

分子構造の量子力学への還元可能性に関する最近の動向

Recent Trends in the Discussing of the Reducibility of Molecular Structure to Quantum Mechanics

黒瀬 聡

Satoru KUROSE

要旨：本研究では、化学概念の還元可能性、特に分子構造概念の量子力学への還元可能性について、化学哲学の観点から様々な議論を概観する。分子構造の概念の認識論的還元は不可能であるというコンセンサスがこの分野の哲学者の間で得られたため、議論の焦点は近年、存在論的還元へと移行している。この傾向を考慮し、還元を形而上学的な概念として再確認した上で、化学理論や概念における還元の適切な議論の方法を提案する。

Abstract: In this study we review various discussions on the reducibility of chemical concepts—the reducibility of the concept of molecular structure to quantum mechanics in particular—from the viewpoint of the philosophy of chemistry. Since a consensus that the epistemological reduction of the concept of molecular structure to quantum mechanics is impossible has been reached among philosophers in this field, the focus of arguments is shifted and placed on ontological reduction in recent years. Taking into account this trend, and reviewing reduction as a metaphysical concept, we suggest the proper way to discuss reduction with respect to chemical theories and concepts.

キーワード：化学の哲学、還元、創発、分子構造、科学的存在論

Key words：Philosophy of Chemistry, Reduction, Emergence, Molecular Structure, Scientific Ontology

1. はじめに

科学的還元（以下、還元）は、科学哲学で長い間議論され、現在でも研究が続いているトピックの一つである^{注1)}。還元の議論は、初期の還元モデルであるエルンスト・ネーゲル¹⁾によって提案されたものから、既に多くの批判に晒されており、現在では還元主義を擁護する哲学者はネーゲル的還元モデルの修正を含む別のモデルを提案するのが一般的である。また、現在の還元は、当初の科学全般をその適用範囲とみなすものとは違い、個別的な科学分野を対象としたそれぞれの「個別科学の哲学」において議論されている^{注2)}。しかし、これら個別科学の哲学においても還元の問題はどれも解決されているわけではない。このことは、化学と物理学（特に量子力学）の関係を考える化学の哲学においても同様である。しかし、他の分野の還元よりも化学の物理学への還元が達成

されていないことは注目に値するだろう。なぜなら、化学が物理学に基礎付けられているという我々の日常的な直観が存在し、他の個別科学哲学、例えば心の哲学や生物学の哲学などで扱われる還元の議論では、一見すると化学の還元が前提とみなされているようにも思えるからである。化学と物理学という非常に密接に関係している分野においてさえも還元が達成されないのであれば、他の分野における還元への影響も大きいものとなるだろう。むしろ、化学の物理学への還元が不可能であるならば、もはや還元が可能な事例は、仮にあったとしてもごく些細なものかトリビアルなものしか無く、還元が空虚な概念であることになってしまうのではないだろうか。

還元がうまくいかない場合、考えられる対処法はいくつかあるが、その一つが還元についての定式化自体が間違っていると考えることである。実際、還元の定式化に

は様々な種類のものが提案されている。初期のネーゲルが想定していた理論間の還元から、より科学的説明に焦点を当てた説明的還元、因果関係などに焦点を当てた存在論的還元など、それぞれの個別科学の特徴と適合するような還元が検討されている。したがって化学の物理学への還元に対しても、化学という分野の特徴や事例に適した還元形式を採用することは問題解決のための一つの方法であると思われるかもしれない。しかし、実際には、個別科学における還元の形式においてさえも捉えたい特徴がそれぞれ異なるため、多様な還元形式が提案されることになってしまう。そして、このことは化学の還元についても同様である。

還元がこのように多様な定式化が可能なのはなぜだろうか。本論文では、化学の哲学において還元の議論がどのように展開していったかを検討し、この還元の議論の特徴と問題点を論じる。

このことを論証するために、本稿では化学の哲学における「分子構造の還元」を取り上げる^{注3)}。化学の哲学では、分子構造の他にも、化学結合や元素、周期表の還元など、化学に特徴的な概念の物理学への還元が盛んに研究されている。その中でも、最も議論の蓄積があるのが分子構造の還元であり、その結論にはある一定のコンセンサスが得られている。しかし、そのような中でも未だに還元の議論には決着がついておらず、むしろ認識論的還元の失敗から存在論的還元議論の段階が移行している。

本稿の構成は以下の通りである。まず、次の2節において、化学の哲学で議論される分子構造の還元不可能性の主張を概説する。続く第3節では、分子構造の還元不可能性にもとづいた存在論的還元の議論を検討し、その議論への批判を確認していく。最後に、第4節では、これまでの議論から還元の特徴および問題点を指摘し、形而上学的概念である還元がどのようなアプローチで議論されていくべきかについての指針となるものを素描する。

2. 分子構造の還元不可能性

分子構造の還元不可能性の主張は、化学の哲学において盛んに主張されてきた^{注4)}。その主張は、量子化学計算の実際の計算プロセスに焦点を当てており、物理学における基礎方程式であるシュレーディンガー方程式の解を得るために用いられる近似的手法の中に、化学で用いられるようなトポロジカルな構造知識が使用されていることを問題視している^{注5)}。以下では、簡単にではある

が量子化学計算でおこなう実際の計算プロセスを説明し、分子構造の還元不可能性がどのように導かれるのかを概説しよう^{注6)}。

量子化学計算とは、典型的には、ある特定の分子系に対して量子論の基礎方程式であるシュレーディンガー方程式を解くことにより、物理的・化学的な物性に関する情報を得ることである。しかし、このシュレーディンガー方程式を解析的に解くことのできる系は水素原子などの単純な系に限られる。これは多体問題と呼ばれる、古くから物理学者や天文学者を悩ませていた問題のためである^{注7)}。したがって、水素原子のような単純な原子以外の原子や分子は原子核と電子の数が容易に三体以上になるため、ほとんどの化合物に対するシュレーディンガー方程式は解析的に解くことができない。しかし、解析的に解けないことは解が存在しないことを意味するものではなく、様々な近似手法を用いて、実際には近似解を求めることが可能である。これまでに、科学の発展の中で多くの近似手法が開発され、近似解の精度の向上や適用範囲の広さなどの改良がなされてきた^{注8)}。

この近似手法として最も一般的なものに、今回の議論の焦点となるボルン・オッペンハイマー近似（以下BO近似）がある。BO近似とは、原子核の質量が電子の質量に比べて非常に大きく、原子核は電子に比べて相対的にゆっくりと動いていると見なせるため、原子核の運動と電子の運動を別々に計算する手法である。つまり、この近似では、電子の運動を計算する際に原子核を止まったものと見做して、シュレーディンガー方程式を解くことになる。このことは、数式的な操作としては原子間距離を定数として計算をおこなうことを意味する。これによりある特定の距離における電子のシュレーディンガー方程式を近似的に解くことができるようになるのである^{注9)}。その後、この距離を変化させていく毎に計算をおこない、その計算結果である基底エネルギー値をプロットしていくと、原子核間の距離と基底エネルギーとの間のポテンシャルエネルギー曲面と呼ばれるグラフを得ることができる。このグラフのエネルギーが最小となる点における原子核間の距離が、分子の安定構造の取るべき位置であると考えられている。

この計算プロセスの中で、BO近似を用いること、すなわち原子間の距離をある特定の定数として決定することは、それぞれの原子核の初期位置を入力することを意味し、分子のトポロジカルな構造知識を参照して使用することと同義である。最終的な計算結果の分子構造に近い初期位置を使用すれば、計算時間を短くすることがで

き、また、まったくでたために初期位置を入力すれば解が発散して計算結果が得られないこともありうるため、初期位置を決定することは重要な操作の一つである。しかし、この初期位置としてのトポロジカルな構造知識は、量子論から得られるものではなく、ましてや導出されるものではない。したがって、BO 近似を用いて、初期位置をインプットするときに、我々は階層的に上位の、すなわち化学のレベルの知識を使用しなければならない。このことから、量子化学計算のプロセスの中で、還元に対して重大な問題点があると主張されるのである。

3. 認識論的還元から存在論的還元へ

上記のような主張は、量子力学における理論的な制約によって論証がなされており、化学の哲学ではある程度コンセンサスが得られているとあってよいだろう。しかし、現時点においてこの主張が正しいからといって、化学の哲学者が皆、還元主義を放棄したわけではない。おそらく、分子構造の還元不可能性の主張を認めながらも、それによって本当に分子構造が量子力学に還元不可能なのか疑問に思った読者もいるはずである。つまり、分子構造の知識が量子力学から直接的に導出できないとしても、ただちに反還元主義的立場になるのではなく、化学と物理学の密接な関係や、化学的性質が物理的な力に基づいているはずだと考える直観などから還元を簡単には諦めないのが自然ではないだろうか。

このような素朴な還元観を、ロビン・ヘンドリーが正しく描写している²⁾。ヘンドリーによれば、還元が失敗したときに還元主義者はまだ2つの選択肢を残している。一つは、今後の科学的発展で還元もととなる基礎的な理論や知識が改訂されることによって、還元が成功する可能性があると考えることである。もう一つが、当該の還元不可能性の事例は、還元される側の理論の中で本質的な地位を持っていなかったと考え、還元可能性に影響はないと考えることである。どちらの選択肢も、現時点での還元不可能性は認めても将来的に還元が達成されるという未来志向の考えである。しかし、このことは未来志向的というだけではない。確かに、これらの考えは、科学的発展を前提とはしているが、なぜそもそも将来の化学に期待をするのだろうか。言い換えれば、還元が不可能である事例をそのまま認めたままで、それでも還元主義の立場をとる根拠は何だろうか。この場合、還元主義者は、ある事例や文脈における認識論的な還元の失敗を認める一方で、存在論的な還元を潜在的に認めているとみなすことができるだろう。つまり、還元を認識論的

なものとして存在論的なものとで区別するのである。認識論的還元とは、ネーゲルの還元モデルに代表される理論や説明などを還元対象とする科学的な知識についての還元である。存在論的還元とは、今回であれば分子構造それ自体が対象であり、分子構造が本質的に何であるのかという形而上学的な側面が争点となる還元である。このような区別によって、上述した素朴な還元観をより一般的に表現することができるだろう。つまり、現在の我々の科学的・認識的知識では還元がまだ達成されていなくとも、我々が知覚することができない形而上学的な世界では、実際には当該事例に対する還元の主張は正しいと考えることが可能である。したがって、還元主義者が還元を信じながらも還元で失敗してしまっている事例は、現時点では認識論的還元で失敗しているが、存在論的還元については失敗していないというわけである。このような認識論的還元と存在論的還元の区別を重要視し、ヘンドリーがさらに還元についての議論を展開させているため、以下では、まずはヘンドリーによる主張を検討しよう。

上述したように、ヘンドリーは分子構造の還元不可能性を論争の初期の頃から論じている論者の一人であるが、他の著者との違いは、さらに議論をすすめて、分子構造の創発を主張している点である²⁾。創発とは、「当該対象物の構成要素だけでは予測ができない性質」や、「構成要素だけでは生じない新規な性質」として表現される¹⁰⁾。この予測不可能性や新規性などはさまざまな解釈があるため、現在でも創発の定義には論争があるが、典型的には、当該の対象間の還元を否定し還元とは別の説明関係を与える概念である¹¹⁾。分子構造の事例で言えば、ヘンドリーは分子構造が量子力学に依存しながらも新規性を示すとして、依存的新規性 (dependent novelty) による分子構造の創発を主張しているのである。ヘンドリーは、BO 近似による分子構造の導出不可能性だけではなく、さらにいくつかの問題点を指摘する。それは、シュレーディンガー方程式に対して分子構造を指定しない限り、化合物における異性体が区別できないということである。異性体とは、同じ分子式を持ちながらも異なる構造や性質を持つ化合物のことである。したがって、実際には我々は、むしろ化学的な性質や構造の知識を用いて、シュレーディンガー方程式に化学の側から作用しているとみなすことができる。このように、我々に馴染みのある、存在論的に下位の階層からの上向きの因果的作用ではなく、存在論的に上位の階層からの下向きの因果的作用のことを下方因果と呼び、ヘンドリーは創発の根拠としている。以上のような、依存的新

規性と下方因果の存在を考慮すれば、存在論的還元よりも存在論的創発の方が分子構造の事例を適切に説明しているとヘンドリーは主張するのである。

以上のような、ヘンドリーの存在論的創発を擁護する主張にはいくつかの批判がある。これらの批判は存在論的還元・創発に対するものである。その反論も多種多様であるが、まずは、ヘンドリーと同様に化学の還元について多くの著作があるエリック・シェリー^{3,4)}の主張を取り上げよう。シェリーは、化学の創発に対して異なる主張をするブライアン・マクローリン⁵⁾と先程のヘンドリー²⁾を比較し、批判的に検討している。マクローリンは、化学の物理学への還元可能性についての議論の中で、特にイギリス創発論による化学的性質の創発主義を批判しており、これらの創発主義が量子力学の発展の中で敗北してきた歴史を検討している。しかし、シェリーが述べるように、確かに量子力学の発展によって、創発主義は下火になったが、彼らが主張していた予測可能性や新規性という創発的事実に対して完璧な回答を量子力学が与えていない以上、マクローリンの判断も保留せざるをえない。一方、ヘンドリーに対しては、ヘンドリーの主張する下方因果が存在論的創発の根拠に値するのかどうかについて疑問を投げかけている。下方因果という概念や因果性による還元の議論は、主に心の哲学分野において言及される概念であり、この概念が化学の物理学への還元そのまま適用可能かどうかは正当化が必要なのである。さらに、異性体の問題については、量子力学的現象である量子デコヒーレンスによる説明の可能性を主張する。つまり、量子力学では分子はいくつかの可能な構造が重なり合った状態であるとみなすことができ、波動関数の崩壊によっていずれかの分子構造を持つようになるというわけである。このような理論的なアプローチは、最近ではアレクサンダー・フランクリンとバネッサ・ザイフェルト⁶⁾によっても提案されており、彼らは分子構造の問題が量子測定の問題の一部であると主張している。これらの検討を通して、シェリーは還元も創発も決定的なものとは言い難く、現時点では不可知論の立場をとることが賢明だと主張する。

この他にも、存在論的創発を擁護する議論としてオリンピア・ロンバルディ^{7,8)}が化学の自律性の主張から存在論的多元主義を提唱している。また、ロバート・ビショップ⁹⁾が還元される理論 A が還元もとなる理論 B に対して「必要条件・十分条件」を与えるかどうかで還元と創発を定義し、ヘンドリーとは別のアプローチによる分子構造の創発の擁護もみられる。化学の存在論的

還元・創発の全体の批判としては、リー・マッキンタイア¹⁰⁾が、存在論的還元および創発の曖昧性を指摘し、認識論的還元に留まることを主張しており、カール・ジレット¹¹⁾が構成性と決定性の観点から新たな還元・創発の議論ステージを提案している^{注12)}。

4. 還元という形而上学的概念のための指針

前節でみてきたように、分子構造の還元には、認識論的な側面と存在論的側面による議論がなされてきた。認識論的な側面と存在論的な側面は、著者によって明示的か暗示的かは分かれるが、ある程度区別されながら議論がおこなわれてきたようである。しかし、還元におけるこれらの側面どうしの関係がどのようなものであり、どのようにアプローチするべきかという、還元についてのメタ的な議論についてはこれまでにあまり言及されてこなかった。ここでは、このような認識論的側面と存在論的側面をもつ還元について建設的に議論するためには、どのような議論の指針や枠組みが必要であるのかについて、簡単にアイデアを素描したいと思う。

これまでの議論から、化学の哲学における還元の特徴として次の三つの点を挙げることができる。第一に、還元がこのように多様な形式となるのは、還元が形而上学的な概念であることが原因であると思われる。還元をどの形式にも当てはまるように平易に説明するとき、しばしば「他ならない (nothing but)」という表現が使用される。つまり、還元とは、還元される対象 A が、別の還元もとなる対象 B に他ならないとき、A は B に還元可能であるということができる^{注13)}。この「他ならない」という表現は存在論的な含意を有しており、この含意を認識論的な方法で代替的に表現したとしても、本来の還元という概念が存在論的なコミットメントを持つ形而上学的な概念であることに変わりはない。例えば、Nagel 的還元は、論理実証主義の流れを汲む形而上学を排するアプローチであるため、還元の条件として導出条件と結合条件を提案することで、一見すると認識論的な還元を徹底しているようにみえる。しかし、このアプローチは、実際には還元の存在論的な含意をどのように扱うべきかという問題に対して認識論的な代替案を提案しているのである。このことは他の認識論的還元モデルについても同様である。これまでに提案された多様な認識論的アプローチも還元の存在論的な含意を満たすように提案された代替案なのである。したがって、我々が多様な還元の定式化を検討するのはある意味で当然であり、還元に対する正しいアプローチであると言えるだろう。

第二に、我々は結局のところ、形而上学的な概念に直接アプローチすることはできないということである。我々にできることは還元という形而上学的概念に代替的な認識論的アプローチで論じることだけである^{註14}。つまり、存在論的還元というのは、還元の存在論的なコミットメントを強調しているという意味であり、その本質は認識論的還元とみなすことができる。Hendryにより提案された存在論的還元・創発は因果性という形而上学的概念に訴えているが、実際には科学的知識を用いていることに変わりはない。つまり、還元という形而上学的概念に対して、因果性を用いて形而上学的アプローチをしているようにみえるが、実際には因果性という形而上学的概念に対して、さらに認識論的なアプローチによって代替的に扱っているのである。このことは他の存在論的還元のモデルにおいても同様であり、我々は還元の「他ならなさ」を認識論的な方法で表現するしかない。しかし、これらの多様なモデルの間にはどのような関係があるのだろうか。それぞれのモデルは比較が可能だろうか。このような多様な還元モデルを許容するのであれば、それらに対するメタ的な議論が重要になることは当然だろう。還元についてのそれぞれモデルや認識論的アプローチを建設的に語るためには、これらのアプローチを並べて比較するための軸が必要である。

第三に、形而上学的概念に対して認識論的にアプローチをする以上、還元論争の決定的な終結や議論の決着は期待できないということである。このことは、分子構造の還元不可能性の議論に対する哲学者の反応からも明らかであるだろう。我々は現時点での分子構造の還元不可能性を認めても、将来的・存在論的に還元への信念を維持することが可能である。このことは逆に、分子構造が認識論的に還元可能である事例が示されたとしても同様である。例えば、Nagel 的還元モデルのような非常に厳しい条件が満たされたとしたら、それは疑いようのない還元のように思われるかもしれない。しかし、それはある事例が還元という形而上学的概念に限りなく近づいているということであり、同じ事例であっても、別の文脈において還元不可能な部分を探すことは常に可能である^{註15}。

では、還元という形而上学的概念に対する認識論的アプローチに対して、そしてその認識論的アプローチどうしに対してどのようなことがいえるだろうか。近年、科学哲学に関連する領域として「科学的形而上学」という分野がある。この分野は、科学に関連する形而上学的側面について考察する分野であり、科学の存在論について

の議論も最近では活発に行われている。このような分野の議論を参考に、還元という形而上学的概念へのアプローチ方法を考案することができるのではないだろうか。本論文では、概略的にはあるが、アンジャン・チャクラバティによる科学的存在論に対する自然化された形而上学の規範を紹介しよう。

チャクラバティは、科学的存在論を考える上で、形而上学的な命題や推論に対して自然主義的にアプローチするための規範を提案している¹²⁾。その規範によれば、科学的研究から得られた知識に関連する形而上学的な推論や命題を使って、我々は科学的な存在論について語ることができるというものである。チャクラバティはこの規範を、科学哲学における主要なトピックである科学的実在論論争をターゲットとしたものとして主張しているが、この規範は還元という存在論コミットメントを含む形而上学的概念にも適用可能であると思われる。この規範を還元に応用すれば、還元についての存在論的コミットメントを、科学的研究から得られた知識を用いて語ることができるということになる。ただし、チャクラバティによる更なる説明によれば、この基準は、その人の認識的スタンスに依存する。認識的スタンスとは、我々が、得られた科学的知識が形而上学的推論を容認するにあたって、どの程度のリスクを見積もるか、ということについての立場である。典型的には、チャクラバティは形而上学的推論を信じるために必要な知識を少なく見積もるスタンスを形而上学的スタンス、対照的に、必要な知識を多く見積もるスタンスを経験的スタンスと呼んでいる。還元の話に戻れば、還元という形而上学的推論を現在の科学的成果に基づいて、そのリスクが低いと信じる人々は形而上学的なスタンスであり、現在の科学的成果ではリスクが高く、まだ還元を信じるには足りないと考えた人々は、経験的スタンスであるといえる。我々が、同じ科学的成果を認めながら、還元について異なる考えを持つのは認識的スタンスが異なっているからなのである。しかし、チャクラバティの主張で重要な点は、これらのようなスタンスを我々が選択する際に、いくつかの条件はあるものの、基本的には制約がないことである。つまり、どのスタンスをとるかについて、合理的な選択基準がないということになってしまう。この主張には多くの批判がなされており、現在も論争が続いている^{註16}。

このように、チャクラバティによる提案はそのすべてを許容することはできないが、化学の哲学における還元論争についてのいくつかの指針を与えてくれるように思われる。これまで、化学の哲学における分子構造の還元

についての議論を概説してきた。本稿の内容だけでは検討が十分とはいえないが、化学の哲学における還元論の遷移として、存在論的還元が焦点が移っており、多様な還元モデルの定式化のもとで議論が続いていることを確認した。このような多様な還元モデルの定式化は、還元が形而上学的な概念である以上、必要なものである。しかし、還元について建設的に議論するためには、これらの多様な還元モデルを比較検討できるメタ的な指針が必要である。チャクラバティによる科学的存在論の枠組みで考えれば、これらの多様な還元モデルは我々の科学的知識にもとづいた主張であり、これらの議論にもとづいて還元を許容するかどうかを判断することが可能である。したがって、多様な還元モデルは、その論証が正しい限りそのどれもが有用であり、これらの議論を総合して還元についての我々の信念を決定するという枠組みを意識することが重要なのである。このように、科学的形而上学という分野の枠組みにもとづいて還元を考えることによって、議論が錯綜しやすい還元論の議論が建設的なものになることが期待できるだろう。

注

- 注1) 哲学における還元では、ある事物がその要素だけで構成されており、全体の挙動について、部分から説明が可能であると主張される。このときの部分と全体の関係を還元といい、この主張には存在論的なコミットメントが含まれる。科学哲学における還元では、ネーゲルの還元モデルが科学理論に焦点を当てたように、科学的な知識や成果を対象として検討がなされる。
- 注2) 科学哲学とは、科学における知識や手法、その営みを対象として哲学的手法により考察をおこなう分野である。初期においては、その射程は科学全般に対するものであったが、科学の諸分野全てについて共通して語ることの困難さや、実際には物理主義を前提とした物理学に偏った議論をおこなっていたことから、科学の諸分野をそれぞれ個別に検討する必要性が指摘されている。
- 注3) 本来であれば、この論証のためには、分子構造の還元だけでなく、他の化学的概念の還元についても広く扱い、化学の哲学全体として議論されている還元の特徴を検討する必要があるが、本稿ではそれらの概念については今後の検討課題とし、まず第一に分子構造の還元を検討する。
- 注4) 例えば、Woolley (1976, 1978)^{13,14)}, Primas (1981)¹⁵⁾,

Hendry (1998)¹⁶⁾など

- 注5) トポロジカルな構造知識とは、それぞれの原子核がどのように隣り合っているかという情報であり、すなわち我々が馴染みのある構造式で描かれるような構造知識のことである。
- 注6) 本稿では還元概念について考察することが目的であるため、ここでは数学的な計算式は取り扱わず、その数学的操作の物理的・化学的意味についてのみ言及する。
- 注7) 多体問題とは、相互作用する三体以上からなる系に対する方程式を解析的に解くことができないという問題である。
- 注8) 量子化学計算の歴史については Jensen (2017)¹⁷⁾が詳しい。
- 注9) 実際の計算では他の近似も使用するが、分子構造の還元で語られるのは、BO 近似に関するものがほとんどである。
- 注10) 他にも、創発についての標語に「全体は部分の総和ではない（総和以上である）」というものがある。
- 注11) 創発は還元以上にその定義が複雑であり、実際には、還元と両立する創発を主張する論者もいる。ただ、創発を主張する際には還元は否定されることが一般的である。
- 注12) 本稿では詳細に検討することができなかったが、これらの事例からわかるように、存在論的還元・創発についてさまざまな定式化があり、どれか一つの軸で建設的に議論を進めていくことが非常に困難な状態であることがわかるだろう。
- 注13) 他にも、ある理論 A が別の理論 B に「尽くされる exhausted」という表現もある。
- 注14) このことは、何人かの化学の哲学者も同様のことを述べている。例えば、Lombardi (2005,P26)⁷⁾ や Hendry (2010,P.184)¹⁾
- 注15) この流れはマクローリン (1992)⁵⁾が指摘したイギリス創発論が量子力学の発展で一時的に下火になり、その後、また再燃したことから伺える。
- 注16) Psillos (2021)¹⁸⁾, Slater (2021)¹⁹⁾, Bryant (2021)²⁰⁾などを参照のこと

引用文献・参考文献

- 1) Nagel, E. (1979). *The structure of science* (Vol. 411). Indianapolis: Hackett publishing company.

- 2) Hendry, R. F. (2010). Ontological reduction and molecular structure. *Studies in History and Philosophy of Science Part B: Studies in History and Philosophy of Modern Physics*, 41(2), 183-191.
- 3) Scerri, E. R. (2012). Top-down causation regarding the chemistry-physic interface: a sceptical view. *Interface Focus*, 2(1), 20-25.
- 4) Scerri, E. (2023). A commentary on Robin Hendry's views on molecular structure, emergence and chemical bonding. In *New Mechanism: Explanation, Emergence and Reduction* (pp. 161-177). Cham: Springer International Publishing.
- 5) McLaughlin, B. P. (1992). The rise and fall of British emergentism. In *Emergence or reduction? Essays on the prospect of a nonreductive physicalism* (eds A. Beckerman, H. Flohr & J. Kim), pp. 49-93. Berlin, Germany: de Gruyter.
- 6) Franklin, A., & Seifert, V. A. (2024). The problem of molecular structure just is the measurement problem. *The British Journal for the Philosophy of Science*, 75(1), 31-59.
- 7) Lombardi, O., & Labarca, M. (2005). The ontological autonomy of the chemical world. *Foundations of Chemistry*, 7(2), 125-148.
- 8) Fortin, S., Labarca, M., & Lombardi, O. (2023). On the ontological status of molecular structure: is it possible to reconcile molecular chemistry with quantum mechanics?. *Foundations of Science*, 28(2), 709-725.
- 9) Bishop, R. C. (2005). Patching physics and chemistry together. *Philosophy of Science*, 72(5), 710-722.
- 10) McIntyre, L. (2007). Emergence and reduction in chemistry: ontological or epistemological concepts?. *Synthese*, 155, 337-343.
- 11) Gillett, C. (2016). *Reduction and emergence in science and philosophy*. Cambridge University Press.
- 12) Chakravartty, A. (2017). *Scientific ontology: Integrating naturalized metaphysics and voluntarist epistemology*. Oxford University Press.
- 13) Woolley, R. G. (1976). Quantum theory and molecular structure. *Advances in Physics*, 25(1), 27-52.
- 14) Woolley, R. G. (1978). Must a molecule have a shape?. *Journal of the American Chemical Society*, 100(4), 1073-1078.
- 15) Primas, H. (1981). *Chemistry, quantum mechanics and reductionism: Perspective*. Springer, Berlin.
- 16) Hendry, R. F. (1998). Models and approximations in quantum chemistry. *Poznan Studies in the Philosophy of the Sciences and the Humanities*, 63, 123-142.
- 17) Jensen, F. (2017). *Introduction to computational chemistry*. John Wiley & Sons.
- 18) Psillos, S. (2021). Scientific ontology: fact or stance?. *Dialogue: Canadian Philosophical Review/Revue canadienne de philosophie*, 60(1), 15-31.
- 19) Slater, M. H. (2021). Extending the Ladder of Stances: Comments on Chakravartty's Scientific Ontology. *Dialogue: Canadian Philosophical Review/Revue canadienne de philosophie*, 60(1), 33-42.
- 20) Bryant, A. (2021). A Thousand Flowers on the Road to Epistemic Anarchy: Comments on Chakravartty's Scientific Ontology. *Dialogue: Canadian Philosophical Review/Revue canadienne de philosophie*, 60(1), 1-13.

利益相反

本研究に関して申告すべき利益相反 (COI) はありません。

