

化学は量子力学に還元できるか？ ―「分子構造論」を例に考える

佐藤 直人 (Naoto Sato)

北陸先端科学技術大学院大学

現在「化学の哲学」¹という分野では、化学の文脈における「還元主義」と「反還元主義（またはその他の立場）」の論争が存在する。

「化学は基礎的法則を物理学の法則に依拠しているため、化学現象はすべて物理学的に記述（還元）できる。」このような主張や立場は、そのままの文言ではないにしても、化学の物理学への還元主義の主張と捉えられる。大学院で化学の研究を行っていたかつての私もこのような主張に概ね同意しており、違和感を感じることはなかった。しかし「化学の哲学」という分野においては、そのような立場は「反還元主義者」らによって反駁されており、現在も代表的な論文雑誌上において争点²となっている。そこでは、多くの地球上の動植物や素材を構成する有機化合物などに代表される、複雑な分子の「分子構造」というものが、物理学への還元ができない代表的な例として議論されている。化学にとって、分子構造の概念は重要である。分子構造は、構成する原子の単なる組成（ C_2H_4 などの構成元素のみの情報）とはことなり、それらの元素の相互の空間的な配置、および全体としての分子の対称性/非対称性が生まれる原因であり、キラル化合物などの示す光学活性の説明、生物におけるタンパク質の結合・変化に、創薬研究過程におけるタンパク質の立体構造への結合特性など、あらゆる研究活動の理解・理論予測に不可欠である。もはや現代科学の多くの領域において欠かすことのできない概念である。

しかし、この化学における根本的な概念の物理学の理論との接合について疑念が呈されている。初めてこの問題提起がなされたのは、Woolley(1978)によってなされた有機化学専門ジャーナル上の議論である。そこでは、化学研究において基本的な概念である分子構造の特徴が、量子力学および量子化学の理論だけではうまく説明・再現できないという問題が提起された。その後、量子化学者などを中心に、物理学的に厳密で高度なものも含めて、存在論や認識論を含む科学哲学の問題として、数多くの議論が現在に至るまでなされている(Huggett, Ladyman & Thébault (2024))。

最近Lang(2024)らは、既存の量子化学や計算化学などの手法では導出できなかった分子構造の描画を、今までと異なる手法で初めて成功させた。ただし、この手法できたものは、 H_3^+ イオンという、シンプルな三角形構造の回転対称性を持つ分子の構造である。これに対してLombardi(2025)らは、より複雑な構造をもつ分子や非対称性をもつ分子、または光学活性をもつようなキラル分子の構造（および性質）の再現が、本来対称性しか持ちえないハミルトニアンからいかにして導出できるのか？という問題(symmetry problem)が依然として残っているという旨の指摘をしている。これらの議論は、物理学的に厳密な議論であり、物理学という下位の理論への上位の理論（化学）の還元可能性を突き詰めている試みであると言える。しかし、この議論はまだ決定的に決着しているわけではなく進行中のものである。

\

¹ この分野についての日本語の入門書としては、落合洋文 (2023) が詳しい。

² Hendry(2010)が代表的な議論の一つである。また、最近では“*Foundation of Chemistry*”(1999年創刊)が代表的なジャーナルであるが、Scerri(2025)が最近の成果を踏まえた論文として還元の問題を扱っている。

一方、化学と物理学の本質的な違いを「科学的理解論」の観点から考えている論者もいる。「有機電子論」は有機合成化学で用いられる典型的な化学反応予測のためのモデルであるが、それが現代の物理学的には誤りを含むにもかかわらず、多くの化学者に使われている。野村(2022)は、それをde Regtの科学的理解論やintelligibilityなどの観点から考えており、有機電子論などの理論モデルの利用には物理学理論への還元可能性が必ずしも必要でないということを示唆している。

これらの流れを受け、本発表では、分子構造に関する議論の内容を紹介するとともに、「還元主義」対「反還元主義」といった立場のどちらか一方にコミットすることなく考察する試みをしたい。具体的には、「分子構造に対する科学的理解とは何か？」という観点から、いま行われている分子構造の議論をどう捉え直すことができるかを考察する。また「化学の哲学」が「科学哲学」という分野全体においてどのような意義を持つのかについても考えていく。

【参考文献】

1. Hendry, Robin Findlay. “Ontological Reduction and Molecular Structure.” *Studies in History and Philosophy of Science Part B: Studies in History and Philosophy of Modern Physics* 41, no. 2 (2010): 183–91.
2. Huggett, Nick, James Ladyman, and Karim P. Y. Thébault. “On the Quantum Theory of Molecules: Rigour, Idealization, and Uncertainty.” (2024) <https://arxiv.org/abs/2411.01942>.
3. Lang, Lucas, Henrique M. Cezar, Ludwik Adamowicz, and Thomas B. Pedersen. “Quantum Definition of Molecular Structure.” *Journal of the American Chemical Society* 146, no. 3 (2024): 1760–64.
4. Lombardi, Olimpia, Sebastian Fortin, Juan Camilo Martinez Gonzalez, and Hernan Lucas Accorinti. “What Are We Talking about When We Discuss the Born-Oppenheimer Approximation?” (2025). <https://arxiv.org/abs/2507.12223>.
5. Woolley, R. G. “Must a Molecule Have a Shape?” *J. Am. Chem. Soc.* 100 (1978): 1073.
6. Scerri, Eric. “The Born-Oppenheimer Approximation and Its Role in the Reduction of Chemistry.” *Foundations of Chemistry*, ahead of print, May 17, (2025)
7. 落合洋文、『哲学は化学を挑発する』、化学同人 (2023)
8. 野村聡, 科学的理解の観点から見た有機電子論, 科学基礎論研究, 50(1). (2022)