver ægte afprøvning af en videnskabelig teori er dermed et forsøg på at gendrive eller falsificere den, og et ægte modeksempel vil falsificere teorien som sådan. I kritisk forstand er Poppers sondring grundet i hans anerkendelse af den logiske asymmetri mellem verifikation og falsifikation; det er logisk umuligt at verificere et universelt udsagn ved henvisning til eksempler, men ét simpelt modeksempel er en endegyldig tilbagevisning af udsagnet. Med andre ord, undtagelsen bekræfter ikke reglen, men modbeviser den.

En ægte videnskabelig teori er iflg Popper *prohibitiv*, forstået således at den konkret udelukker bestemte udfald eller hændelser. Da teorier kan afprøves,

måske falsificeres, men aldrig logisk kan vises at være sande er teorien ikke eftervist, uanset at den måske har været afprøvet nok så grundigt eller gennem nok så lang tid. I stedet bør vi indskrænke os til at konstatere at den er blevet underbygget, og indtil videre må anses for at være den bedste af de forhåndenværende forklaringer; i hvert fald indtil den falsificeres og måske afløses af en bedre teori.

Popper sonderer klart mellem den formelle falsifikation og virkeliggørelsen heraf. Logikken er umådeligt simpel, et enkelt modbevis er tilstrækkeligt. I praksis er sagen noget mere kompliceret; enhver observation kan være fejlbehæftet, og dermed kan modbeviset være tvivlsomt. Så uanset at han betragter falsifikations-princippet som det der gør sondringen mulig anerkender Popper explicit, at i praksis er et enkelt modeksempel eller en tilsyneladende modstrid ikke nok at til falsificere en iøvrigt velunderbygget teori. Det er da også sådan at videnskabelige teorier ind imellem fastholdes, uanset at der findes modstridende eksperimentelle resultater, eller resultater der kun vanskeligt kan tolkes indenfor teorien. Det gør sig gerne gældende når de alternative forklaringer er endnu mindre tilfredsstillende.

Videnskabelige teorier opstår ad mange forskellige veje, og det der konkret førte en bestemt forsker frem til en bestemt teori kan være af bibliografisk interesse, men det spiller ingen rolle for så vidt angår videnskabsteorien. Popper understreger at der ikke er nogen bestemt vej eller metode (som fx induktion) der fører til videnskabelige teorier. Her er han i overensstemmelse med Einstein, der skriver "Der er ingen logisk vej til videnskabens universelle love. De kan kun nås gennem intuition, ofte grundet i noget der ligner intellektuel forelskelse i emne eller observation". Så fra Poppers synsvinkel begynder videnskaben med problemet snarere end med observationen; det er først når videnskabsmanden tumler med problemet at han observerer, og observationerne har da til formål at belyse hvorvidt en given forklaring kan bruges som løsning.

Benyttes sondringen som kriterium er fx fysik og kemi egentlige videnskaber, mens astrologi og frenologi er eksempler på ikke-videnskaber, i hvert fald så længe de ikke formuleres på en sådan måde at de ville kunne falsificeres.

Ordforklaring: en induktivt ræsonnement tager udgangspunkt i en observation (eller i et sæt af observationer), og søger frem mod en beskrivende teori; det bevæger sig fra det specifikke mod det generelle. Modsætningsvis går deduktive ræsonnementer ud fra den overordnede forklaring og søger at uddrage konkrete forudsigelser herfra; de går fra det generelle mod det specifikke. Det er som Popper fremhæver omstridt om den rene induktion

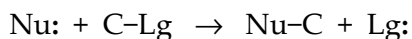
strengt taget er mulig (for andre end nyfødte), idet enhver observation nødvendigvis indrammes af betragterens forudgående viden.

Nukleofil alifatisk substitution

Mangeparameter situationer. Ved undersøgelse af visse molekulære egenskaber kan det være muligt at opsøge situationer hvor den pgl egenskab kan observeres uforstyrret, hvorved en eventuelt regelbundet opførsel kan konstateres, og en eventuel teori efterprøves. Involverer de undersøgte fænomener derimod at adskillige egenskaber ændrer sig samtidig kan det være problematisk at betragte enkelt-parametre for sig, og en systematisk beskrivelse vil da gerne have så mange forbehold og undtagelser at fx falsifikation ikke i praksis vil kunne lade sig gøre. Det vil således nok være muligt at formulere og afprøve regler for fx temperaturens indflydelse på konkrete forbindelsers damptryk, men ikke regler for de pågældende forbindelsers kemiske reaktioner. Disse vil afhænge af så mange forskellige forhold, at forløbet i bedste fald vil kunne forventes snarere end forudsiges.

For en del reaktionstyper er det dog muligt at beskrive et idealforløb så detaljeret, at en undersøgelse ved hjælp af popperske modstridskriterier lader sig gøre.

Nukleofil alifatisk substitution



Ved nukleofil substitution på alifatisk carbon sker i princippet blot to ting, en binding spaltes og en binding dannes. Denne enkle opdeling tillader en række forudsigelser:

Hvis C-Lg brydes først (og hvis denne proces er en heterolyse) får C undervejs udpræget carbokation-karakter, hvorefter følger en række forudsigelser: reaktionen vil forløbe bedst i sure, polære, ikke-nukleofile omgivelser; den vil forløbe lettest hvis carbonatomet har flere substituenten eller er i nabostilling til et umættet system; dersom C er chiralt vil reaktionen vil være ledsaget af racemisering; reaktionshastigheden vil kun afhænge af reaktantens koncentration. Beskrivelsen synes ikke at have særlige vanskeligheder; carbokationer er velkendte, Lg vil stabiliseres af de sure omgivelser (fremmer reaktionen) og Nu vil være deaktiveret (forsinker det efterfølgende angreb på C).

Dersom Nu-C skulle dannes først savnes først og fremmest en bindingsforklaring, da oktetreglen ikke umiddelbart tillader nukleofilt angreb på helt mættede forbindelser. Et sådant angreb er imidlertid muligt dersom lone pair på Nu kan vekselvirke med C-Lg bindingens sigma antibindende orbital (her er det ikke en nødvendig forudsætning at processen er heterolytisk). Herudfra kan en række forudsigelser opstilles: reaktionen vil ikke gerne

forløbe under sure omstændigheder; den vil forløbe bedst med primære substrater; den vil involvere inversion på carbon; reaktionshastigheden vil afhænge af koncentrationen af såvel substrat som nukleofil.

Dersom Nu-C dannes nogenlunde samtidig med at C-Lg brydes vil reaktionens opførsel være en mellemtung mellem idealformernes. De forhold der normalt vil have størst betydning er reaktionsbetingelserne og stabiliseringen af en eventuel carbokation, dvs graden af substitution og evt konjugation. Disse forhold er kendt i den konkrete situation, og det er derfor muligt at have velbegrundede forventninger mht hvilken idealform der vil bidrage mest til det konkrete reaktionsforløb.

Idealform	Mellemformer	Idealform
sur	vi vælger betingelser	ikke sur
C ⁺ stab	vi kender substrat	primær
racemisering		inversion
1. orden (S _N 1)		2. orden (S _N 2)

Idealformerne indebærer tydelige og afprøvelige forudsigelser. Beskrivelsen af de to er hver for sig konsistent, de er begge produktive, sammen har de betydelig bredde men er alligevel simple og tydelige, de hænger glimrende sammen med den øvrige organiske kemi, og hver for sig lader de sig falsificere. Beskrivelsen har været anvendt siden 1930'erne (Hughes og Ingold), og har vist sig så robust, at de modifikationer som de efterfølgende mange års undersøgelser har nødvendiggjort har kunnet indarbejdes uden alvorlige vanskeligheder.