

JAKÝ JE DALŠÍ OSUD PUBLIKOVANÉ VĚDECKÉ PRÁCE?*

OTTO EXNER

Ústav organické chemie a biochemie, Akademie věd České republiky, Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha 6

Došlo dne 6.XII.2000

Klíčová slova: citační analýza, falzifikace, oximy, hydroximoyl chloridy, dipólové momenty, izokinetický vztah, rezonance, iodosochloridy

Habent sua fata libelli. Ale nejen knihy, i publikované vědecké práce mají svou historii, která počíná krátce před jejich publikací a pro většinu z nich dosud neskončila a hned tak neskončí. Některé publikace se zviditelní v tom negativním smyslu, jako nedávný případ studené fúze; ty ostatní zůstanou spíše nepovšimnuty nebo získají mírný ohlas. Málokterý pracovník najde čas, aby se informoval o odezvě svých publikací či vůbec o dalším vývoji problémů, kterými se již přestal zabývat. Uvedu-li zde několik případů ze své praxe, nemá to být výrazem vypjatého egocentrismu. Myslím, že nikdo nemůže být do té míry informován o jiných pracích než o svých vlastních, kromě toho takové zpracování vyžaduje jistý časový odstup. Několikrát jsem si pomyslel, že by bylo zajímavé, kdyby některý starší vědecký pracovník – dosti starý, aby si to mohl dovolit – referoval o svých minulých omylech. Referát jenom o omylech by ovšem působil depresivně, zmíním se proto o různých osudech, kterých se může publikovaná vědecká práce dočkat. Začneme přece jenom tím nejhorším.

Omyly a jejich oprava

Alkylací oximů *I* vznikají obecně dva izomerní deriváty *O*-alkyloxim *II* a *N*-alkyloxim (iminoxid) *III*. Zabýval jsem se po nějakou dobu určením jejich struktury i přípravou chybějících derivátů jinými cestami¹. Acylace oximů oproti tomu vedla vždy jen k jedinému produktu, pro který jsem prokázal² navzdory některým opačným tvrzením strukturu *O*-acyloximu *IV*. Určení struktury by bylo ovšem přesvědčivější, kdyby se podařilo připravit alespoň jeden *N*-acyloxim *V*, ale pokusy o syntézu, i jinými cestami než z oximu, byly neúspěšné³. Hledaný derivát *V* se choval jako silné acylační činidlo a přenesl acyl na některou jinou molekulu; neměl-li jinou možnost, přesmykl se na *IV*.

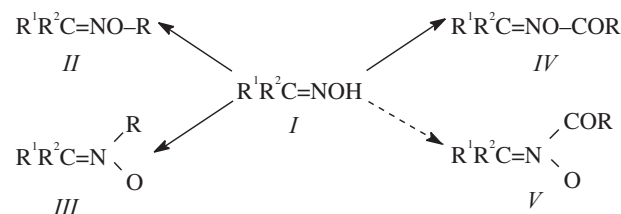
Uvažoval jsem, zda by se dal izolovat alespoň *N*-(benzensulfonyl)oxim. Produktu kondenzace anisaldehydu (*VI*) s kyselínou benzensulfohydroxamovou (*VII*) přisoudili Oddo a De-

leo⁴ strukturu *VIII* (tautomerní vzorec amidu), která se zdá zřejmě nesprávná. Domníval jsem se, že by to mohl být hledaný *N*-benzensulfonyloxim *IX*. Při reprodukci uvedeného pokusu však vznikla látka o molekulu vody bohatší, které jsem tentativně přisoudil⁵ strukturu *X*, hlavně na základě IR spektra. Tato struktura byla ovšem také značně nepravděpodobná, a látku jsem proto považoval za nestálou. Například při pokusech o dehydrataci byl získán jen anisnitril. Moji práci opravili poměrně záhy Zinner se spolupracovníky⁶: struktura soli benzensulfonové kyseliny *XI* je v soulahu se všemi pozorovanými fakty a byla potvrzena syntézou. Hlavní rozdíl v přístupu byl, že tito autoři nepokládali látku za nestálou, a povšimli si tedy její rozpustnosti ve vodě. Určitou útěchou může být, že základní představa o *N*-acyloximech *V* byla později potvrzena. Tyto deriváty nebyly nikdy izolovány a vždy podlehly reakcím, při nichž se chovaly jako acylační činidla⁷.

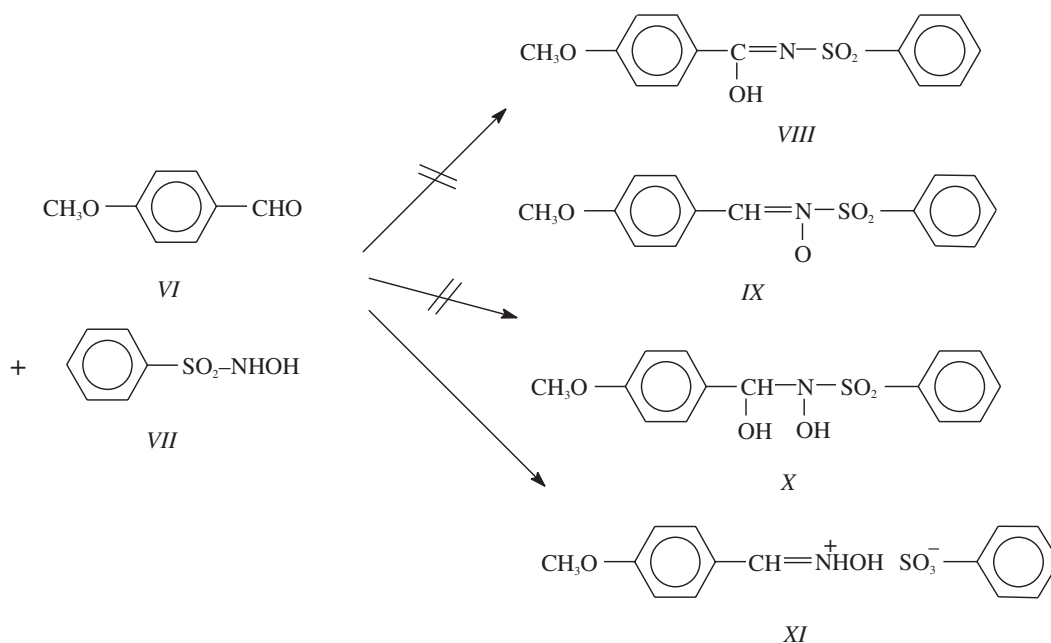
Popsaná událost je jistě pro autora nepřijemná a navozuje několik otázek. Jak mohl takový omyl vzniknout? Co se má dělat, když již vznikl? Jak se vyvarovat podobných omylů v budoucnosti? Na tyto otázky nemohu jednoznačně odpovědět, ale pokusím se je alespoň postupně komentovat. Nejde přitom jen o hledisko chemie, ale problém se dotýká mimo jiné i filozofie přírodních věd, etiky, psychologie a scientometrie.

Vznik omylu má samozřejmě příčiny jednak věcné, v našem případě chemické, jednak psychologické. Každý se nerad vzdává své představy nebo teorie, spíše se snaží uvést s ní nová fakta do souladu. K tomu přistupuje určitá situace společenská, ekonomická i politická. Koncem padesátých let jsem právě musil vynuceně změnit pracoviště a snažil jsem se dokončit některé problémy, jak to bylo možné za nových podmínek. To samozřejmě nemůže být omluva; ten, kdo čte publikaci řadu let starou, neví nic o okolnostech jejího vzniku a ani nechce vědět. Pokud jde o vlastní chemický problém, bylo určování struktury z fyzikálních vlastností v roce 1962 ještě v počátcích, o málo let později by již byla situace daleko příznivější. Podobné omyly se dnes nemohou opakovat, pokud jde o struktury stabilních látek (pokročilá NMR spektroskopie, rutinní rentgenová strukturní analýza). Mohly by se snad ještě vyskytnout u nestálých meziproductů, látek neizolovaných, charakterizovaných jen některými spektry a podobně, ne u produktů standardních syntéz.

Z filozofie přírodní vědy je třeba se zmínit alespoň o přínosu nejvýznamnějších filozofů tohoto století K. R. Poppera



* Předneseno zčásti na Vědecké konferenci Fakulty chemické technologie v rámci oslav 50 let vysokého školství v Pardubicích, Pardubice 26.–27.9.2000



a T. S. Kuhna. Bylo o něm referováno i v chemickém časopise⁸. V kritickém racionalismu Popperově se označuje vyvrácení teorie nepřilíš šťastně jako její falzifikace. Jediný fakt v rozporu s teorií stačí k její falzifikaci, zatímco deset faktů ve shodě nestačí k její verifikaci. To nakonec všichni přírodovědci vědí, bylo to například velmi dobře známo mému učiteli Rudolfovi Lukešovi, a to jak v teorii, tak v praxi. Nový pohled Popperův je v tom, že na falzifikaci teorie myslí jaksí od samého počátku. Požaduje, aby každá teorie byla v principu falzifikovatelná; od začátku musí být zřejmé, jakým pozorovaným faktem by mohla být vyvrácena. Teorie, které tomuto požadavku nevyhovují, nejsou vědecké a patří třeba do oblasti náboženství nebo umění. Falzifikovanou teorii pokouší se často její autor ještě imunizovat, to znamená, že ji formuluje přesněji, popřípadě omezí její platnost. Nemusí jít přitom o projev ješitnosti, mnohé teorie se tímto způsobem vyvinuly. Jak falzifikace, tak imunizace nejsou tedy v tomto pojetí nic odsouzeného, patří do normálního běhu světa.

Kuhn jde dále v tom, že se zabývá také vědou jakožto společenskou činností a lidmi, kteří ji tvoří. Označuje pak slovem paradigma soubor vědomostí v nějakém oboru společně s návody, jak další vědomosti získávat. Paradigma tedy definuje zcela kategoricky, které způsoby získávání nových poznatků jsou přípustné, a které nejsou. Může se pak stát, že jednotlivá tvrzení se dají v rámci daného paradigmatu obtížně falzifikovat. Nesouhlasné nálezy se považují za nepřípustné nebo alespoň nedůležité, teprve když se jich nahromadí určitý počet, nahradí se celé paradigma jiným (Newtonova a Einsteiнова fyzika). Zkušenost ukázala častokrát, že ani rozhodující experiment nevede k všeobecnému uznání nového paradigmatu, obhájci starých názorů na nich setrvávají až do příchodu nové generace. V chemii je tak znám například spor van't Hoff versus Kolbe.

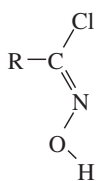
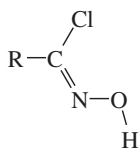
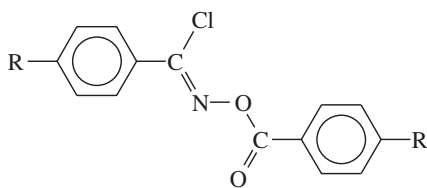
Poučení pro přírodní vědy je zcela zřejmé. Je třeba striktně oddělit fakta a teorie. Fakta by měla zůstat nepopiratelná, mohla by se nejvýše zpřesňovat. Teorie pak budou klidně čekat na svou falzifikaci, popřípadě na nahrazení celého para-

digmatu jiným. Vrátime-li se k našemu případu, pak problém byl v pojmu struktura. Před čtyřiceti lety mohla být struktura organické molekuly ještě považována za teorii, která může být falzifikována, dnes se přesunula do oblasti faktů a může být u běžných látek považována za definitivní. Moje práce přišla právě do předělu těchto epoch.

V současné době velice aktuální je také pohled scientometrie. Tato vědní disciplína se sice zabývá vším, co se dá kvantitativně zjistit při provozování vědy, ale v poslední době nabyla obzvláštního významu její součástí zvaná citační analýza. Ta počítá počet citací na jednotlivou práci či na práce jednoho autora, ústavu nebo celého státu, a to za jednotlivé roky, v jednotlivých časopisech a podobně. V těchto datech hledá pak různé souvislosti. Předmětem současné diskuse, vedené značně neobjektivně, je hlavně otázka, zda může být počet citací měřítkem hodnoty vědecké práce nebo přímo vědecké kvalifikace autora. Je to asi stejně smysluplná otázka, jako zda je počet diváků měřítkem umělecké hodnoty filmu nebo obrazu. Diskutující zastávají hlediska často podle toho, zda jsou jejich vlastní práce podle jejich názoru dostatečně citovány nebo ne. O hlavních problémech byl referováno i v Chemických listech⁹, obšírná diskuse proběhla v časopise Vesmír¹⁰. Pro problémy tohoto článku je rozhodující zjištění, že z hlediska scientometrie jsou všechny citace stejně cenné. Nezáleží na tom, zda je naše práce falzifikována, zesměšněna, nebo naopak pochválena, rozvíjena, nebo jenom zmíněna – jen když je citována. Ortodoxní scientometristé míní, že chybná práce bude falzifikována jednou či dvakrát, dobrá práce bude zmíněna mnohokrát. Samozřejmě to nemusí být pravda. Nedávná aféra se studenou fúzí vynesla mnoho citací autorům pochybené práce a přispěla významně k vysokému hodnocení časopisu Nature. Na druhé straně existují významné metody, které byly citovány jen po krátkou dobu po svém vzniku a dnes se již považují za tak běžné, že se uvádějí bez jakékoli citace.

Uvedu ještě jeden příklad falzifikované práce, na prvý pohled jednodušší. Zatímco mnohé deriváty s dvojnou vazbou C=N jsou známy ve dvou stereoizomerech, u hydroximchlo-

ridů se izolace druhého izomeru nikdy nezdařila. Konfigurace známých izomerů byla řešena dvěma skupinami autorů stejnou metodou, pomocí dipólových momentů v roztoku, ale s opačným výsledkem. My jsme preferovali¹¹ *E*-konfiguraci *XII*, Lumbroso¹² *Z*-konfiguraci *XIII*. Ačkoli pokusy byly opakovány a rozšířeny, obě strany setrvaly na svém. Rozhodnutí přinesla rentgenová strukturní analýza 4-nitrobenzhydroximoylchloridu¹³, který má v krystalickém stavu konfiguraci *Z* (*XIII*). Protože apriorní pravděpodobnost správného určení je 50 %, zdá se omyl méně pravděpodobný, a snad i nepříjemnější než v předešlém případě. Naše zásadní chyba byla, že jsme se příliš soustředili na Lumbrosovy argumenty, hledali v nich a také našli závažné omyly. Z toho ovšem ještě nevyplývá, že by jím určená konfigurace musila být chybná. Tento způsob argumentace je velmi zavádějící. V českém národě je dobře znám ze slavného sporu o Rukopisy; ve vášnivé diskusi se hledala každá chyba v protivníkových vývodech a samotné Rukopisy byly prakticky zapomenuty. Přesto je obtížné se tohoto omylu vyvarovat. Protože v našem případě jsou jen dvě možnosti, může se stát poměrně snadno, že nesprávná argumentace vede ke správnému výsledku. Zaváděly nás také předcházející úspěchy, přiřazení konfigurace jiným derivátům hydroxamových kyselin, potvrzené později rentgenovou strukturní analýzou¹⁴. Základní problém je přesto v tom, že dipólové momenty nejsou vhodnou metodou pro řešení konfigurace oximů a hydroxamových derivátů. Z hlediska této metody je rozdíl mezi strukturami *XII* a *XIII* jen v poloze vazby N–O, která má sama velmi malý vazebný moment; kromě toho je výsledný moment ovlivňován *n*- π interakcí. Určení tedy bude vždy nespolehlivé při sebelepší analýze. V mnohem pozdější práci¹⁵ jsme celý problém obrátili: Je-li konfigurace bezpečně známa, je možné vyhodnotit kvantitativně *n*- π interakci. V tomto případě mají dipólové momenty nenahraditelný význam.

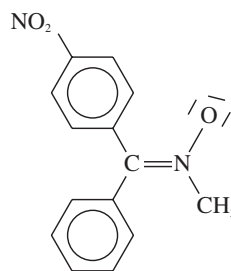
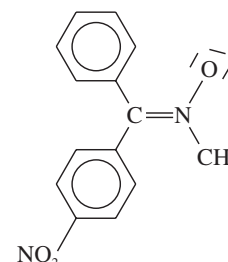
*XII**XIII**XIV*

Z tohoto neúspěšného sporu se nám podařilo nakonec vyjít poměrně se ctí. Provedli jsme IR a NMR spektrální studii¹⁶ a dokázali přinejmenším, že konfigurace *XIII* je stejná v roztoku jako v krystalickém stavu. Analyzovali jsme znovu dipólové momenty, také alifatických hydroximoylchloridů¹⁶. Nakonec jsme přenesli problém na složitější deriváty, *O*-benzoylhydroximoylchloridy¹⁷ *XIV*. U jejich molekuly jde kromě

konfigurace na vazbě C=N ještě o konformace na dvou jednoduchých vazbách, přesto se podařilo jednoznačně určit konformaci znázorněnou ve vzorci *XIV*. Zásadní výhodou je přítomnost možnosti zavést substituenty z obou stran (R ve vzorci *XIV*). Není to zcela ojedinělý případ, že složitější problém se vyřeší snáz než jednoduchý.

Zásadní chybou, a nejen naší, ale i konkurentů, bylo tedy použití nevhodné metody. Měli jsme tehdy s Ing. V. Jehličkou vypracovanou metodu měření dipólových momentů v roztoku a smyslem našich prací z té doby bylo prokázat její opomíjené možnosti pro různé strukturní otázky. V daném případě jsme však měli řešit problém, a ne propagovat metodu. Ptáme se ještě, může-li se podobná chyba v budoucnosti opakovat. V užším smyslu patrně ne, jde-li o konfiguraci na dvojných vazbách C=N. Rentgenová strukturní analýza je jednoznačná, přesmyky v roztoku jsou velmi vzácné; také podrobná NMR spektroskopie postačí k řešení sama o sobě. V širším smyslu, to jest volba nevhodné metody, je nebezpečí stále aktuální. V mnoha laboratořích mají k dispozici jedinou metodu a při volbě problému vycházejí ve skutečnosti z této metody.

Z historického hlediska mají dipólové momenty a konfigurace na vazbě C=N zvláštní souvislost. Nejen my, ale i jiní autoři se neprávem domnívali, že metoda je k tomuto účelu zvláště vhodná. Domnívám se, že historickou úlohu sehrála práce Suttona a Taylora¹⁸, určení konfigurace stereoizomerních imin-N-oxidů *XV* a *XVI*. Rozdíl dipólových momentů, 6,60 D pro *XV* a 1,09 D pro *XVI*, je dramatický a interpretace evidentní i bez podrobnější analýzy. Příklad stojí za zaznamenání jako vzorná volba správné metody pro daný úkol. Pravděpodobně se také jedná o vůbec první řešení aktuálního strukturního problému pouze na základě fyzikální metody.

*XV**XVI*

Práce veřejností akceptované

Práce o vztahu entalpie a entropie (izokineticém vztahu) se mohou jevit jako úspěšné. Pozoruhodné na tomto vztahu je, že byl mnohokrát nezávisle objeven, a vždy přítom šlo o omyl. Podstata problému je v matematické statistice, byla vícekrát podrobně probrána v referátech^{19,20}, a to i v Chemických listech²¹. V nejběžnějším případě se experimentálně určuje reakční rychlost při různých teplotách a $\log k$ se vynáší proti reciproké teplotě v Arrheniově grafu. Ze směrnice přímky se určí aktivační enthalpie ΔH^\ddagger a z úseku na ose aktivační entropie ΔS^\ddagger . Vynesou-li se ΔH^\ddagger a ΔS^\ddagger pro různé reakce proti sobě, dostane se lineární izokineticý vztah. Chyba je v tom, že ΔH^\ddagger a ΔS^\ddagger byly statisticky odhadovány jako nezávislé veličiny pro každou jednotlivou reakci zvlášť, nesmí se tedy dodatečně

mezi nimi hledat závislost. Je-li na takovou závislost podezření, je třeba zvolit nový model, který závislost od počátku předpokládá (Arrheniovy přímky se protínají v jednom bodě), a odhadovat parametry v tomto modelu. To může připadat jako statistická jemnost, ale mnoho autorů bylo překvapeno, jak velká chyba může vzniknout. Výsledek se nejlépe znázorní graficky, jak bylo ukázáno na mnoha příkladech^{19–21}. Použije-li se správná statistická metoda, zjistí se mnoho případů, kdy izokinetický vztah platí, i takových, kdy neplatí. Nejčastěji platí, ale jeho směrnice je zcela jiná, než směrnice nalezená nesprávným postupem.

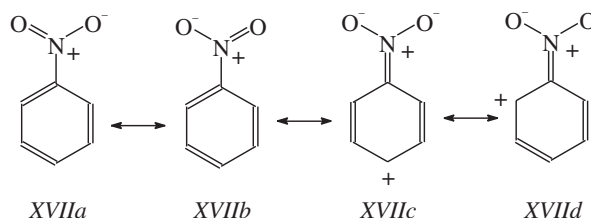
Moje první práce²² poukazující na nesprávné metody byla citována více než 400x, matematické řešení²³ více než stokrát, celý soubor více než tisíckrát. Po scientometrické stránce byl tedy ohlas příznivý. Práce nebyly nikdy falzifikovány, konkurenti pouze navrhovali jiné, méně účinné, ale původní výpočetní metody^{20,24}. Přesto nemohu být zcela spokojen. Mnozí citující autoři pracovali dále chybným postupem, jenom učinili zmínku, že byl zpochybněn. Jiní uvedli citaci bez komentáře a setrvali při chybném postupu. Největší počet autorů však stále nevzal žádné problémy na vědomí, přestože na ně upozorňovalo kromě mne ještě několik dalších autorů. Takové práce, zcela chybné, se objevují i v současné době v předních světových časopisech^{25,26}. Zkoumali jsme citační historii²⁷ (počet citací v jednotlivých letech) prací mých ve srovnání s významnou starší prací Lefflerovou²⁸. V té jsou shrnuty četné případy izokinetického vztahu, zpracované chybným postupem, a téměř všechny jsou v rozporu se skutečností. Ukázalo se, že citační historie neprobíhala tak, jak obecně předpokládají scientometristé: rychlý vzestup, brzké maximum a o něco pomalejší pokles. Naopak, práce jednou zviditelněně setrvávají na pořadu dlouhou dobu, ani jejich jasná falzifikace na tom nemůže nic změnit. Autoři, kteří citují zpochybněnou práci, by měli citovat (ale necitují) i toto zpochybnění, ať již mají sami jakýkoli názor. Citují-li práci, která tvrdí, že metoda mnou užitá je nesmysl, měl bych se buď podle toho řídit, nebo prohlásit jasně, že tomu nevěřím a proč. Celkově jsem dospěl k názoru, že mnozí autoři prostě opisují citaci a citovanou práci ani neviděli. Svědčí o tom i chyby v číselných údajích stránek a ročníků, které se přenáší z jedné práce do druhé, dále například citace na předběžná sdělení, když plně znění je již dvacet let na světě, a jiné příznaky.

Dlouhodobý spor

Koncem padesátých let, kdy byla teorie rezonance v plném rozkvětu, pokusil se Taft o její kvantitativní vyjádření pomocí stupnice konstant σ_p . Číselné hodnoty, podané například v pozdějším autoreferátu²⁹, byly získány většinou z *para*-derivátů benzenu odečtením induktivního efektu vyjádřeného konstantou σ_I . U akceptorních substituentů bylo přitom nápadné, že σ_R jsou skoro stejně veliké, a vždy podstatně menší než σ_I . Zvláště důležitým substituentem byla přitom nitroskupina se $\sigma_I = 0,67$ a $\sigma_R = 0,15$. Jednoduchý fakt, který tuto situaci ilustruje, je silnější kyselost kyseliny 4-nitrobenzoové než 3-nitrobenzoové: u obou se předpokládá stejný induktivní efekt a u 4-nitrobenzoové kyseliny navíc efekt rezonanční. (Podle novějších měření je rozdíl menší, než se myslelo: pK 3,42 a 3,47.) Při revizi celé teorie³⁰ jsem došel k závěru, že induktivní efekt je o něco silnější v poloze *para* a rezonance

nitroskupiny a mnohých dalších akceptorů prakticky nulová. Základní předpoklad byl, že některé substituenty (například CH_2Cl) mají pouze induktivní efekt. Práce vzbudila ve své době dosti značný ohlas. Diskutující patřili k předním odborníkům té doby a vesměs se mnou nesouhlasili^{29,31–35}, a to z různých, většinou principiálních důvodů. Zájem později o něco poklesl, nicméně práce³⁰ byla citována více než 200x; kromě nesouhlasu byla vyslovována i podpora a konsenzu nebylo dosaženo.

Teorie takového rozsahu může být jen se značnou nadsázkou zařazena do Kuhnova pojmu paradigma. Spor se však vyvíjel dosti podobně jako historické případy většího významu. Nejprve Taftova skupina uznala³⁶, že alespoň v některých případech může být σ_R akceptorů rovno nule, necitovali však moji práci³⁰, kterou předtím tak vehementně popírali²⁹, ale předstírali, že k tomuto objevu došli sami. Nulové konstanty σ_R se objevují při interpretaci acidobazických vlastností v plynné fázi³⁷, ale později opět nejsou v souhrnném referátu³⁸. Závěr je tragický jako všechny závěry v historii. Robert W. Taft zemřel v roce 1996 a zanechal významné dílo, které spory o jednotlivosti nemohou nikterak zmenšit. Většina recentních citací (např.³⁹) na moji práci³⁰ nezaujímá jasné stanovisko.

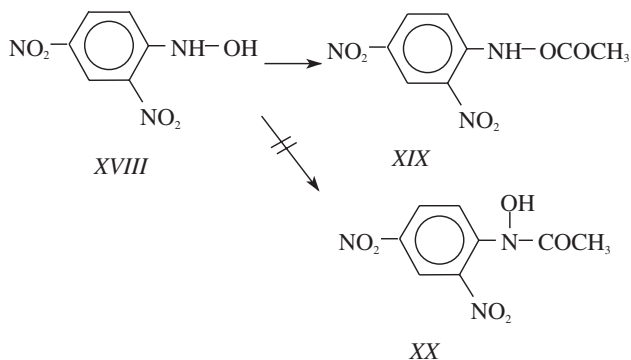


V současné době ztrácí teorie rezonance na popularitě a zaujímá v učebnicích menší místo. Přesně řečeno, nejde o skutečnou teorii, ale spíše jen o způsob psaní vzorců, který poněkud vylepšuje běžné strukturální vzorce, nevyhovující pro některé struktury. Například rezonance $\text{XVIIa} \leftrightarrow \text{XVIIb}$ vyjadřuje složitým způsobem prostou skutečnost, že obě vazby N–O jsou stejné. Náš problém je však možné formulovat poměrně exaktně v soudobých pojmech. Soustředíme-li pozornost na nitroskupinu, jako nejvýznamnějšího představitele, je rezonance v nitrobenzenu vyjádřena vzorci XVIIc, d . Otázka pak není, zda rezonance existuje nebo ne, ale zda tyto vzorce vyjadřují nějakou pozorovatelnou skutečnost v rámci dosažitelné přesnosti. Shromáždili jsme dostupné údaje⁴⁰ s rezultátem, že v současné době nikoliv. Zvláště významné bylo Krygowského zjištění, že vazba C–N nejeví charakter parciálně dvojně vazby: rozložení elektronové hustoty kolem ní má rotační symetrii. Větší induktivní efekt v poloze *para* než *meta* byl v poslední době potvrzen na acidobazických rovnováhách v plynné fázi⁴¹, v níž jsou substituční efekty podstatně větší než v roztoku.

Práce zneuznané nebo okopírované

Téměř před osmdesáti lety připravil Borsche⁴² acetylaci *N*-(2,4-dinitrofenyl)hydroxylaminu (XVIII) látku, které přisoudil strukturu XIX . Spokojil se přitom se zjištěním, že se látka barví v alkalickém roztoku červeně. Pozdější evidence

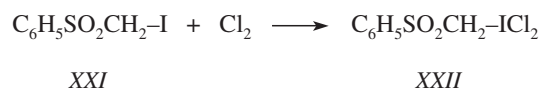
ukázala, že se hydroxylamin sám i jeho *N*-alkylderiváty acylují přednostně na dusíku. Výjimkou jsou deriváty s alkylem velmi objemným nebo silně elektrony přitahujícím. To je právě příklad *N*-(2,4-dinitrofenyl)hydroxylaminu, u něhož vliv substituentů oslabuje bazicitu hydroxylaminového dusíku. Přes možné pochybnosti napsal tedy Borsche⁴² vzorec správně. Určili jsme strukturu *XIX* současně s dalšími acylderiváty hydroxylaminu na základě infračervené frekvence karbonylové skupiny pomocí široce platné empirické rovnice⁴³. Vypočtené frekvence byly 1799 cm⁻¹ pro *XIX* a asi 1703 (±10) cm⁻¹ pro *XX*, experimentálně nalezeno 1798 cm⁻¹. Podobný výsledek byl získán i pro odpovídající benzoilderivát.



O dvacet let později se týmž problémem zabývali američtí biochemici⁴⁴ a dospěli stejnou metodou ke stejnému výsledku; doplnili jej novou syntézou a také syntézou izomeru *XX*. Naše práce nebyla zmíněna. Samozřejmě jsem autorům napsal a poslal separátní otisk a – stejně samozřejmě – jsem nedostal žádnou odpověď. Případ opět navozuje řadu otázek z hledisek chemie, informatiky, etiky a nakonec i ekonomie a historie přírodních věd. Z čistě chemického hlediska je jistě dobře, že byla struktura ještě jednou potvrzena, bylo by ovšem lépe učinit to jiným, nezávislým způsobem. Takto by příslušná grantová agentura mohla vytykat, že finanční prostředky nebyly účelně vynaloženy. Nejzávažnější je ovšem hledisko etické. V přednášce jsem užil expresivního nekorektního výrazu, že práce byla ukradena, ale skutečně je těžké nalézt nějakou omluvu nebo vysvětlení. Jistě by se nemohlo nikomu vytykat, kdyby přehlédl nějakou teoretickou koncepci, syntetickou metodu či způsob výpočtu, objevené a aplikované třeba ve zcela jiné oblasti a publikované v méně známém časopise. Žádný chemik však nemůže přehlédnout citaci o konkrétní sloučenině, zda byla již připravena a zda je její struktura známa. Příslušnou rešerši v Chemical Abstracts nebo Beilstein's Handbuch zvládají i studenti. V elektronické verzi vyžaduje snad deset minut, jde-li o látku s malým počtem odkazů; v knihovně nemůže trvat déle než hodinu. Nehraje přitom žádnou roli, kdy, kde, kým a v jaké řeči byla hledaná práce publikována. Nelze se proto ani omlouvat, že naše lokální časopisy se v Americe nečtou, není pochyb, že rešerše se tam dělají stejně jako u nás. Představoval bych si jako možné vysvětlení, že autoři provedli rešerši o něco později, když již investovali určitou námahu do experimentů, a rozhodli se pak svou práci přece jen dokončit a předstírat nevědomost.

Pro sebe jsem jako autor odvodil dva závěry. Zaprvé, práce která ještě po 23 letech stojí za kopírování, není tak špatná. Považoval jsem ji předtím za nepřilíš významnou, v systema-

tickém výzkumu hydroxylaminových derivátů za spíše okrajovou. Druhý závěr se týká malého pokroku vědy, zejména publikační politiky za tuto dobu. V naší práci jsme měřili spektra asi dvaceti látek, z toho ve třech či čtyřech případech mohla být struktura sporná, největší pozornost jsme věnovali závislosti frekvence na struktuře pomocí empirické rovnice. Práce o dvacet let pozdější, publikovaná ve světovém časopise, není ani obsažnější (souvislost s biochemií je spíše předstíraná), ani není na vyšší interpretační úrovni. Je to jen jeden z mnoha příkladů, které vzbuzují pochybnost o termínu exploze informací; možná, že by bylo správnější mluvit o explozi publikací.



Druhý případ není tak dramatický, patří spíše k běžné realitě. Sloučeniny polyvalentního jodu jsou běžné v řadě aromatické; v alifatické řadě jsou stabilní jen výjimečně v přítomnosti elektrony přitahujících skupin. První jodosochloridy se skupinou ICl₂ vázanou na sp³ uhlíku (*XXII*) jsem připravil z α-jodsulfonů⁴⁵ (*XXI*) na základě ne dost podložených teoretických představ, nicméně předpoklad vyšel. Práce vzbudila pozornost předního odborníka na sloučeniny polyvalentního jodu Keefera⁴⁶, který preparace zopakoval a rozšířil, strukturu potvrdil a mou práci korektně citoval. Další autoři citovali obě práce, později již jen Keefera, nejprve s poznámkou „a práce tam citované“, později již bez ní. Ve starším referátu⁴⁷ je citována moje práce⁴⁵, v novějším⁴⁸ již jen Keefer⁴⁶. Po stránce etické nelze ani autorům příliš mnoho vytykat. Citace byly původně uváděny z hlediska čtenáře, úkolem bylo informovat ho jednoduše a rychle. Pokud bylo možno citovat recentní referát, dala se mu přednost. Jakmile se ovšem zavede scientometrické hledisko a citace mají sloužit k hodnocení autorů a k přidělování grantů, má citující zvýšenou odpovědnost. Měl by alespoň částečně hodnotit i zásluhy jednotlivých pracovníků a uvádět vždy skutečné původce a nikdy referáty. Toho se sotva někdy dosáhne a jediným závěrem je opět konstatování nedostatečnosti citační analýzy k hodnocení prací nebo autorů. Pro autory je z podobných případů jasně ponaučení. Jedna práce, i když značně původní, se v tvrdé konkurenci neprosadí, každý objev je potřeba potvrdit na větším počtu příkladů a publikace rozdělit do různých časopisů. Samozřejmě se tím počet publikací bude zvyšovat a konkurence bude stále větší.

Práce bez ohlasu

K tomuto tématu je nejobtížnější říci něco smysluplného. Scientometrie nás upozorňuje, že je značné procento prací, které nebyly citovány ani jednou, tedy ani samotným autorem. V takovém případě jde zřejmě o téma malého dosahu nebo o práci přerušenu a nedokončenou. Něco jiného jsou práce, které citovali sami autoři, ale nikdo jiný. Může jít samozřejmě o dílo průkopnické, jehož význam ocení teprve budoucnost, ale není to jistě častý případ. Spíše jde o téma okrajové, málo zajímavé, nebo byly výsledky již v podstatě známé. Značný význam mohou mít také formální nedostatky: publikace v ne-

vhodném časopise, málo srozumitelná prezentace. V každém případě by měli autoři takovou situaci analyzovat.

Závěr

Citát na začátku, citát na konci: *Littera scripta manet*. Můj již zmíněný učitel Rudolf Lukeš říkával svým žákům po jejich první publikaci: „Tak, teď jste nesmrtelní.“ Jeho typický, jemně ironický úsměv naznačoval, že ví více, než říká. Pochopili jsme teprve časem, že nejde o nesmrtelnou slávu, ale o dlouhou trvající odpovědnost. Žádný autor si nedovede představit, po kolika letech a do jakých detailů mohou být jeho tvrzení kritizována a zpochybněna. V přírodní vědě je patrně jediné východisko: rozlišit striktně, co je pozorovaná nebo vypočítaná skutečnost, a co interpretace či teorie. Fakta by měla přetrvávat nebo by se měla pouze zpřesňovat, teorie čekají podle Poppera na svou falzifikaci nebo podle Kuhna na nové paradigma.

Práce byla podporována Grantovou agenturou ČR, grant č. 203/99/1454.

LITERATURA

- Exner O.: Collect. Czech. Chem. Commun. 16, 258 (1951).
- Exner O.: Collect. Czech. Chem. Commun. 20, 1360 (1955).
- Exner O.: Collect. Czech. Chem. Commun. 21, 1500 (1956).
- Oddo G., Deleo E.: Ber. Dtsch. Chem. Ges. 69, 294 (1936).
- Exner O.: Collect. Czech. Chem. Commun. 28, 3145 (1963).
- Zinner G., Vollrath R., Kliegel W.: Justus Liebigs Ann. Chem. 734, 196 (1970).
- Hussain S. A., Sharma A. H., Perkins M. J., Griller D.: J. Chem. Soc., Chem. Commun. 1979, 289.
- Wieland W.: Angew. Chem. 20, 617 (1981).
- Exner O.: Chem. Listy 87, 719 (1993).
- Boháček I., Hocek M., Šesták J., Holý A.: Vesmír 79, 344 (2000).
- Battaglia A., Dondoni A., Exner O.: J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2, 1972, 1911.
- Pigenet C., Armand J., Lumbroso H.: Bull. Soc. Chim. Fr. 1970, 2124.
- Declercq J. P., Germain G., Van Meerssche M.: Acta Crystallogr., Sect. B 31, 2894 (1975).
- Larsen I. K., Exner O.: J. Chem. Soc., Chem. Commun. 1970, 254.
- Exner O., Jehlička V.: Collect. Czech. Chem. Commun. 53, 1018 (1988).
- Smolíková J., Exner O., Barbaro G., Macciantelli D., Dondoni A.: J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2, 1980, 1051.
- Exner O., Jehlička V., Barbaro G., Dondoni A.: Collect. Czech. Chem. Commun. 42, 833 (1977).
- Sutton L. E., Taylor T. W. J.: J. Chem. Soc. 1931, 2190.
- Exner O.: Prog. Phys. Org. Chem. 10, 411 (1973).
- Liu L., Guo Q.-X.: Chem. Rev. 101, 673 (2001).
- Exner O.: Chem. Listy 87, 719 (1993).
- Exner O.: Collect. Czech. Chem. Commun. 29, 1094 (1964).
- Exner O.: Collect. Czech. Chem. Commun. 37, 1425 (1972).
- Krug R. R., Hunter W. G., Grieger R. A.: J. Phys. Chem. 80, 2335 (1976).
- Gallicchio E., Kubo M. M., Levy R. M.: J. Am. Chem. Soc. 120, 4526 (1998).
- Vlasov V. M., Khalfina I. A.: J. Phys. Org. Chem. 13, 630 (2000).
- Exner O., Kunz M.: Scientometrics 32, 3 (1995).
- Leffler J. E.: J. Org. Chem. 20, 1202 (1955).
- Ehrensow S., Brownlee R. T. C., Taft R. W.: Prog. Phys. Org. Chem. 10, 1 (1973).
- Exner O.: Collect. Czech. Chem. Commun. 31, 65 (1966).
- Palm V. A.: *Osnovy kolichestvennoi teorii organicheskikh reaktivov*, kap. IX, 2. vyd., Khimya, Leningrad 1967.
- Adcock W., Dewar M. J. S., Gupta B. D.: J. Am. Chem. Soc. 95, 7353 (1973).
- Hine C. J.: *Structural Effects on Equilibria in Organic Chemistry*, kap. 3–3c. Wiley, New York 1975.
- Tsuno Y., Sawada M., Fujii T., Yukawa Y.: Bull. Chem. Soc. Jpn. 52, 3033 (1979).
- Charton M.: Prog. Phys. Org. Chem. 13, 119 (1981).
- Taagepera M., Summerhays K. D., Hehre W. J., Topsom R. D., Pross A., Radom L., Taft R. W.: J. Org. Chem. 46, 891 (1981).
- Taft R. W., Topsom R. D.: Prog. Phys. Org. Chem. 16, 1 (1987).
- Hansch C., Leo A., Taft R. W.: Chem. Rev. 91, 165 (1991).
- Gawinecki R., Kolehmainen E., Zakrzewski A., Laihia K., Ośmiałowski B., Kauppinen R.: Magn. Reson. Chem. 37, 437 (1999).
- Exner O., Krygowski T. M.: Chem. Soc. Rev. 25, 71 (1996).
- Decouzon M., Exner O., Gal J.-F., Maria P.-C.: J. Phys. Org. Chem. 7, 615 (1994).
- Borsche W.: Ber. Dtsch. Chem. Ges. 56, 1494, 1939 (1923).
- Exner O., Kakáč B.: Collect. Czech. Chem. Commun. 25, 2530 (1960).
- Huggett A. C., Cone J. L., Thorgeirsson S. S., Roller P. P.: J. Org. Chem. 52, 4933 (1987).
- Exner O.: Collect. Czech. Chem. Commun. 24, 3562 (1959).
- Cotter J. L., Andrews L. J., Keefer R. M.: J. Am. Chem. Soc. 84, 4692 (1962).
- Banks D. F.: Chem. Rev. 66, 243 (1966).
- Stang P. J., Zhdankin V. V.: Chem. Rev. 96, 1123 (1996).

O. Exner (Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, Prague): What is Further Fate of a Published Scientific Paper?

Acceptance of a published paper may be different as shown on examples from the author's work. A wrong finding was rebutted (acyl derivatives of oximes, configuration of hydroxymoyl chlorides), a method was accepted but not always followed (isokinetic relationship), a long-term discussion started which has not been resolved (resonance in nitrobenzene), a work was repeated without knowledge of the predecessor (acylation of a hydroxylamine derivative) or the paper was accepted but not cited (polyvalent iodine derivatives). The consequences are discussed from the philosophic, ethical, psychological and scientometric viewpoints.