

アイデンティティー論争から見えてきた

化学の深層構造：

Science of Chemistry の前提と課題

The Philosophical Premises of the Science of Chemistry, Deduced from the Disputes on Academic Identity of Chemistry

落合 洋文

Hirofumi OCHIAI

化学は実験事実から分子論的なメカニズムを推しはかる。このために、化学結合、原子価、不斉炭素原子など、他の科学にはない固有の概念=推論道具を用いる。推論道具は化学的な知識の性格を知るための手がかりとなるものであり、歴史的ならびに哲学的な研究の対象である。化学の学問的フロンティアが急激に拡大し、新たな事実の発見に推論道具の進歩が追いつかなくなったために、今日、アイデンティティーの危機と呼ばれる状況が生じている。推論道具の観点から Science of Chemistry の原点を確認する必要がある。

Chemistry has its own tool of reasoning, indispensable to making sense of chemical observation, and to deducing the molecular mechanisms of the thus observed phenomena. Those conceptual constructs such as "the valency", "the chemical bond", and "the asymmetric carbon" are among the well-known examples, and worth detailed historical as well as philosophical analysis to understand the character of the chemical knowledge. The rapid expansion of the "chemical facts" on the one hand, and the relatively slower development of the tool of reasoning on the other, might be responsible for what is referred to as the "identity crisis of chemistry", epistemologically difficult situation of too much expanded research field.

キーワード：推論道具，化学の認識論，化学の学問的アイデンティティー，トランスディクション tool of reasoning, epistemology of chemistry, academic identity of chemistry, transduction

1. はじめに

雑誌 *Nature* は "Chemistry Test: The Six Big Questions" (日本語版標題は「化学は終わったのか」と題する論説を掲載し、化学の現状について挑発的な問題提起を行った。¹⁾ その趣旨は以下のようなものである。物理学の「宇宙はどのように始まったのか」や生物学の「生

命とは何か」に相当する大きな命題が化学には見当たらないが、化学には重要な問題はもう残っていないのだろうか（言い換えれば、化学は学問分野として最盛期を過ぎてしまったのだろうか）。また最近では、化学にとって重要な問題が他の分野の「化学的な側面」として取り込まれてしまっているという指摘もある。

このような状況が続けば、化学が科学の中心的な分野でありつづけることは難しいのではないか。そうなる、化学は便利な道具にすぎないということになってしまうのだろうか。

これとは別に、A. Eschenmoser もあるインタビューのなかで次のように指摘している。化学者（特に有機合成化学者）はDNAやタンパク質を天然物化学の研究対象として見てこなかったため、本来なら化学で取り組むべき重要な問題を見逃してしまった。これと同じことが最近のフラレンやナノチューブについてもいえるのではないか。多くの有機合成化学者はこれらを「化学の外から来た」と感じており、手をこまねいて見ている状態だが、いまやこれらは化学の顔になりつつある。有機合成化学者は自分の研究対象をもっと柔軟にとらえ直す必要があるのではないか。²⁾

さらにJ. van Brakel や E.R. Scerri ら化学哲学の専門家たちは、化学の問題が量子力学に還元可能かどうかをめぐって、物理学と化学双方の相対立する見解を検討し、活発な議論を展開している。^{3), 4)}

19世紀に科学としての基礎固めを終えた化学だが、その後の自然科学全般のめざましい進歩と相互浸透により、化学と他の自然科学分野のあいだに厳密な線を引くことは難しくなっている。化学のアイデンティティーが問われるような場面が生じているというのは事実である。ただ、化学の有用性については疑う余地がないことから考えると、いま問われているのはまさに科学としてあり方であり、物理学や生物学とはちがう化学の固有性であると考えなければならない。Science of Chemistry という視点から化学の現状を再点検してみるというのは時宜にかなったことであろう。

ちなみに Science of Chemistry という表現は化学が近代科学として基礎固めを行っていた19世紀にしばしば見られた表現である。アイデンティティー論争が化学の原点を確認するきっかけとなれば、それはそれで意味のあることといえよう。

2. 化学の視点、論理、方法

物理学であれ化学であれ生物学であれ、科学にはそれぞれに固有の興味があり、探究の方法がある。またそういった事柄に論理的整合性と一貫性を与え、認識の妥当性を保証するために、何らかの形而上学的前提が存在する。化学の認識論的、存在論的ならびに方法論的な特徴は以下の3点にまとめることができよう。⁵⁾

1. 化学は自然界に存在する（または、存在しうる）多様な物質を研究対象とする。つまり、化学における好奇心や知識を特徴づけるのは、第一に、物質の構造や性質に関する個別的で具体的な問題である。
2. 化学の属性は本質的に経験科学のそれである。つまり、触知可能な物質や現象についての経験が知識の土台をつくっており、化学的認識を支えている。しかしまた一方では、そうした現象を引き起こす微視的な実体の存在を前提として分子論的なメカニズムを推しはかることが「合理的な説明」であると考えられてきた。そのため、化学的原子論、化学結合、原子価、化学構造式、不斉炭素原子など、さまざまな推論道具が発達し、用いられてきた。化学に固有の推論道具には、分子の構造や性質を説明するほとんどすべての理論や概念が含まれる。
3. 化学は物質合成を行う唯一の科学である。

19世紀のフランスの化学者 M. ベルテローは「化学はその研究対象をつくりだす」と記している。実際、物質合成は他の科学にはない、化学の最も際立った特徴であり、強みである。化学は物質を研究対象とする科学であるから、物がなければはじまらないが、それは与えられるものではなく、合成するものだというのが化学者の認識である。

19世紀のはじめ、ドルトンが物質の微視的構成と化学量論の関係に注目し、形而上学的な存在にすぎなかった原子を実験データと結びつけることに成功すると、知覚される現象の原因として微視的なメカニズムを推しはかることが可能になった。化学は、新奇な化学種の発見と記述を行うだけの博物学の段階から、合理的な見通しをもって物質を合成し、その結果を見てより詳細かつ正確なメカニズムを考えるという、仮説検証型の Science of Chemistry へと性格を変えていくことになった。

物質合成は Science of Chemistry の重要な要素の1つだが、それはまた推論道具の性格を決定づけ、化学に特徴的な態度や精神を形づくったという意味でも重要である。推論道具については後述するが、既成の理論に縛られず、事実即して柔軟に物事を考える実践的な態度は、化学が物質合成に基づく科学であることと深い関係がある。

3. 化学の認識階層

Scienceの対象として自然を見るときは、どのような認識レベルを問題にするのかという点をはっきりさせておく必要がある。化学的探究の対象は、第一に触知可能な物質であり、またそれをつくっている分子や元素などである。化学者の目には、たとえば酸素と硫黄はそれぞれが他の元素には見られないユニークな性質をもった元素と映る。物質の多様な化学的性質は、1つまたは複数の元素からなる構造体のレベルにおいて、さまざまな要因のあいだに働く複雑な相互作用の結果として現れるので、数少ない素粒子の基本的性質やふるまいからそれらを導き出すことはできない。化学的に興味ある問題の多くは量子力学的考察の対象になりうるが、量子力学によって「酸素の化学」や「硫黄の化学」を発見することはできないのである。

元素の化学的性質が周期性に従う理由は原子構造との関連において最もよく説明できるが、周期表は化学的推論によって発見され、また化学的な推論の道具としてその有効性を最大限に発揮してきたという事実を忘れるべきではない。ハイゼンベルクも、「もし原子価に関する化学的な知見がなかったら、量子力学がそれを発見できたかどうか疑わしい」と述べている。⁶⁾

一般に、物理学は問題をより根源的な階層に還元し、ただ1つの真理を発見することに関心があるが（これが物理学において数学的、抽象的な表現が多用される理由である）、化学は物質の個別的な性質やふるまいを問題にする。それゆえ化学が量子力学に還元できるかどうかという議論よりも、それぞれの認識階層をはっきりさせることのほうがより重要であると思われる。

自然界には少数の方程式によって表現される側面もあるが、単純化や抽象化を進めると失われてしまうものもあるのである。物質を構成する元素の多様さ、組み合わせの複雑さは物質世界の本質そのものといえる。

化学の実験室で必要とされる知識や概念は、化学的な興味や経験、観察対象に対する洞察力などから生まれる。18世紀にニュートン学派の粒子論（物質はただ1種類の根源的な粒子 corpuscle からなるという考え）を無視した化学者たちが、19世紀にドルトンの化学的原子論を支持した理由、あるいは物理的な実体としての原子が長いあいだ化学的な関心の外に置かれた理由は、このような観点から見ると理解しやすい。

4. transdiction と推論道具

前述のように、化学はその本質において経験科学であり、五感を通して知ることのできる物質や現象についての知識が化学の土台をつくっている。しかしまた、そうした現象を引き起こす微視的な実体の存在を前提として分子論的なメカニズムを推しはかることも同時に行っている。経験的な知識から経験的には知りえない世界を推しはかるのである。

X線や電顕で原子や分子の姿を「見る」ことのできる時代には分子論的なメカニズムを推し量るといってもあまり抵抗がないが、20世紀初頭にA.アインシュタインとJ.B.ペランが原子の実在することを証明するまでは、このような推論の是非をめぐる様々な議論があったことを思い出す必要がある。特に実証主義的な傾向が強まった19世紀後半には、E.マッハやW.オストワルドを筆頭にして、これに反対する考えが支配的だった。そのため20世紀の科学哲学では、このような推論に特別な注意が払われることになった（下記を参照）。

予測 predict にせよ事後的な説明 retrodict にせよ、日常的な出来事の世界では、説明される事柄とその根拠となる事柄はともに経験の範囲内にある。しかし、科学的な推論では経験的な知識から経験的には確認できない事柄を推しはかるということがしばしば行われる。経験の範囲内で原因と結果を水平に結びつけるのではなく、経験の範囲を越えて、いわば垂直的に原因と結果を結びつけるのである。このようなタイプの推論は transdiction と呼ばれる。⁷⁾

実験結果の分子論的な説明は化学における transdiction の好例である。また特に化学では、このような推論に明確な意味と具体的なイメージを与え、それを共有可能なものにするため、さまざまな概念道具が考案され、用いられてきた。筆者はこれを推論道具と呼ぶが、これには化学結合、原子価、不斉炭素原子などのほか、フロンティア・オービタル理論なども含まれる。これらが示唆するように、化学の用語、言い換えれば「化学の言葉」には推論道具を表象するか、これと密接な関連をもつものが多い。

重要なことは、これらは化学に固有の概念であり、化学的な想像力の産物だということである。化学結合にせよ原子価にせよ、あるいは電子対の移動を表す曲がった矢印にせよ、これらはもっぱら化学的な知見に基づいて考案されたのであり、化学の認識階層においてこそ意味をなすものである。

化学の進歩とは新奇な物質や現象を発見することであると同時に、それらを理解し化学の体系のなかに位置づけるということでもあるだろう。推論道具はそのためになくてはならないものである。

それゆえにまた、推論道具の性格やそれがもたらす様々な効果について詳しく分析し、認識の妥当性や方法の合理性を検討することは、有用な物質を合成したり計算を行ったりするのと同じくらい重要なことだといえる。筆者は化学を特徴づける推論道具に注目し、「推論道具から見た化学の認識論」について研究を行ってきた。世界的にもこのような研究は例がなく、このような側面からの化学の基礎固めが立ち遅れていることは認めざるをえないが、今回その一端を紹介し、このような研究の重要性をご理解いただければ幸いである。

一般に、科学とはさまざまな推論道具を駆使して観察された現象に意味を与える営みといえるが、そうだとしたら、化学の言葉が Science of Chemistry をつくったということもできるであろう。

化学はみずから研究対象を創造する唯一の科学だが、この物質合成という大命題の存在は推論道具の性格にも少なからず影響を及ぼしていると考えられる。なぜなら分子設計や化学反応の解析には何らかの合理的な根拠や見通しが必要だが、それは特定の物質を合成するという具体的な目的と関連づけられたものでなければならないからである。実験に結びつかない推論は、化学の推論としては役に立たず、意味をもたないのである。化学では数学的な抽象化よりも視覚的なイメージを与えることが重視されるのはこのためである。「見てきたようなことをいう」のが化学者である。ちなみに19世紀のドイツを代表する化学者J.リービヒは、化学者の重要な資質として photographic visual memory を備えていることだと述べている。⁸¹⁾

化学の推論道具は、①見ることも触ることもできない微視的な対象に視覚的なイメージを与える。また②抽象概念を具体的な数値や事実と結びつけ、直感的な理解を可能にする。

後者の例としては、たとえばファント・ホッフの work of affinity をあげることができよう。その本質はギブズエネルギーと同じだが、当時は（化学平衡を右向きと左向きの力の均衡と考えていたので）抽象的なエネルギー概念よりも化学親力のほうが感覚的に理解しやすかったのである（「仕事」を考えることで抽象的な親和力を理解しやすくするというねらいもあった）。

いずれにせよ、ファント・ホッフはエントロピーにも自由エネルギーにも頼ることなく、平衡定数の温度依存性に関するあの有名な式を導いたのである。^{9),10)}

C.K.インゴルドが提唱した求核剤／親電子剤 (nucleophile / electrophile) という考え方も、実態としては複雑な要素も多く含む反応機構の電子論的な解釈をよく整理して、これに視覚的なイメージを与えたものといえる。

5. 形而上学的前提について

科学哲学者S.トゥールミンは、科学が成立するための条件について、次のように述べている。いわく、「ものを自然にまかせたとき、それが本性としてどのようなふるまうかを決定するのが自然の秩序」であり、これをもとにして科学をうち立てるためには、「秩序そのものは自明」でなければならない。なぜなら「自然の秩序が他の事柄を説明するための出発点になる」からである。¹¹⁾

角速度一定の円運動こそが宇宙における自然な運動だと考えると、惑星が閉じた円軌道を回りつづけることは自明であり、説明の必要がない。しかし等速直線運動こそ自然な運動だとすると、これを理解するためには何らかの力の存在を仮定しなければならなくなる。

また、ニュートンは惑星系の力学をうち立てるに当たり、まず先験的に存在を認めた絶対空間に対して運動の3法則を定式化し、その前提のもとで惑星の絶対運動を記述したが、ライプニッツはそもそも絶対空間や絶対運動という考えを認めず、あくまでも相対運動として惑星系の力学を解析した。

カントも、先験的な論証の条件として絶対空間を持ち込むという考えには批判的で、むしろ運動の3法則（特に作用・反作用の法則）こそが、惑星の見かけの運動を絶対運動として記述するための必須の条件なのだと主張した。¹²⁾ 宇宙という、相互に位置を変える複数の天体から構成される系においては、系全体の重心が運動を記述するための確かな基準になる。それを決定するのが作用・反作用の法則を柱とする運動の3法則にほかならない。運動法則が（カントの意味における）形式を与えるのであって、任意に定めた形式が見かけの運動に絶対的な意味を与えるのではない。無矛盾の体系として力学を構築する場合、この認識は重要である。カントがニュートン力学の形而上学的な基礎を固めたといわれる所以であろう。

確認しておかなければならないことは、科学は、何ら説明の必要がない、もしくは最初から議論の対象とは考えられていない（そういう意味で形而上学的な）前提の上に成り立っている、ということである。それがトゥールミンのいう「自然の秩序」でありニュートンの絶対時空間だが、上の例が示唆するように、何を自明とするかということについてはつねに議論の余地がある（形而上学的前提には、まったく疑う余地がないという意味で自明なものと、その時点の知識や技術では事の真偽を確かめようがないので、議論の前提として正しいと仮定されているものがある）。そのため、1つの説明体系が行き詰ったときは、形而上学的前提まで遡って考え直すことも必要であり、実際、形而上学的前提の見直しはしばしば重要な発見やパラダイム転換を引き起こしてきた。ここで問題にしている推論道具も、何らかの自明とされる前提の上に成り立っているのだから、推論道具としての機能や効果に疑問が生じたときは、その前提を見直すことも考えなければならない。

ところで、自明と考えられている事柄のなかには、歴史的な経緯や偶然によってそうなったにすぎないものもあり、注意深く観察すれば、新たな展開の可能性が見えてくることもないとはいえない。

6. 有機化学の前提

有機（合成）化学者がイメージする「化学」の具体的内容は、たとえばパズルを解くような楽しみに満ちた合成経路の探索であったり、試行錯誤の連続からなる合成反応の検討であったりするだろう。あるいはまた、意図した反応が進行して最終生成物を手にしたときの、感動に満ちた達成感であるかもしれない。いずれにせよ、この図式が示唆しているのは、有機化学が分子や反応をデザインの対象として見ているということ、つまりそれが有機化学の前提であり、自明と考えられていることなのである。

実際、19世紀に化学が物質合成の学として確立して以来、有機化学者はデザイン可能かどうかという基準で研究対象を選んできた。これは有機化学がアルカロイドやテルペンやステロイド、あるいはビタミンといった比較的小きな分子を研究対象として成功を収めてきたことと無関係ではない。しかしまた、それがA.Eschenmoserも指摘するようにDNAやタンパク質の化学に対して有機化学者が出遅れた理由であろうし、いままたフラールンやナノチューブを「化学の外」

と感じてしまう理由でもあるにちがいない。²⁾ 有機化学の研究対象が拡大してきたいま、こうした図式そのものを見直す必要があるかもしれない。

有機化学がこのような前提に立っているとすれば、レトロ合成はその柱となる方法論であり推論道具といえるだろう。レトロ合成は通常の合成プロセスとは逆向きに、分子の骨格を形づくるC-C結合を適当な箇所「切断」し、合理的な合成前駆体や合成ルートを発見するための思考実験だが、¹³⁾ その考え方に有機化学の歴史が反映している。

有機化学はもともと生物由来の物質を研究対象として発展したため、生物の代謝産物に特徴的な構造や反応性をもとにして知識が整理・体系化されている。レトロ合成は、いわば合成反応の裏返しであるから、この分析手法が天然物やその関連物質に対して有効であるというのは当然だが、その反面、フラールンのような生物学的ではない要因によってつくられる物質には適用しにくく、結果的にそういう物質を「デザインの対象外」にしていることは否めない。

レトロ合成の前提を見直すということは有機化学そのものを見直すということだが、フラールンのような物質を「化学の内」に取り込むためには、そういうことも必要と思われる。¹⁴⁾

7. 前提を疑うこと

自明とされた仮定や前提を見直すことがしばしば大きな発見や発明につながることは、史実が示すとおりである。

19世紀の有機化学者ケクレの名は構造論と分かちがたく結びついている。ケクレは最新の原子価理論を分子内のすべての原子に適用し、分子の内部構造を推定したのである。特に、有機化合物がC-C結合からなるという発見はケクレの大きな功績とされる（従来は炭化水素根や硫酸根など、根を単位とする見方が支配的だったが、根は表記上のまとまりにすぎず、同じ化合物でも見方によって異なる構造式を割り当てられることがあった）。^{15), 16)}

当然だが、構造論における最大の課題は化学構造の決定だった。ただ、ここで注意しなければならないことは、化学構造は分子を構成する原子の配列（言い換えれば結合の順序）であり、原子の空間的な配置（言い換えれば分子の物理的な形）を指すものではないということである。形に関する情報は化学的手段では得られないので、化学の対象にはなりえないと考え

られていたのである。ケクレはイタコン酸やシトラコン酸など不飽和カルボン酸の異性現象を説明するために、ファント・ホッフに先駆けて炭素の四面体モデルを提案したが、空間構造についてはまったく言及していない。¹⁵ⁱⁱ⁾

これと同じ頃、乳酸の異性体について合成化学的な見地から検討を行っていたヴィスリツェヌスは、「同一の化学構造をもつにもかかわらず、異なる性質を示す化合物は、結合する原子の空間的な配置に違いがあると考えなければ説明できない」と記している。¹⁶ⁱⁱ⁾

当時、天然の乳酸はエチリデン乳酸 (α -ヒドロキシプロピオン酸) と呼ばれ、光学活性をもたない発酵乳酸 (通常は乳酸、DL 体) と光学活性をもつ肉乳酸 (パラ乳酸ともいう、L 体) の 2 つが知られていた。1862年にパイルシュタインがアクリル酸から非天然型のエチレン乳酸 (β -ヒドロキシプロピオン酸) を合成すると、これらの化合物の構造が大きな関心事になった。

ファント・ホッフ自身の言葉によれば、不斉炭素説はヴィスリツェヌスの一連の研究に触発された結果だったが、もしそのとおりなら、ヴィスリツェヌスが分子を三次元の構造物として見る視点を用意し、ファント・ホッフがそのしくみを見出したといえるだろう (30年近く前に、パスツールは光学活性が分子の非対称性に起因するという考えを示したが、分子構造まで踏み込むことはなかった。¹⁷⁾ ル・ベルがファント・ホッフに及ばなかったのもこの点である)。

ファント・ホッフの独創的な点は、原子価 (結合力ともいう) の向きや大きさが (結合する相手の有無にかかわらず) 元素ごとに決まっていると考えたことだった。当時の常識では、結合力に方向性があること考えること自体ナンセンスだった。なぜなら、原子は点電荷であり、電気的な引力を空間のあらゆる方向に等しく及ぼすと考えられていたからである。¹⁵ⁱⁱⁱ⁾ しかし、点電荷では単結合しか説明できず、幾何異性の問題には手も足も出ない。

化学の推論道具は化学的リアリティーが生命である。化学的な興味や問題意識に根ざしたものでなければならぬ。化学者の経験や直感に訴えることができるなら、一時的に物理的な意味を棚上げするくらいの大胆さも許されよう。不斉炭素説はそのことを物語る興味深い事例の 1 つである。

8. Identity Crisis の本質

従来の理論では説明できない不可解な事実が存在するとき、新たな推論道具の発明が起こる。パラフィンの水素原子が塩素で置換されるという発見は、電気化学二元論に基づく物質観に根本的な見直しを迫り、激しい論争となった。化学史家 A.J. Rocke が「静かな革命」と呼んだ1850年代の理論闘争がそれである。⁸ⁱⁱ⁾ わずか10年足らずのあいだに、有機化学の土台を揺るがすような新説が相次いで発表され、その多くが消えていった。しかし、なかには化学用語として今日までその痕跡をとどめているものもある。典型元素という言葉もその 1 つである。この言葉は有機化合物を 4 つの無機的な型と関連づけて整理するため、1852年に提案された「新しい『型の理論』」に端を発している。水素型の水素、水型の酸素、アンモニア型の窒素、メタン型の炭素は、それぞれの型の要となる元素だが、また同時に、一価から四価の原子価の尺度とも見なされるようになった。そのため、メンデレーエフは元素周期表を発表する際に、これらを特に典型元素と呼んだのである。¹⁸⁾

50年代の混乱は構造論の登場とともに終息するが、先に述べたように、構造論は原子価概念と切り離すことができない。ちなみに原子価 valence という言葉は C.H. ウィッケルハウスの造語で、A.W. ホフマンの用いた quantivalence の短縮形である。同じような意味をもつ言葉としては他に atomicity があり、A. ヴェルツによって「原子に内在する結合力」と定義された。しかしホフマンは原子の内部構造を暗示するこの言葉には反対で、元素の結合比を表す当量 equivalence から quantivalence をつくったといわれる。一方、原子価概念の第一発見者というべき E. フラン克蘭ドは、これを結合力 combining power と呼んだ。また当初は飽和度 saturation capacity も同じように用いられた。^{6ii), 15iii), 16i)}

これらの例が物語るように、化学の言葉は推論道具を表象するか、これと密接な関連性を持ち、それゆえ Science of Chemistry の本質に係わる。すでに述べたように、またたとえば G.N. ルイスのオクテット則や共有結合概念、あるいは L. ポーリングの混成概念や R. ピアソンの HSAB 概念などが化学に与えた影響を見ても明らかのように、化学の言葉が Science of Chemistry をつくったということもできる。化学史家たちはそうした言葉を手がかりとして過去を知り、その時代の化学を評価する。言葉は、前提となる考え方

まで含めて、その時代の化学の到達点を測る最良の物差しだからである。実際、化学が大きな進歩を遂げた時代（たとえばケクレが有機構造論をうち立てた1850年代前後、有機電子論が誕生した20世紀前半など）には、数多くの新しい言葉が生まれている。

このように考えると、構造論を集大成したケクレが歴史的な評価を独り占めにした理由もわかるし、R. ロビンソンではなくインゴルドが有機電子論の大成者といわれる理由も理解しやすい（実際、C.K. インゴルドの造語 nucleophile / electrophile は有機電子論のエッセンスを伝える言葉として含蓄がある）。また、こうした例を見れば、今日これほど化学が応用分野を広げ成果をあげているにもかかわらず、アイデンティティーが問われている理由も理解できる。

端的にいえば、新奇な物質や現象が発見され、化学のスペクトルが拡大している割には、言葉が育っていない。事実としてはフロンティアが拡大しているのに、それを知識として「化学の内」に位置づける言葉が乏しい。それがアイデンティティーの危機として感じられているのではないか。

1950年代初頭、フロンティア・オービタル理論は従来有機電子論では説明できなかった協奏的な反応機構を解明してその有効性を証明したが、この方法の最大の利点は、HOMO・LUMO や軌道の対称性など、分子の反応性に直接影響を及ぼす2, 3の因子について定性的な解析を行うだけで、化学者が日常的に必要とする情報のほとんどが得られることである。そのため、実験化学者でも、これを自分の言葉として自在に使いこなすことができた。プログラムの詳細がブラックボックスのまま、数値解だけが与えられるのとはちがって、応用が利く。このようなわけで、フロンティア・オービタル理論は有機化学の進歩に大いに貢献したのだが、たとえば最近の超分子系の解析には困難さがともなう。これに代わる、新たな推論道具の登場が待たれる所以である。

この他にも、たとえば反応座標は反応にともなうエネルギー変化を議論するためにはなくてはならない要素の1つだが、溶媒効果まで取り込んだ形ものは確立されておらず、この方面の詳細な研究はそれほど進んでいない。

コンピュータや計算化学の進歩はフロンティア・オービタル理論のような推論道具を不要にするわけではないし、有機化学者にとってCPKモデルの有用性が減少するわけでもない。理論であれ実験であれ、化

学の発明や発見にとってある種のセンスや洞察力が重要だという事実は今後も変わらないであろう。

9. 結論

推論道具が経験をつくる、といってもよい。われわれは化学結合や原子半径や結合角や、あるいは立体障害や電子供与や振動順位といった言葉を通して分子の三次元的な構造を組み立て、電子の移動や片寄りをつかみ、ダイナミックな運動を追いかける。われわれはそうやってつくりあげたイメージとフラスコのなかで進行中の変化とを重ね合わせ、観察された現象の意味を理解するのである。

化学には物理学や生物学のような大きな命題はないかもしれないが、普遍的な命題というものには存在する。それは分子の構造と性質をできるかぎり詳細に知ることであり、また反応機構を理解し、反応を自由自在に制御するということである。そうすれば、欲しい分子だけを100%近い収率で合成することもできるようになるだろう。また存在するものだけではなく、存在しうるあらゆる分子を合成し、その性質を知ることでもできるであろう。

こうした理想に向かって化学は絶え間ない進歩を続けており、いまこの瞬間にも、世界中で輝かしい成果をあげている。しかし、だから憂慮すべき問題はないのかといえば、そうではない。化学の興味と考察の対象は多岐にわたり、理論と実験とを問わず、そのフロンティアは加速度的に拡大している。だがそれに対して、知りえた事実を化学という枠組みのなかに位置づけ共有するための言葉のほうは、事実の発見ほど急速には進歩しないからである。それが今日の「アイデンティティーの危機」を招いた原因であると思われる。

ラヴォアジェも化学の言葉を定義するところから化学の近代化に着手したのである。アイデンティティー論争をきっかけとして推論道具の重要性を認識し、Science of Chemistry の原点を確認することができるなら、これまでの議論を糧としてさらに深く化学を掘り下げ、より大きな可能性を引き出すことができるにちがいない。

10. 謝辞

本論文は平成20年5月8日（金）に岡崎コンファレンスセンター（自然科学研究機構）で開催された日本学術会議化学委員会・分子科学研究所・日本化学会将来構想委員会共催による分子研所長招聘研究会「学術

のあるべき姿と大学等の組織変革」における講演内容に加筆・修正したものです。筆者にこのような発表の機会を与えてくださいました理化学研究所フロンティア研究システム長の玉尾皓平博士にこの場を借りて心より感謝の意を表します。

Princeton University press, Princeton (1995).
18) W. H. Brock, 邦訳『化学の歴史 I』, 朝倉書店, 東京 (2003), p.248.

文献

- 1) P. Ball, *Nature*, 442, 500 (2006) および *Nature Digest*, 3(10), 11 (2006).
- 2) I. Hargittai, "Candid Science III", Imperial College Press, London (2003), pp.97-107.
- 3) J. van Brakel, "Philosophy of Chemistry", Leuven University Press, Leuven (2000).
- 4) E. R. Scerri, "Collected Papers on Philosophy of Chemistry", Imperial College Press, London (2008).
- 5) 落合洋文, *化学*, 63(10), 58 (2008).
- 6i) M. J. Nye, "From Chemical Philosophy to Theoretical Chemistry", University of California Press, Berkley (1993), p.238; ii) *ibid.*, *idem*, p.80.
- 7) M. Mandelbaum, "Philosophy, Science and Sense Perception", The Johns Hopkins Press, Baltimore (1964), p.61.
- 8i) A. J. Rocke, "The Quiet Revolution", University of California Press, Berkley (1993), p.33; ii) *ibid.*, *idem*, pp.134-155.
- 9) K. J. Laidler, "The World of Physical Chemistry", Oxford University Press, Oxford (1993), pp.114-121.
- 10) J. R. Partington, "A History of Chemistry", MacMillan, New York (1961-1970), vol.4, pp.569-662.
- 11) S. Toulmin, "Foresight and Understanding", Harper & Row, Publishers, New York (1961).
- 12) M. Friedman, "Kant and the Exact Sciences", Harvard University Press, Cambridge (1992), pp.132-164.
- 13) E. J. Corey and X-M. Cheng, "The Logic of Chemical Synthesis", John Wiley & Sons, New York (1989).
- 14) 落合洋文, *化学*, 64(3), 30 (2009).
- 15i) C. A. Russell, "History of Valency", Humanities Press, New York (1971), pp.142-158; ii) *ibid.*, *idem*, pp.159-167; iii) *ibid.*, *idem*, p.85.
- 16i) P. J. Ramberg, "Chemical Structure, Spatial Arrangement", Ashgate Publishing, Hampshire (2003), pp.20-23; ii) *ibid.*, *idem*, p.46.
- 17) G. L. Geison, "The Private Science of Louis Pasteur",