

УДК 09.00.08

DOI: 10.18384/2310-7227-2021-3-84-92

## ГРАНИЦЫ ПОЗНАНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МЕТОДА (НА ПРИМЕРЕ КВАНТОВОЙ ХИМИИ)

**Чечеткина И. И.**

*Казанский национальный исследовательский технологический университет  
420015, г. Казань, ул. Карла Маркса, д. 68, Российская Федерация*

### **Аннотация**

**Цель.** Исследовать проблему математизации квантовой химии первой половины XX в.

**Процедура и методы.** Дан эпистемологический анализ понятия «операционализм», используемого в структурализме Н. Мулуда, означающего технику оперирования с символами и знаками с целью создания физико-математических моделей химической связи.

**Результаты.** Показаны возможности операционализма, способствующие развитию математического формализма квантовой химии, и его пределы в физической интерпретации химической связи в области теории и эксперимента. Раскрыты границы познания математического метода в квантовой химии.

**Теоретическая и/или практическая значимость.** Результаты исследования вносят вклад в эпистемологию и философию науки.

**Ключевые слова:** философия химии, структурализм, математизация химии, операционализм, квантовая химия

## THE LIMITS OF COGNITION OF THE MATHEMATICAL METHOD (ON THE EXAMPLE OF QUANTUM CHEMISTRY)

**I. Chechetkina**

*Kazan National Research Technological University  
68 Karla Marxa ul., Kazan 420015, Russian Federation*

### **Abstract**

**Aim.** Study the problem of mathematization of quantum chemistry.

**Methodology.** The epistemic analysis of the concept “operationalism” is given. The concept mentioned is used in N. Mulud’s structuralism as techniques of operating with symbols and signs to create physical and mathematical models of chemical bonding.

**Results.** The possibilities of operationalism contributing to the development of the mathematical formalism of quantum chemistry are shown. Its predictive capabilities and its limits in the physical interpretation of chemical bonding in the field of theory and experiment are given. The limits of cognition of the mathematical method in quantum chemistry are revealed.

**Research implications.** The research findings contribute to the epistemology and philosophy of science.

**Keywords:** philosophy of chemistry, structuralism, mathematization of chemistry, operationalism, quantum chemistry

### **Введение**

Основой математического метода является операционализм, позволяющий конструировать множество теоретических представлений о структуре объекта с помощью различных алгебраических средств. Поэтому операционализм может рассматриваться как

способ построения нового знания, ведущих к его дальнейшему росту, внутренней логике развития науки.

В истории химии операционализм противостоял квалитивистскому подходу и был связан с развитием количественных представлений и химической символики в структурных теориях XVIII и XIX вв. [13]. В начале XX в. в связи с продолжавшейся теоретизацией и математизацией химии операционализм получил своё дальнейшее развитие в квантовой химии, решавшей главную теоретическую проблему химии – выяснение природы химической связи. Математизация химии требовала внедрения в неё аксиоматических систем квантовой механики с определёнными операциональными средствами: функциями, матрицами, операторами, – которые задавали математическому объекту всё новые свойства и имели различные физические интерпретации в виде моделей химической связи. Эти модели для разных молекулярных структур плохо согласовывались с опытными данными, могли предсказывать и объяснять только некоторые физико-химические и геометрические свойства самых простых молекул, а само понятие химической связи оставалось неточным и неполным. Такое положение в теоретической химии сохраняется до сих пор, при этом каждая модель опирается на свои операциональные средства и имеет своих защитников и приверженцев.

Получается парадокс: развитие аксиоматических систем в физике с различными операциональными средствами приводит к созданию квантовой механики и её триумфу в области объяснений и предсказаний свойств микрочастиц [14], а создание квантовой химии ведёт к самым разнообразным представлениям о химической связи, которые плохо согласуются с экспериментом, и на сегодняшний день невозможно создать единую математически обоснованную теорию химической связи. Химия остаётся больше экспериментальной наукой, чем теоретической, позволяющей точно объяснять и предсказывать свойства молекул. Возникают следующие

вопросы: можно ли подчинить квантовую химию логическим и математическим правилам? Может ли квантовая химия стать точной наукой? Существуют ли границы математического метода в квантовой химии?

Чтобы ответить на эти вопросы, необходимо обратиться к ретроспективному анализу квантовой химии первой половины XX в. и выявить особенности математических формализмов, функции используемых в них операциональных средств, разработанных для различных моделей химической связи.

### **Особенности математических формализмов и функции операциональных средств в моделях химической связи**

Начало теоретических представлений о химической связи положено в работах В. Гайтлера и Ф. Лондона, сформулировавших основные понятия квантовой химии и методы расчёта волновых функций. Для этого они использовали математический формализм квантовой механики – волновое уравнение Шрёдингера для стационарного состояния, из которого дедуцировали математическое понятие химической связи (обменный интеграл). Они показали, что энергия связи сводится к вычислению обменного интеграла, физический смысл которого связывался с обменом электронами, принадлежащими разным атомам водорода.

Достоинством этого формализма было то, что он на вероятностной основе позволял описывать и предсказывать сложные микрофизические состояния, что было невозможным в другом формализме [5]. Это стало возможным из-за введения в квантовую химию математической теории операторов, которые осуществляли специальные математические действия над волновыми функциями, позволявшие вычислить физические характеристики частицы (координата, скорость, импульс, энергия) в любой момент времени, которые можно было получить при измерении. Следовательно, оператор определя-

ет систему априори, приписывая ей все свойства, и также контролирует область математических значений динамических величин, т. е. область физических реализаций. Так научное мышление идёт от возможного к действительному, от априори к апостериори.

Кроме того, операторы выполняют ещё и важную логическую функцию, состоящую в том, чтобы выполнить правила исполнения операций и установить последовательность их выполнения.

Однако в математический формализм для объяснения образования химической связи вводилась интуитивная гипотеза о синхронном перескоке электронов от одного атома к другому, что давало возможность В. Гайтлеру и Ф. Лондону интерпретировать квантовомеханическую теорию химической связи в молекуле водорода в рамках классической механики. Это вызывало сомнения, поскольку классическое понимание обмена противоречило принципу неразличимости электронов, в силу которого нельзя сказать, какой из них в данный момент времени принадлежит одному атому, а какой – другому [6].

Несмотря на эту некорректность, работы В. Гайтлера и Ф. Лондона были распространены на многоэлектронные атомы, и это привело к созданию метода валентных связей. Математический формализм для многоэлектронных систем разрабатывался в первой трети XX в. немецкими математиками (В. Гайтлер, Ю. Б. Румер, Г. Вейль, Б. Л. Ван дер Варден, Ф. Лондон, Дж. Слэтер, М. Борн) в Геттингенском университете. Они стали вводить в квантовую химию математическую теорию симметрии – теорию групп, которая давала надёжный метод исследования атомных и простых молекулярных систем при отсутствии разработанных для них приближенных методов расчёта.

В квантовую химию проникла теория групп перестановок, позволявшая строить правильные (с точки зрения принципа Паули) волновые функции системы. Математическая функция группы заключается в том, чтобы обеспечить инвариант-

ность свойств математического объекта в ходе преобразования его элементов, с которыми эти свойства соотносятся. Теория групп перестановок имеет операциональное значение: операции, производимые над дискретной совокупностью символов, состоят в изменении их порядка, при этом математический объект сохраняет свою целостность. На более высоком уровне рационализации группа проявляет формальные свойства, которые подчиняют их логическому ходу дедукции. Группа гарантирует логическую безупречность теории. Существование группы даёт также возможность создавать новые свойства объекта, исходя из свойств другого объекта, а может и осуществлять отбор этих свойств. В этом состоит преимущество теории групп по сравнению с другими операциональными средствами.

В квантовой механике с помощью определённого количества операций перестановок можно получить набор волновых функций либо со знаком плюс, либо со знаком минус, т. е. выявить у них новое свойство – симметрии или антисимметрии. Симметрия или антисимметрия волновой функции по координатам всех электронов является дополнительным требованием, отбирающим физические различные решения среди большого числа математически возможных решений уравнения Шрёдингера, которые потом соотносятся с экспериментом [1]. Сами же перестановки преобразуют каждую из волновых функций в их линейные комбинации и могут быть представлены в виде матриц размерности, которые исследуются с помощью теории групп.

В дальнейшем В. Гайтлер использовал теорию групп перестановок координат волновой функции для описания системы тождественных частиц. Для этого он использовал формализм теории возмущений, которая позволяла оценить взаимодействия между электронами в бесспиновых состояниях между атомами А и В до их сближения, что привело к вычислению среднего значения обменного интеграла и энергии диссоциации химической

связи. В математический формализм он вводил множество допущений, а также гипотезу спин-валентности о спаривании спинов электронов и согласно ей понимал валентность как число спиновых моментов, спаренных при образовании молекулы. Однако в рамки этого формализма не укладывались молекулы бора и кислорода, основное состояние которых является триплетным, а не синглетным, как у В. Гайтлера, в последнем случае химическая связь вообще не должна была образовываться. Работы В. Гайтлера конца 20-х гг. XX в. в области теории химической связи считаются сейчас «математическим курьёзом», поскольку «правильные (с точки зрения перестановочной симметрии, точнее, принципа Паули) координатные волновые функции получены не были, что и привело к переоценке роли спинowego спаривания» [6, с. 92]. Кроме того, теория валентности В. Гайтлера не выдерживала проверки фактами.

Квантовое видение молекул не имело успеха в химии в первой трети XX в. У химиков оно вызывало скептицизм. Они считали, что квантово-теоретический подход является слишком математизированным и не может решить фундаментальные проблемы химии, поскольку главное понятие химии – химическая связь – рассчитывалась с помощью сложных математических уравнений, не выдерживающих проверки фактами. Химики отклонили сведение химии к прикладной математике. А. М. Дирак предложил другой подход. Он считал, что математические законы и их физические интерпретации хорошо известны химикам, но сложность расчётов можно упростить, разработав приближённые практические методы квантовой механики для объяснения главных особенностей сложных атомных систем без слишком больших вычислений. Этому подходу последовал Л. Полинг, написав книгу «Природа химической связи».

Л. Полинг ввёл в математический формализм теории возмущений интуитивную гипотезу о гибридизации атомных орбиталей, и ему удалось построить волновые

функции гибридных орбиталей в самом общем виде. Такой расчёт был неточным, поскольку математический аппарат теории групп привлечён не был, но он давал возможность оценить некоторые геометрические характеристики молекул, в том числе их симметрию. Само же понятие химической связи в концепции гибридизации определено не было, и его физический смысл оставался неясным [8].

Л. Полинг писал о своей гипотезе гибридизации как о примирении между физиками, считавшими, что атом углерода имеет на внешней оболочке разные электроны – два s-электрона и два p-электрона – с разными орбиталями, и химиками, которые уверяли, что этого не может быть, так как углерод образует четыре одинаковые связи. Ему пришла мысль о том, что s- и p-орбитали могут перемешиваться так, что образуются четыре одинаковые связи, и их можно рассчитать с помощью простых алгебраических действий. Для этого нужно учесть зависимость электронных s- и p-орбиталей от направления в пространстве и сложить их так, чтобы гибридные орбитали приняли максимально вытянутую форму, что и характеризует образование химической связи между атомами [11, с. 94–95].

Однако операционалистский подход к разработке концепции гибридизации привёл её к математическим ограничениям и к искусственным логическим построениям в органической химии, например, химики стали использовать идею о «напряжённых связях», чтобы объяснить химические свойства веществ [3].

Тем не менее, химики приняли наглядность метода валентных связей, в котором молекула рассматривалась как совокупность атомов, соединённых двухцентровыми двухэлектронными связями, а валентный штрих означал спаривание двух электронов в поле двух ядер. Но это было иллюзией, поскольку описание, например, молекул комплексных соединений, соединений бора, и благородных газов в методе валентных связей оказалось впоследствии неверным. Количественные расчёты энер-

гии связей показали, что спаривание электронов не является обязательным условием образования химической связи.

Дальнейшее развитие квантовой химии связано с возникновением метода молекулярных орбиталей (Ф. Хунд и Р. С. Малликен). Это был полуэмпирический метод, который заключался в энергетическом описании молекул и не требовал сложного математического расчёта одноэлектронных волновых функций с помощью теории групп. Этот метод использовал идею В. Гайтлера о том, что атомные орбитали в молекуле сохраняют свою индивидуальность, и химическая связь определяется положением электронного облака в той части пространства, которая наиболее ближе к ядру.

В дальнейшем этот метод был перенесён на многоэлектронные системы, и главную роль здесь сыграли работы Д. Р. Хартри, Дж. А. Гоунта и В. А. Фока, разработавших метод самосогласованного поля (ССП). Это было наилучшим приближением метода возмущений. Д. Р. Хартри вводил в теорию возмущений квантовой механики допущения (одноэлектронное приближение и приближение центрально-симметричного поля), что позволяло ему свести задачу к одномерному уравнению, определяющему движение одного электрона в некулоновском поле, создаваемом ядром и всеми остальными электронами. Он предлагал уравнение на основании интуитивных соображений [12, с. 91], а для его решения был использован алгоритм метода итераций, что позволяло рассчитывать плотность заряда электрона на определённом расстоянии от ядра. Главным достижением было то, что метод Д. Р. Хартри давал возможность записи полной  $N$ -электронной волновой функции в виде простого произведения одноэлектронных волновых функций. Но, к сожалению, метод не учитывал антисимметричности волновых функций. Эта задача была решена Л. Дж. Слейтером с помощью математики. Он предложил способ записи волновых функций в виде определителя, позволившего воспроизвести антисимметричность

электронных функций с помощью теории групп. Так в квантовую химию вошли детерминанты (определители) Слейтера.

Операционалистский подход в методе Хартри-Фока (введение алгоритмов расчёта, способа записи волновой функции в виде определителя, решение уравнения Шрёдингера В. А. Фоком с помощью вариационного принципа) смог решить некоторые проблемы квантовой химии, введя новые математические понятия – антисимметричности и спина электрона. Операционализм, развитый в методе Хартри-Фока, давал отдельные неплохие результаты, позволяя рассчитать распределение электронной плотности в молекуле, оценить энергию атома или орбитальную энергию электрона. Тем не менее, проблема взаимодействия электронов и ядер, составляющих молекулу, остаётся по сей день не решённой до конца. Дело в том, что с помощью теории СПП можно рассчитать главную часть (около 99%) полной энергии молекулы. Но оставшуюся часть (~1%) энергии вычислить невозможно, поскольку это неизбежная ошибка метода СПП, возникающая из-за того, что точная волновая функция молекулы составляется из атомных орбиталей. И вся история квантовой химии представляет собой изнурительную борьбу за метод расчёта этой мифической энергии, чтобы компенсировать слабость теории СПП, считает А. Л. Бучаченко [2].

А. Л. Бучаченко говорит об ограниченности метода СПП в познании. Действительно, есть произвол математика в выборе орбиталей, их всегда можно подчинить дополнительным условиям, или ввести какие-либо допущения и получить частные случаи, например, сами уравнения Хартри-Фока так и получены. На наш взгляд, проблема ограничения метода СПП гораздо шире и, как будет показано дальше, связана со спецификой операционалистского подхода в теоретической химии.

Как показывает история квантовой химии, начиная от работ по химической связи для атома водорода В. Гайтлера и Ф. Лондона и заканчивая теорией мно-

гоэлектронных систем Д. Р. Хартри и В. А. Фока, математизация квантовой химии всегда была связана с внедрением в аксиоматические системы квантовой физики различных алгебраических средств и созданием математических моделей химической связи. Каждая модель была связана с выбранным формализмом и определёнными математическими средствами, выполняемыми логические и операциональные функции, которые, с одной стороны, вели к открытию новых областей науки и способствовали росту научного знания, а с другой – способствовали появлению различных противоречивых представлений о химической связи.

### Заключение

Операционализм имел и имеет в настоящее время ограниченный успех в химии по нескольким причинам.

Во-первых, аксиоматика, как любая всеобъемлющая система понятий, является логически несовершенной, потому что в каждой теории есть ряд предварительных допущений и интуитивных гипотез [15, р. 80–81], вводимых как средства решения сложной математической задачи и составляющих ошибку применяемого математического метода.

Ретроспективный взгляд на историю квантовой химии показывает, что в аксиоматические системы квантовой механики постоянно вторгались различные интуитивные гипотезы для определения понятия химической связи. Среди них нужно отметить гипотезу о синхронном перескоке электронов от одного атома к другому для трактовки химической связи, представленную в ранних работах В. Гайтлера и Ф. Лондона, гипотезу спин-валентности, существовавшую в более поздних работах В. Гайтлера, гипотезу гибридизации атомных орбиталей Л. Полинга, а также интуитивное построение уравнений для нахождения плотности заряда Д. Р. Хартри. Все эти гипотезы являются недоказуемым знанием, в основном они представляют собой «нематематизируемый остаток».

Но иногда они оказывают помощь науке, поскольку способствуют вводу новых допущений, подлежащих дальнейшей математизации, и позволяют вводить новые физические понятия как отображение математических средств (функций, групп, матриц и операторов). Кроме того, некоторые математические понятия (*молекулярная орбиталь* или *атомная орбиталь*, представляющие собой волновые функции на языке математики) стали со временем понятиями квантовой химии, приобретая физический смысл. Например, понятие атомной орбитали, означавшее одноэлектронную волновую функцию, стало означать пространство вокруг ядра, в котором наиболее вероятно нахождение электрона. Так математический язык способствовал развитию концептуального аппарата квантовой химии, несводимого к языку квантовой механики. В открытии новых понятий и состоит значение операционализма.

Эти интуитивные гипотезы играют в познании роль дополнительных «строительных лесов» в математических моделях химической связи. Главная роль в создании модели отводится, конечно, выбранному формализму. Однако введение интуитивных гипотез в аксиоматические системы квантовой механики приводило к различным модельным представлениям о химической связи. Так, в методе валентных связей с учётом гипотезы гибридизации химическая связь образована за счёт спаривания электронов в поле двух ядер, в методе молекулярных орбиталей (МО) электроны движутся в молекуле по орбиталам как целостности, сохраняя свою индивидуальность, что следует из гипотезы В. Гайтлера. В связи с этим понятие химической связи не является однозначным и строго определённым. Для того, чтобы определить химическую связь, нужно опереться на те или иные модельные представления, при этом каждая модель решает определённые частные задачи, и не может удовлетворить широкий круг химиков [7, с. 6–7].

Во-вторых, химическую реальность невозможно охватить с помощью системы аксиом и понятий, определений и законов

в виде схемы, которая является изоляцией и идеализацией группы химических связей с целью научного изучения, и эта схема может ей не соответствовать [4, с. 112]. Новые химические понятия (химическая связь, валентность) должны иметь своих референтов, быть верифицируемыми, и мы должны просить химика-экспериментатора проверить их. Например, выдающиеся химики Р. Б. Вудворд и А. Хоффман дают такую оценку методу МО: «последние 20 лет были отмечены плодотворным симбиозом органической химии и теории молекулярных орбиталей. По необходимости это был брачный союз плохой теории с хорошим экспериментом. Предварительные заключения появлялись на основе теорий, которые были такой мешаниной приближений, что они, по видимому, не имели права работать, тем не менее, в руках умных экспериментаторов эти идеи трансформировались в новые молекулы с необычными свойствами» [7, с. 25].

В-третьих, операционализм ограничен сложностью химического объекта, квантово-химический подход ограничен лишь простейшими молекулами, и получаемые при их помощи количественные результаты не являются надёжными и допускают общие качественные выводы, а расчёт сложных молекул ведётся с большими приближениями [10].

Подведя итог, можно отметить, что, несмотря на успехи квантовой химии первой половины XX в. в области электронного строения молекул [9], операционализм в квантовой химии всё же имеет свои пределы.

К ним относятся: 1) несовершенство формально-логического аппарата из-за наличия в нём различных гипотез и допущений, скрытых аналогий, которые не подлежат дальнейшей математизации, 2) невозможность проверки многих квантово-химических понятий с помощью эксперимента, а также 3) сложность химических объектов, и это обстоятельство и привело к развитию полуэмпирических методов, основанных на многочисленных приближениях.

Давая эпистемологическую оценку аксиоматическому методу с его операциональными средствами, пришедшему из квантовой физики в химию, отметим, что его успех в химии является достаточно скромным. С одной стороны, он открыл новые области применения в химии и предоставил для этого алгебраические средства, которые имеют значение и ныне: разработанные ранее формализмы с различными приближёнными операторами включаются сегодня в полуэмпирические методы расчёта молекулярных структур в сочетании с высокопроизводительными ЭВМ, но, с другой стороны, расчёты эти приближительные и не всегда соответствуют опытным данным, поэтому химия остаётся до сих пор экспериментальной наукой и опирается на своё главное богатство – классическую теорию строения, которая была выработана задолго до появления квантовой химии, и в этом смысле ей повезло [7, с. 971].

*Статья поступила в редакцию 21.06.2021.*

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Бете Г. Квантовая механика / под ред., пер. В. Л. Бонч-Бруевича. М.: Мир, 1965. 334 с.
2. Бучаченко А. Л. От квантовых струн до тайн мышления... Эскурс по самым завораживающим вопросам физики, химии, биологии, математики. М.: URSS, 2017. 188 с.
3. Быков Г. В. История электронных теорий органической химии. М.: Изд-во АН СССР, 1963. 422 с.
4. Гейзенберг В. Физика и философия / пер. с нем. И. А. Акчурина, Э. П. Андреева. М.: Наука, 1989. 132 с.
5. Грэхем Л. Естествознание, философия и науки о человеческом поведении в Советском Союзе / пер. М. Д. Ахундова. М.: Политиздат, 1991. 480 с.
6. Дмитриев И. С., Семенов С. Б. Квантовая химия – её прошлое и настоящее. Развитие электронных представлений о природе химической связи. М.: Атомиздат, 1980. 160 с.
7. Зоркий П. М. Критический взгляд на основные понятия химии // Российский химический журнал. 1993. Т. XL. № 3. С. 5–25.

8. Зоркий П. М. Лайнус Полинг – величайший химик XX столетия (к 100-летию со дня рождения) // Кристаллография. 2001. Т. 46. № 6. С. 967–971.
9. Квантовая химия – перспективы и достижения / Г. Ю. Колчина, Н. Ч. Мовсумзаде, А. Ю. Бахтина, Э. М. Мовсумзаде // Нефтегазохимия. 2016. № 1. С. 51–60.
10. Курашов В. И. История и философия химии: учебное пособие. 2-е изд., испр. М.: Университет, 2018. 434 с.
11. Полинг Л. Химики – это те, кто на самом деле понимают мир // Химия и жизнь. 1976. № 2. С. 92–97.
12. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир, 2001. 519 с.
13. Четчикова И. И. Операционализм в науке: истоки, возможности и пределы // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Философские науки. 2017. № 3. С. 100–111.
14. Четчикова И. И. Развитие аксиоматических систем в квантовой механике // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Философские науки. 2018. № 1. С. 140–151.
15. Bunge M. Method, Model and Matter International // Journal of Theoretical Physics. 1968. Vol. 1. P. 202–215.

#### REFERENCES

1. Bethe H. Quantum Mechanics (Rus. ed. Bonch-Bruevich V. L., ed., transl. *Kvantovaya mekhanika*. Moscow, Mir Publ., 1965. 334 p.).
2. Buchachenko A. L. *Ot kvantovyh strun do tain myshleniya...: Ekskurs po samym zavorazhivayushchim voprosam fiziki, himii, biologii, matematiki* [From Quantum Strings to the Mystery of Mind...: A Guide of the Most Mesmerizing Questions of Physics, Chemistry, Biology, Mathematics]. Moscow, URSS Publ., 2017. 188 p.
3. Bykov G. V. *Istoriya elektronnyh teorii organicheskoi himii* [History of Electronic Theories in Organic Chemistry]. Moscow, AS USSR Publ., 1963. 422 p.
4. Heisenberg W. Physik und Philosophie (Rus. ed.: Akchurin I. A., Andreev E. P., transl. *Fizika i filosofiya*. Moscow, Nauka, 1989. 132 p.).
5. Graham L. Science, Philosophy, and Human Behavior in the Soviet Union (Rus. ed. Ahundov M. D., transl. *Estestvoznaniye, filosofiya i nauki o chelovecheskom povedenii v Sovetskom Soyuze*. Moscow, Politizdat Publ., 1991. 480 p.).
6. Dmitriev I. S., Semenov S. B. *Kvantovaya himiya – ee proshloe i nastoyashchee. Razvitie elektronnyh predstavlenii o prirode himicheskoi svyazi* [Quantum Chemistry. Its Past and Present. Development of Electronic Concepts of the Nature of Chemical Bonds]. Moscow, Atomizdat Publ., 1980. 160 p.
7. Zorky P. M. [Critical Review on Main Chemical Terminology]. In: *Rossiiskii himicheskii zhurnal* [Russian Chemical Bulletin], 1993, vol. XL, no. 3, pp. 5–25.
8. Zorky P. M. [Linus Pauling – The Greatest Chemist of the 20<sup>th</sup> Century (On the 100<sup>th</sup> Anniversary since Birth)]. In: *Kristallografiya* [Crystallography], 2001, vol. 46, no. 6, pp. 967–971.
9. Kolchina G. Yu., Movsumzade N. Ch., Bahtina A. Yu., Movsumzade E. M. [Quantum Chemistry – Perspectives and Achievements]. In: *Neftegazohimiya* [Petroleum Chemistry], 2016, no. 1, pp. 51–60.
10. Kurashov V. I. *Istoriya i filosofiya himii* [History and Philosophy of Chemistry]. Moscow, Universitet Publ., 2018. 434 p.
11. Pauling L. [Chemists are Those Who Understand the World]. In: *Himiya i zhizn'* [Chemistry and Life], 1976, no. 2, pp. 92–97.
12. Stepanov N. F. *Kvantovaya mekhanika i kvantovaya himiya* [Quantum Mechanics and Quantum Chemistry]. Moscow, Mir Publ., 2001. 519 p.
13. Chechetkina I. I. [Operationalism in Science: Origin, Capacities and Limits (Examples from the History of Physics and Chemistry)]. In: *Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo oblastnogo universiteta. Seriya: Filosofskie nauki* [Bulletin of Moscow Region State University. Series: Philosophy], 2017, no. 3, pp. 100–111.
14. Chechetkina I. I. [The Development of Axiomatic Systems in Quantum Mechanics]. In: *Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo oblastnogo universiteta. Seriya: Filosofskie nauki* [Bulletin of Moscow Region State University. Series: Philosophy], 2018, no. 1, pp. 140–151.
15. Bunge M. Method, Model and Matter International. In: *Journal of Theoretical Physics*, 1968, vol. 1, pp. 202–215.



**ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРЕ**

Чечеткина Ирина Игоревна – кандидат химических наук, доцент, доцент кафедры философии и истории науки Казанского национального исследовательского технологического университета;  
e-mail: iralena@mail.ru

**INFORMATION ABOUT THE AUTHOR**

*Irina I. Chechetkina* – Cand. Sci. (Chemistry), Assoc. Prof., Department of Philosophy and History of Science, Kazan National Research Technological University,  
e-mail: iralena@mail.ru

**ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ**

Чечеткина И. И. Границы познания математического метода (на примере квантовой химии) // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Философские науки. 2021. № 3. С. 84–92.

DOI: 10.18384/2310-7227-2021-3-84-92

**FOR CITATION**

Chechetkina I. I. The Limits of Cognition of the Mathematical Method (On the Example of Quantum Chemistry). In: *Bulletin of Moscow Region State University. Series: Philosophy*, 2021, no. 3, pp. 84–92.

DOI: 10.18384/2310-7227-2021-3-84-92