

Научная статья
УДК 167/168
doi: 10.17223/15617793/519/10

Возможна ли эпистемологическая редукция химии к физике по Э. Нагелю?

Ирина Игоревна Четкина¹

¹ Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия, iralena@mail.ru

Аннотация. Исследуется модель эпистемологической редукции Э. Нагеля применительно к теориям физики и химии. Ее анализ проводится в трех аспектах: в первом аспекте – как связи между языком и концептами этих наук, во втором аспекте – как возможности установления структурных взаимосвязей этих наук в виде правил соответствий, соединяющих словари физических и химических теорий, и в третьем аспекте – как логической выводимости понятий химии из «первых принципов» физики. Показана несостоятельность концепции редукции химии к физике в силу лингвистических ограничений химии и замкнутости ее концептуальных систем, концептуальных и методологических проблем самой физики, а также ограничений дедуктивного метода в химии.

Ключевые слова: философия химии, эпистемологическая редукция, Э. Нагель, квантовая механика, концептуальные системы химии, язык науки, правила соответствия, дедуктивный метод

Для цитирования: Четкина И.И. Возможна ли эпистемологическая редукция химии к физике по Э. Нагелю? // Вестник Томского государственного университета. 2025. № 519. С. 74–84. doi: 10.17223/15617793/519/10

Original article
doi: 10.17223/15617793/519/10

Is it possible to epistemologically reduce chemistry to physics according to E. Nagel?

Irina I. Chechetkina¹

¹ Kazan National Research Technological University, Kazan, Russian Federation, iralena@mail.ru

Abstract. The aim of this article is to provide an epistemological analysis of the reduction principle in chemistry, using the reducibility of chemistry to physics as a case study. To this end, Ernest Nagel's model of reduction was employed, which structured the research along two main lines: identifying the connections between the concepts of these sciences and examining the possibility of deductively deriving chemical concepts from physics. The research methodology was based on the principles of linking the historical and the logical, a systemic approach, formal-logical methods, the comparative method, and interpretation. The problem of reduction was examined within the context of the history and logic of the development of philosophy and the natural sciences. Applying a systemic approach to this problem made it possible to identify three types of reduction—conceptual, quantitative, and ontological—and to establish the connections between them, as well as their relationship with Nagel's model. To investigate conceptual reduction, the semantic content of chemical and physical concepts was examined using formal-logical methods, comparison, and interpretation. This analysis revealed the uniqueness of the language of chemistry and the distinctive nature of its conceptual systems, which cannot be fully expressed in the formal mathematical language of physics. Conceptual reduction entails ontological reduction due to the differing interpretation of chemical concepts and the specific character of quantum methodology. Chemical concepts also possess quantitative content, which facilitates quantitative reduction; however, this reduction is limited by the attempt to bring chemistry into an axiomatic system through deduction, which falls under the scope of Gödel's incompleteness theorem. Quantitative reduction in chemistry was correlated with Nagel's requirement of correspondence rules, with the occupation matrix in quantum mechanics serving as such a rule, albeit one that interprets the chemical bond and the molecule differently. Consequently, the complete homogeneity of theoretical vocabularies posited by Nagel is not achieved. Reduction constitutes a simplification of chemistry, as linguistic and conceptual barriers exist between chemistry and physics, along with limitations inherent to deduction. Therefore, Nagel's model encounters objections.

Keywords: consciousness, self-awareness, human self-identity, spirituality, intelligence, integrity

For citation: Chechetkina, I.I. (2025) Is it possible to epistemologically reduce chemistry to physics according to E. Nagel? *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta – Tomsk State University Journal*. 519. pp. 74–84. (In Russian). doi: 10.17223/15617793/519/10

Введение

Принцип редукции всегда был краеугольным камнем в философии науки, в его рамках обсуждались

проблемы взаимодействия наук и их пограничных областей знания, этот принцип поставил вопросы о возможности перенесения научных данных, методов познания, идеалов и норм науки из одной области науки

в другую. Редукционизм имеет отношение к вопросам о структуре теоретического знания, проблеме объяснения редуцируемых концепций с помощью редуцирующих, происхождению языку науки. В рамках редукционизма обсуждается также единство и эстетика науки. В целом принцип редукции дает разнообразие логико-методологических подходов в науке и свидетельствует о постоянном прогрессе науки.

В философии химии вопрос о редукционизме – это одна из наиболее обсуждаемых тем в связи с самостоятельностью химии и ее независимостью от физики не только как науки, но и учебной дисциплины. Редукционисты понимают физику как более фундаментальную науку, чем химию, поскольку она наиболее глубоко и полно описывает, и объясняет реальность. Химии отводится участь феноменологической индуктивной науки. Поэтому необходимо решить вопрос о том, как соотносятся между собой эти науки, редуцируются ли теоретические представления химии к физике или нет. Вопрос о гносеологическом приоритете той или иной науки имеет также практические последствия – экономические и социальные, например, приоритет в области принятия решений в сфере научно-исследовательских проектов и преподавания естественных наук, социальной значимости этих наук, учитывающей их роль в развитии техники и технологий, а также политике финансирования наук [1].

В истории химии споры о редукционизме как возможности и законности сведения химического знания к физико-математическому возникали дважды: в период с XVIII по XIX в. как попытке сведения химии к классической механике и в начале XX в. в связи с зарождением квантовой механики и квантовой химии и дальнейшего сведения химии к квантовой механике. Дебаты о возможности или невозможности редукции химии к квантовой механике продолжаются по настоящий день. Основной вопрос заключается в том, редуцируются ли классические концепции химии к физике или нет. С этой целью рассмотрим гносеологический редукционизм как сведение химических концепций к физическим, проанализируем философские позиции по этой проблеме и ответим на этот вопрос. Философско-методологическим ориентиром в этом исследовании будет выступать концепция редукции Э. Нагеля, именно она из всех редукционистских концепций больше всего подходит к анализу соотношения между физикой и химией, поскольку учитывает: 1) связь между понятийными аппаратами этих наук, 2) возможность постулирования утверждений, связывающих понятия этих наук, если их концептуальные аппараты неоднородные, т.е. между теориями должны быть структурные взаимосвязи в виде правил соответствий, соединяющих термины редуцирующей и редуцируемой теорий; 3) логическую выводимость редуцируемой науки из первых принципов редуцирующей науки. Главным у Э. Нагеля был математический анализ как связующее звено между теориями, который неявно определял и объяснял термины редуцируемой теории [2. Р. 354–366].

К достоинствам этой модели редукционизма относится анализ структуры научного знания, объяснение

понятий одной теории в рамках другой и прогрессивное развитие науки в результате замены менее совершенной теории на более совершенную, в отличие, например, от моделей науки, построенных на аналогиях и конвенциях между теориями.

Логико-исторический контекст появления концепции редукционизма Э. Нагеля

Традиционно редукционизм был связан с различными видами позитивизма (махизм, энергетизм Оствальда, логический позитивизм), философы этого направления стремились с помощью механических объяснений физики обосновать макроскопические явления объективного мира, поэтому естествознание должно было быть сведено к физике. Не случайно ареной борьбы была теория атома, позитивисты отрицали существование атомов, считая их ненаблюдаемыми метафизическими сущностями, сама же атомистическая теория была антиредукционистской.

Теорию атома поддерживало научное сообщество, в химии интересы столкнулись в области новой науки – химической термодинамики, и такие крупные ученые, как Вант-Гофф, Ван-дер-Ваальс и Больцман, заняли антиредукционистскую позицию по отношению к энергетизму Оствальда, который считал атомно-молекулярное учение умозрительным и полагал, что все проблемы химии (валентность, химическую связь, реакционную способность) можно свести к феноменологическим описаниям физики с позиции энергетизма. Против этого выступил Н. Больцман, который считал эти взгляды неприемлемыми для химии и связывал возможность немеханического объяснения химических явлений с атомистической теорией [3. С. 187–201].

Дальнейшие работы Ж. Перрена по дискретности материи (экспериментально доказал, что катодные лучи имеют корпускулярную природу и подтвердил теоретические выводы Эйнштейна об атомарной природе броуновского движения в жидкостях), а также работы Эйнштейна в области фотоэффекта и получение изображений атомов с помощью сканирующего туннельного микроскопа, убедили научное сообщество в существовании атомов. Позитивистский редукционизм в его старом значении, когда макроскопические явления объяснялись с помощью теорий классической физики, стал не нужен. Атомистическая теория стала общепринятой.

Но редукционизм никуда не исчез из химии, он просто изменил свой смысл. Строение молекул и макроскопические явления в химии стали объяснять с помощью новой науки – микрофизики. Новый редукционизм на основе квантовой механики утверждал, что химический уровень организации материи – это молекулы, и каждая молекула есть индивидуальная квантово-химическая система, состоящая из ядер и электронов, а химическое взаимодействие объясняется перестройкой электронных оболочек электронов и ядер реальных атомов. Поэтому для решения химических проблем нужен был квантово-механический подход. Химическое знание должно было получить физико-математическую интерпретацию, и химия становилась подразделом квантовой механики.

Против онтологической редукции (выведение свойств высших сущностей из низших, в нашем примере химические свойства молекул выводятся из движения и свойств атомов, таким образом, химическая онтология производна от физической, именно такую позицию занимает физикализм) выступил приверженец аналитической философии Э. Нагель. Он поставил вопрос о редукции в «плоскость» знания – не нужно проверять, можно ли вывести природу одних сущностей из других, а надо анализировать логические связи между двумя теориями – редуцирующей и редуцируемой, поскольку мы сами создаем представления об этих сущностях с помощью разных теорий [4. С. 145].

У Э. Нагеля вопрос о редукции был эпистемологическим, и он говорил об эпистемологической редукции – выводе одной теории из другой по правилам дедукции, выступая с позиции концептуализма. Он также считал, что его модель редукции может быть успешно применена в химии. Рассмотрим ее применимость более подробно.

Лингвистические ограничения и внутренние границы химии

Э. Нагель считает, что понятийный аппарат сводимой и сводящей теорий должен быть идентичен по смыслу. Однако при сведении языка химии к физике есть лингвистические ограничения, которые связаны со своеобразием символического и образного языка химии, который не сводится к языку физики.

Язык химии – это химическая символика, представлен в виде знаковых моделей, среди которых есть молекулярные структуры, которые могут воспроизводиться с помощью различных альтернативных способов изображения. Одна и та же молекула может иметь трехмерное изображение, двухмерное (плоскостное) или линейное. Молекула может быть записана с помощью брутто-формулы, структурной, стереохимической, электронной или резонансных структурных формул. Каждая формула имеет определенное семантическое содержание. Между этими формулами существуют логические связи. Так, структурная формула должна соответствовать брутто-формуле, а трехмерная модель молекулы – структурной формуле. В то же время этот язык является формальным, поскольку он состоит из различных символов и знаков, например, структурная химическая формула бензола состоит из символов химических элементов углерода и водорода, знаков двойной связи, означающих электронные пары, связывающие атомы элементов. Понятие ароматичности демонстрируется сплошной линией в бензольном кольце, что означает непрерывное распределение электронной плотности в молекуле. Символы и знаки являются структурными единицами формул, они подлежат дальнейшему формальному преобразованию в химических реакциях, которые потом еще раз подвергаются формализации, так, например, в них могут стрелками отображаться смещение электронов в молекуле, последовательность превращений, точками – взаимодействие между электронами химических связей одних

молекул и электронами других молекул, образующих переходные комплексы химических соединений.

Химический язык очень содержательный и чувственно-образный, менее абстрактный, чем язык физики. Он подчиняется набору синтаксических правил, основанных на определенных эмпирических химических законах, правила логически обосновывают этот язык, и этот язык становится очень мощным, он может предсказывать существование химических соединений, которые никогда не были получены ни в одной лаборатории. Химический язык подпитывается эмпирическими исследованиями, неразрывно с ними связан, он обеспечивает целостность химии, направляет все исследования в одно русло. Математический язык физики (волновые функции квантовой механики) может использоваться химией, но при этом он становится подразделом химии, не смешиваясь с ее языком [5. Р. 45–50].

Структурные и многие другие перечисленные выше формулы дают ограниченное знание о состояниях, возникающих в результате конформационного движения, об активированных комплексах, лабильных агрегатах, образующихся в результате взаимодействия с другими молекулами, квазимолекулярных образованиях, но они есть всего лишь модели, не учитывающие множество факторов, поэтому способность предвидения результатов химических процессов ограничена и существуют внутренние границы химии. Появление различных факторов и аномалий, препятствующих химическим прогнозам, становится впоследствии движущей силой химических открытий. Химик, обнаруживая аномалии в реакционной способности веществ, в физико-химических свойствах или в спектроскопических характеристиках чистых химических соединений, получает новые эмпирические факты, свидетельствующие об иной внутренней организации молекул по сравнению с тем, что он допускал до этого, он предполагает иные структурные формулы, согласующиеся с опытом. Предсказательная способность химии возрастает из-за обнаружения аномальных свойств и неудач, а внутренние границы химии, связанные с неточностью и ограниченностью ее понятий и моделей, начинают расширяться [6. Р. 25–28]. Химия не только постоянно расширяет возможности своего языка, но и совершенствует его в рамках своих концептуальных систем, открывая все новые виды химических соединений.

Язык химии сложился в химической практике, в химическом синтезе, и без смысловых потерь его нельзя перевести на язык квантовой химии. Так, R. Hoffman пишет, что многие понятия химии являются неточными и ограниченными (ароматичность, стерические эффекты, функциональные группы), и при сведении их к математическому языку физики они просто исчезают [7. Р. 1597]. Математика в химическом языке играет незначительную роль, в основном язык представлен качественными и полуквантитативными понятиями. Химические формулы нельзя свести к теореме, дедуцируемой из общих принципов квантовой механики. Тем не менее язык химии – это формальный язык, логически и эмпирически обоснованный, но он не сводится к языку физики.

Своеобразие, уникальность и самостоятельность концептуальных систем химии и невозможность их дедуктивного выведения из физики

Концептуальные системы химии (учение о составе, структуре, классификации) являются замкнутыми системами понятий, они исторически развивались отдельно от квантовой физики и математически не выводятся из ее основных принципов. Основным аргументом против невозможности дедуктивного выведения понятий химии из теорий физики является следующий факт: для того, чтобы проводить квантово-физические расчеты из «первых принципов», сначала надо написать структурную формулу, установленную на основе различных химических данных, и только потом делать заключения о структуре и свойствах молекул, исходя из квантовых приближений. Только химические данные могут указать, какое из приближений является достоверным. Поэтому существуют внутренние границы физики.

Наборы концепций и понятий химии являются уникальными, например, среди таких концепций есть такие понятия, как кислотность, основность, химический потенциал, функциональная группа. В физическом языке таких понятий нет [8. Р. 147–165]. Это означает, что теории химии и квантовой механики находятся в разных масштабах, если же объект одной науки измерять в масштабе другой, то можно упустить то, что можно увидеть в рамках редуцируемой науки. Например, квантовая механика так и не смогла объяснить природу химической связи и валентность, которые до сих пор не потеряли объяснительное значение для химии.

В сложной структуре эмпирического химического знания присутствует целая иерархия различных структурных и динамических моделей химии, эмпирических правил и законов, построенных с помощью индукции. В этой структуре существует также множество правил соответствия и корреляционных зависимостей. Эта сложная структура порождается не только совершенствованием измерительной техники и появлением новых экспериментальных методов исследований, но и развитием самих концептуальных систем химии, в рамках которых появляются и осмысливаются новые эмпирические факты и представления о многообразии химических соединений и химических связях [9. С. 34–35].

Наиболее показательной в плане редукционизма является органическая химия, в ней исторически сложилась разветвленная сеть структурных теорий, эмпирических законов и корреляционных уравнений, их логическим каркасом выступала электронная теория. Свести концепты электронной теории к квантовой механике не представляется возможным в силу того, что нет квантовых аналогов концептам электронной теории. Кроме того, в теориях органической химии зародилось учение о молекуле, которое объяснило химическую организацию веществ на микроскопическом уровне и сделало возможным химический синтез, что позволяет создавать молекулы с заранее заданными свойствами. О. Нігоfumi говорит, что квантовая механика на основе своих представлений не может управлять

ходом химических реакций и создавать вещества с заранее заданными свойствами, ее выводы относятся только к ограниченному классу экспериментов [10. Р. 156].

J. Schummer выделяет в структуре химического знания концептуальное ядро, которое отличается от ее междисциплинарных и прикладных областей и называет его когнитивной архитектурой химии. Ядро содержит систематизированные экспериментальные химические данные, системы химической классификации, учение о составе, позволяющее уточнять виды химических соединений и теоретическую основу химии – учение о структуре. Именно это концептуальное ядро сопротивляется редукционизму как сведению химического языка и концептов химии к физике [11. Р. 129–132].

Если обратиться к истории химии, считает J. Schummer, то химия как наука о превращении веществ всегда занималась поисками инвариантов в изменении свойств веществ и стремилась описать разнообразие веществ как можно более точно и полнее, абстрагируясь от их первичных качеств (формы, размера), не доходя до широких предельных метафизических обобщений в виде учения о материи. Наборы понятий о химических веществах и химических соединениях представляют собой системы классификаций в химии, причем каждое из этих понятий проводит различие в свойствах веществ и является логически независимым от других понятий. Эти понятия о веществах и их свойствах шаг за шагом выводились индуктивно из химического опыта и путем его дальнейшего логического обоснования с помощью атомистической гипотезы и концепций о составе и структуре.

Примером невозможности дедуктивного выведения понятий химии из физики служат химические классификации. Так, классификация химических элементов Дж. Дальтона не могла быть выведена дедуктивно из механики И. Ньютона. Для классической механики все атомы были одинаковыми по своим свойствам, химия же отстаивала индивидуальность атомов и занимала реалистическую позицию в этом вопросе. Именно Дж. Дальтон положил начало революции в химии, когда стал утверждать, что химические элементы состоят из атомов, а атомы одного и того же элемента имеют одинаковый вес. Он стоял на реалистической позиции, когда утверждал, что химические элементы реально существуют, а атомы и есть та неизменная основа, которую ищут химики, поскольку они сохраняются в химических реакциях. Дж. Дальтон экспериментально определил относительные атомные веса химических элементов по отношению к атому водорода и построил классификацию химических веществ, которую логически обосновал на основе своего учения о различиях между простыми и сложными атомами и эмпирического закона кратных соотношений.

Классификация Дж. Дальтона была выведена последовательно из атомистической гипотезы, которую приняла механика И. Ньютона, путем ее индуктивной дифференциации и введения в нее новых химических представлений об элементах и атомных весах, и дальнейшей их эмпирической проверке [12. С. 164]. Поэтому понятия об элементах, о простых и сложных веществах, закон простых кратных соотношений, т.е. вся

концептуальная основа его классификации, дедуктивно не выводится из классической механики. Вот почему Дж. Дальтон называл свою систему философии химической, а не физической.

Ограничения концептуальной редукции

Концептуальная редукция означает сведение смыслов химических понятий к физическим. Рассмотрим и суммируем аргументы против нее.

По мнению многих философов химии, концептуальная редукция по Э. Нагелю вызывает скепсис, поскольку невозможна в силу индуктивной природы химических понятий, например, смыслы понятий состава, молекулярной структуры, валентности выражаются только на языке химии, поэтому есть концептуальный барьер между квантовой механикой и химией. Редукция по Э. Нагелю невозможна потому, что под математические структуры квантовой механики нельзя подвести все химические понятия о связях, химических структурах, окислительно-восстановительных числах, валентности, т.е. весь химический концептуальный аппарат, который по смысловому содержанию гораздо богаче физического [13. Р. 23–39].

Если рассматривать дальше редукцию химии к квантовой механике, то можно выделить еще такие ограничения в сводимости одной науки к другой:

– концептуальные проблемы квантовой физики. Ее многие понятия: корпускулярно-волновой дуализм, принцип неопределенностей, коллапс волновой функции, принцип запрета Паули, правило Хунда, составляющие концептуальный базис редуцирующей теории, до сих пор до конца не определены и вызывают постоянные споры [14. Р. 75–83];

– химические представления могут неявно подводиться под законы квантовой механики. Иллюстрацией такого неявного включения химической информации в уравнение Шредингера, с целью квантово-механического определения структуры, может служить следующий пример. В квантовой физике структура молекулы есть математическое понятие. Она понимается как полная волновая функция или произведение двух независимых волновых функций, описывающих движение электронов и ядер, они рассчитываются отдельно друг от друга, путем решения двух различных уравнений Шредингера. В этом определении структуры не учитываются взаимодействия между ядрами молекулы, т.е. на нее накладывается приближение Борна – Оппенгеймера. Это приближение уже вносит в уравнение Шредингера информацию о том, что у молекулы есть структура, и такая информация могла быть получена только химическим путем из представлений классической химии, т.е. теория более высокого уровня (химия) использовалась для определения понятия теории более низкого уровня (физики) [15. Р. 373];

– приближения, которые вводятся в квантовую механику с целью определения химических понятий. Так, V. Seifert считает, что квантовая физика не может дать определение химической структуры, и это бессилие связывается с приближением Борна – Оппенгеймера, которое следует из проблемы измерения в квантовой

механике. Приближение Борна – Оппенгеймера используется для распознавания молекулярной структуры, без этого молекула как квантовая система находится в суперпозиции квантовых состояний относительно измерительного прибора. Так, например, в состоянии суперпозиции могут находиться различные структуры оптических изомеров, но в момент измерения происходит коллапс волновой функции и наблюдается только одна структура. При этом полагается, что квантово-механическое описание всех изомеров является полным, но наблюдается только одна структура, поэтому распознавание структуры молекулы является проблемой измерения. Это демонстрирует неспособность идентифицировать структуру молекулы из «первых принципов» квантовой механики [16. Р. 29–30].

Количественная редукция и применение ЭВМ

Количественная редукция означает расчет химических свойств на основе физических теорий, в частности квантовой механики, когда делается расчет электронных свойств молекул небольших размеров и небольших молекулярных систем на основе неэмпирических методов Хартри – Фока в приближении МО ЛСАО (теория молекулярных орбиталей как линейная комбинация атомных орбиталей) и метода теории функционала плотности. Неэмпирические методы позволяют вычислять не только геометрические и энергетические (отсюда выход к механизмам реакций) характеристики молекул, но и изучать влияние структурных особенностей молекул на их свойства, взаимное влияние атомов в молекуле, раскрывать причины реакционной способности молекул [17. С. 645].

Эти расчеты позволяют не обращаться к эмпирическим данным и довольно хорошо предсказывают свойства молекул. Конечно, эти методы не дают точного решения уравнения Шредингера, только в рамках своих приближений, точность решений зависит от применяемых базисных наборов волновых функций, но использование компьютерных программ с большими базисными наборами, которые обеспечивают выход на хартри – фоковский предел, и применение компьютеров с большими мощностями позволяет сокращать затраты машинного времени на расчеты, а учет электронных корреляций повышают их точность. Однако расчет сложных химических многоатомных соединений вынуждает исследователя идти на компромисс между затратами машинного времени и точностью расчета [18. С. 336].

Сегодня, в связи с развитием спутниковых систем и появления методов обработки больших данных, увеличения мощности и точности современных компьютеров, позволяющих делать довольно точные эмпирические прогнозы в химии, и учет того, что приближения к уравнению Шредингера не имеют существенных значений для небольших атомов и несложных молекулярных систем, происходит настоящий квантовый бум в химии. Поэтому многие химики возлагают надежды, что новые компьютеры обеспечат успех количественного подхода в квантовой химии. Например, E. Scerri

считает, что «мы находимся на пути к редукции» [14. Р. 78], хотя пока количественная редукция далеко не достигнута.

Однако редукция с помощью неэмпирических методов не достигается в силу ряда причин: сложности химического объекта – молекулы, а это влечет приблизительность вычислений, следующими причинами являются несовершенство современных квантовых компьютеров и ограниченность математического метода, требующего строгой дедуктивной логики и ограниченного числа аксиом – «первых принципов».

Так, неэмпирические методы квантовой химии позволяют рассчитывать на классических компьютерах геометрические характеристики молекул довольно точно – от восьми до десяти атомов химических элементов, однако сложность этих расчетов растет с добавлением каждого нового электрона в атом химического элемента, и точность расчетов понижается в связи с введением приближений. Ситуацию пытаются исправить путем создания и применения мощных квантовых компьютеров, но есть естественные ограничения создания таких компьютеров, они должны состоять из нескольких тысяч кубитов, при этом сами кубиты являются крайне нестабильными и чувствительными элементами, реагируют на окружающую среду, что приводит к ошибкам в вычислениях. В этом случае идут по пути сокращения квантово-логических операций и сокращают число квантово-вычислительных блоков, и часть расчетов ведут на классических компьютерах. Быстродействие квантовых компьютеров значительно по сравнению с классическими, они используют квадратичное или полиномиальное разложение чисел на множители, экспоненциальное применяется крайне редко для решения определенных химических задач. Квантовые компьютеры в большинстве случаев превосходят классические компьютеры по мощности и быстродействию, но все дело заключается в применяемых алгоритмах вычислений, которые в ряде случаев сравнимы с классическими. Самые передовые квантовые компьютеры демонстрируют порядок логических ошибок десять в минус третьей степени, а классические полупроводниковые – десять в минус двадцатой степени, очевидно, что путь к такой точности вычислений у квантовых компьютеров будет весьма длительным [19]. Поэтому особых прорывов в области неэмпирических методов, использующих квантовые компьютеры, пока не наблюдается. Прорыв в отдельных областях химии наблюдается только тогда, когда используется весь комплекс квантово-химических методов – неэмпирических, полуэмпирических и эмпирических, но в большинстве случаев для расчета многоэлектронных атомов их точность становится сомнительной, во многих случаях они не верифицируются эмпирическими данными.

Бессилие численных методов в расчете сложных молекулярных структур ставит как теоретическую проблему химии – объяснения организации пространства в этих структурах, так и философскую – как сопряжено внутреннее локальное пространство моле-

кулы с внешним трехмерным пространством макромира [20. С. 137]. Копенгагенская трактовка квантовой механики избегает решения этой проблемы, она вводит коллапс волновой функции как постулат для практических целей, чтобы избежать применения квантовой механики к макроскопическим объектам.

Отметим, что в основе количественной редукции химии к физике лежит физический фундаментализм, заключающийся в том, что в основе всех наук – фундаментальные законы физики и все можно сосчитать, в том числе и с помощью ЭВМ. Против фундаментализма выступал Г.А. Скоробогатов. Он проводил аналогию Вселенной (в видимой ее части содержится примерно 10^{90} атомов) с ЭВМ, которая делает одну операцию за 10^{-17} секунд, эта гигантская ЭВМ за все время своего существования смогла бы сделать не более не более 10 125 операций или имела бы не более 10 125 ячеек памяти, которых бы не хватило, чтобы записать и рассчитать волновую функцию, охватывающую все частицы Вселенной [21. С. 160–161]. То есть есть естественные ограничения создания супермощных компьютеров.

Количественная редукция и правила соответствия Э. Нагеля

Э. Нагель утверждает, что научная теория кроме абстрактного исчисления содержит еще правила соответствия, которые связывают неоднородные концептуальные аппараты редуцируемой и редуцирующей теорий (химии и квантовой механики). Это – важный момент в его теории редукции. Что же является правилом соответствия между классической химией и квантовой механикой, использующей неэмпирические методы расчета молекул?

В основе неэмпирических методов расчета свойств молекул лежит уравнение Шредингера, из которого с приближениями Борна – Оппенгеймера и Хартри – Фока дедуцируются абстрактные математические уравнения, под которые подводится естественно-научное содержание, т.е. в итоге дедуцируются различные понятия, например, энергия связей между атомами в молекуле, валентный угол молекулы, энергия атома. Эти понятия имеют решающее значение для химии, например, используются для определения структурных характеристик молекул и их реакционной способности [22. С. 162–163].

Уравнение Шредингера связывает понятийный аппарат физики (понятие электрона, его координат в пространстве, полную энергию квантово-физической системы) с математическими абстракциями (волновыми функциями, операторами Лапласа и Гамильтона, которые обозначают математические действия над волновыми функциями) и с помощью дальнейшего математического расчета связывают волновые функции с концептами химии. Решением уравнения Шредингера является базисный набор волновых функций или атомных одноэлектронных орбиталей (АО). Отметим, что понятие АО лишено физического смысла, так как нет критериев для нахождения АО, существуют только расчетные методы, поэтому поня-

тие АО является математическим. Как перейти от математического выражения АО к описанию молекулы через атомы и химические связи, которые использует химия?

Для этого используется правило соответствия Э. Нагеля или матрица заселенностей. Анализ заселенностей АО (например, математический метод Малликена) выявляет распределение электронов по атомным вкладам, т.е. по химическим связям, при этом физическое понятие заселенности отождествляется с химической связью. Во многих случаях такое отождествление ведет к концептуальному разрыву между понятиями физики и химии. Так, понятие химической связи и молекулы как самостоятельной сущности с локализованными связями теряет смысл при квантово-химическом описании. Смысл понятия заселенности АО – это локализованная химическая связь, электрон понимается как волна и может находиться в любой точке пространства вблизи атомного ядра, его поведение описывается одноэлектронной волновой функцией (АО). Получается, что нет полных квантовых аналогов для понятий химии, и правило соответствия Э. Нагеля не соблюдается. Квантовая физика некорректно использует понятие химической связи, вкладывает в нее другой смысл, поэтому и не происходит достижения полной лингвистической однородности понятий в физике и химии как одного из требований Э. Нагеля.

Концептуальный разрыв между понятиями физики и химии приводит к тому, что в центр отношений между этими науками ставится не редукция, а интерпретация теоретических понятий химии с помощью квантовой физики [23. С. 44]. Когда происходит разрыв, то квантовая физика выступает как интерпретационная теория для химии, и химия начинает обогащать свои понятия, например, представления о молекулярной структуре, например, учитывает конфигурационное взаимодействие в рамках вычислительных моделей Хартри – Фока, принимающее во внимание отталкивание электронов в ионной связи и смешанные электронные состояния с более высокой энергией, что позволяет в дальнейшем оценить стабильность молекул, трактуя химическую связь с энергетической точки зрения. Интерпретация химических понятий с помощью квантовой физики позволяет ей более точно предсказывать пути химических реакций, например, как квантовое туннелирование влияет на пути реакций различных изомеров [24].

В приведенном выше примере редукции негомогенного типа (словари физики и химии отличаются друг от друга) связующим мостиком между математическими представлениями физики и химии выступает понятие матрицы заселенностей, однако, ее введение не приводит к «гомогенизации» словарей, так как матрица представляет собой математическую гипотезу, утверждающую, что ситуация, обозначаемая ее теоретическим выражением «В» с помощью квантовой физики, вовсе не приведет к ситуации «А» в теоретической химии.

Это всего лишь достаточное условие для приведения в соответствие семантики понятий физики и химии

по Л.Б. Баженову [25. С. 193]. Здесь квантовая механика выступает не как связывающий закон в виде эквивалентности (распределение электронов по атомным связям \equiv химическим связям), а в виде импликации (если электроны распределяются по атомам, то это химическая связь). И эта физико-математическая гипотеза, приобретающая химический смысл, должна еще пройти эмпирическую проверку на всех типах связей в химии, что встречает затруднения. Такая проверка восходит к онтологическому убеждению, что свойства микромира влияют на свойства макромира, и между ними есть причинная связь. Таким образом, концептуальная редукция неизбежно влечет за собой онтологическую редукцию.

О том, как онтологическая редукция привносится в эпистемологию и препятствует редукции химии к физике, Д.П. Суровягин полагает, что большая часть проблем редукции привносится в эпистемологию из-за некорректной интерпретации понятий, в результате возникает смешение онтологического и эпистемологического аспектов редукции [26. С. 135]. С этим можно согласиться, но эти проблемы возникают еще и вследствие своеобразия математического метода изучения квантовых объектов и квантовой методологии в химии, и тогда редукция не сводится к решению только языковых проблем.

В основе математического метода анализа заселенностей лежит принцип соотношения части и целого. Электронная плотность молекулы (целое) распределяется между частями – атомами и орбиталями, при этом полагают, что свойства целого редуцируются к свойствам частей. Однако электронная плотность у атома, на которой центрируется какая-либо АО, меняется при образовании химической связи, но при этом не учитываются изменения всей электронной плотности молекулы, т.е. не учитывается принцип целостности молекулы как квантово-химической системы, требующий структурной организации бытия и его единства. Получается, что концепты физики не обладают полнотой, поскольку в квантовой механике не учитывается принцип целостности. Химия, наоборот, трактует молекулу как целостность и самостоятельную единицу бытия. Так онтологические представления о молекуле привносятся в различные эпистемологические трактовки понятий о молекуле в физике и химии, что препятствует сведению концептов химии к квантовой физике.

Теперь о своеобразии квантовой методологии. Квантово-физическая трактовка электрона и молекулы вводит представление об электроны как волне, а квантовое состояние объекта определяется его измерением: до измерения квантовый объект находится в когерентном (чистом) состоянии, в момент измерения – в смешанном, измерение с помощью макроскопического прибора разрушает исходное когерентное состояние. Знание о чистом состоянии вычисляется с помощью матрицы плотности, составляемой из значений волновых функций, полученных в результате измерений. В когерентном состоянии частица существует реально, но в момент измерения, когда в результате коллапса волновой функции нереализованные исходы измере-

ний в матрице плотности отбрасываются, частица переходит в смешанное состояние. Коллапсу волновой функции не соответствует ни одно реальное физическое событие. Математическое описание квантового объекта ставят его онтологию под вопрос, получается, что до измерения частица имеет свою онтологию, но в момент измерения – нет [27. С. 66–67]. Неопределенный онтологический статус квантовых объектов в связи с примененной методологией также препятствует полной редукции химии к физике, поскольку ставит под сомнение смысловые значения квантово-физических понятий, связанные с проблемой измерения в этой науке.

Когда реальность квантовых объектов подвергается сомнению из-за математического аппарата и примененной методологии измерения, то на смену реализму приходит эмпиризм, который утверждает, что описания и объяснения в химии больше исходят не от квантово-физических трактовок объектов, математических описаний и правил дедуктивной теории, а от моделей, создаваемых эмпирическими методами химии и имеющих реальную онтологию, и только эти эмпирические модели дают правильное описание и объяснение того, что можно наблюдать [28. Р. 5]. Таким образом, против редукции Нагеля как объяснения фактов из дедуцирующей теории выступает эмпиризм.

Логическая ограниченность дедукции

Для редукции по Э. Нагелю требуется логическая выводимость законов и понятий из редуцирующей теории методом дедукции. Сторонники антиредукционизма обычно приводят контраргумент – теорему Геделя о неполноте арифметики. Эта теорема не связана непосредственно с химией, но ее выводы полезны для многих естественных наук, в том числе и для химии, и ее можно использовать как вывод об ограниченных познавательных возможностях всех аксиоматических систем, применяющих дедукцию. Редукционисты полагают, что из конечных принципов квантовой механики можно выводить с помощью дедукции любые химические свойства молекул, однако, это невозможно как в формальном, так и в содержательном плане. В формальном плане «первые принципы» должны быть представлены в виде системы аксиом, тогда будет построена строго дедуктивная система знания, из которой будут логически выведены частные количественные понятия химии. Но ни одна система аксиом не может охватить всю формализуемую область химического знания, она всегда является неполной (теорема Геделя о неполноте). Применение компьютеров не может решить эту задачу, поскольку все пакеты программ содержат расчетные методы, основанные на решении уравнения Шредингера, с помощью которого химия приводится к аксиоматической форме, и задача сведения химии к квантовой физике вновь попадает к в сферу действия теоремы Геделя о неполноте [29. С. 271–273].

Дедукция понятий из аксиом является логически несовершенной, так как математический метод включает приближения, идеализации, аппроксимации и интуитивные гипотезы, поэтому выводимость химиче-

ских понятий из уравнения Шредингера встречает затруднения, что ограничивает его применимость и снижает его точность в химии. В результате химические понятия упрощаются и наделяются иными смыслами. Кроме того, математик может применять различные алгебраические средства, существуют также элементы произвола в выборе математических средств, что понижает точность и осмысленность химических понятий, поэтому в содержательном плане редукция встречает языковые затруднения [30. С. 89–91].

Отметим еще роль математических средств и приближений в дедуктивном методе квантовой химии, которые приводят к разнообразным по смыслу понятиям о химической связи. Вторжение аксиоматических систем, алгебраических средств и математических формализмов из квантовой физики в химию привело к созданию квантовой химии, в которой до сих пор нет единой теории химической связи [31. С. 26–119]. Каждая модель химической связи, начиная от простейшей для атома водорода В. Гайтлера и Ф. Лондона и заканчивая теорией многоэлектронных систем Д.Р. Хартри и В.А. Фока, была связана с определенными алгебраическими средствами, выбранным формализмом и приближениями, поэтому давала разные онтологические представления о химической связи и создавала противоречивые по смыслу понятия. Например, представления Ф. Хунда и Р.С. Малликена заключаются в 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, а модель Хартри–Фока представляет ее как единое электронное облако (заряд), находящийся на определенном расстоянии от ядра. Вопрос о взаимодействии электронов и ядер до сих пор остается открытым. Вот почему аксиоматический метод в химии с его логически несовершенной дедукцией и выводением из аксиом физики понятий химии еще далек от совершенства.

В настоящее время в описаниях структуры теорий преобладает семантический подход, а не синтаксический, который раньше опирался на аксиоматический метод и дедукцию. В семантическом подходе (Суппес и ван Фраасен) редукция сосредоточивается на математических структурах и выполнении теоретико-множественных отношений, под которые подводится естественно-научное содержание, при этом аксиоматическая архитектура теорий сохраняется. Например, математические структуры нерелятивистской квантовой механики (математические представления о гильбертовом пространстве) становятся моделями аксиом, а сама теория – семейством моделей. Структура теории предстает как иерархия моделей. Этот подход является структуралистским и неонагелевским. Но это не меняет оценку редукционизма. Э. Нагель полагал, что должно быть также соответствие между редуцируемой теорией и экспериментом. В данном случае правилом соответствия выступают отношения гомоморфизма или изоморфизма между моделями эксперимента и моделями теории, теорией измерения и моделями эмпирических данных. Однако самым сложным является сопоставление моделей данных с самой реальностью. Про-

блемным является также подведение языка естественных наук под математические формализмы и аксиомы, а также дальнейшая верификация теоретических представлений [32. С. 117–118].

Заключение

В фокусе исследования была эпистемологическая концепция редукции Э. Нагеля по отношению к связи и выводимости химических понятий из физических. Она изучалась в трех аспектах: как связи между языком и концептами этих наук, как возможности установления структурных взаимосвязей этих наук в виде правил соответствий и как логической выводимости понятий химии из «первых принципов» физики.

По Э. Нагелю правила связи между понятиями физики и химии требуют тождественности смысла. Эти требования не выполняются в силу того, что есть лингвистические ограничения химии и замкнутость ее концептуальных систем, которые по смысловому содержанию гораздо богаче физического и не подводятся под формальный математический язык физики. Есть также концептуальные проблемы физики, введение приближений в квантовую механику и неявное подведение химических представлений под законы квантовой механики.

Невозможно также установить правила соответствия между неоднородными словарями физики и химии. На примере квантовой физики показано, что правилом соответствия выступает матрица заселенностей, представляющая собой числовые значения волновых функций, которые дедуцируются из уравнения Шредингера. Числовым значениям функций придается физический смысл химической связи как делокализации электронного облака в атоме, что противоречит представлениям классической химии о связи как локализованной электронной паре между атомами. Понятия химии о связях, валентных углах и дипольных моментах подводятся под математические значения волновых функций, и им придается иной смысл, чем в химии, многие понятия химии при этом исчезают. Это приводит к концептуальному разрыву между понятиями математической физики и химии, и теоретические понятия химии получают другую интерпретацию в физической теории.

Последним ограничением редукции химии к физике является невыполнимость дедуктивного выведения понятий химии из теорий физики, это было продемонстрировано на примерах, иллюстрирующих попытки выведения классификации химических элементов Дж. Дальтона из классической механики и понятий химии из квантовой физики. Дедукция включает различные приближения и математические допущения, поэтому нет полных квантовых аналогов понятиям химии. Дедукция требует также приведения химии к аксиоматической системе, что принципиально невозможно, поскольку химия исторически сложилась как индуктивная система знания, в ней присутствуют качественные понятия, а не количественные. Аксиоматизация химии привела к созданию квантовой химии, в которой существуют различные физико-математические модели химической связи, имеющие разные онтологии, поэтому в ней существуют разнообразные представления о химической связи и нет единых методов расчета характеристик молекул. Успех в этой области возможен только из-за плюрализма неэмпирических, полуэмпирических и эмпирических методов.

Количественные расчеты в химии, основанные на дедукции физико-химических свойств молекул из уравнения Шредингера, могут успешно применяться лишь к небольшим молекулам, где приближения невелики, а применение квантовых компьютеров для расчета больших молекул не оправдывают надежды химиков, поскольку есть естественные ограничения создания супермощных квантовых компьютеров и относительная эффективность алгоритмов, сравнимая с вычислениями на классических компьютерах. Поэтому количественные расчеты в квантовой химии не могут заменить классические объяснительные схемы химии, и химики продолжают опираться на свои представления, такие как электронные пары, теория отталкивания электронных пар валентной оболочки.

Редукция, на наш взгляд, представляет собой упрощение химии, поскольку она не может охватить всех ее представлений и концептов, смысловое содержание которых гораздо богаче физических понятий. Нет в истории химии примеров тому, что редукция как вывод законов редуцируемой теории из законов или принципов редуцирующей теории в духе Э. Нагеля была бы полностью успешной.

Список источников

1. Cat J. The unity of science. The Stanford Encyclopedia of Philosophy / Zalta E.N. (ed.). URL: <https://plato.stanford.edu/archives/spr2022/entries/scientific-unity/>
2. Nagel E. The Structure of Science: problems in the logic of scientific explanation. London : Routledge, 1961. 618 p.
3. Спиридонов О.П. Людвиг Больцман. Жизнь гения физики и трагедия творца. 2-е изд. М. : URSS, 2014. 232 с.
4. Seifert V. Chemistry's Metaphysics. Elements in Metaphysics. Cambridge : Cambridge University Press, 2023. 86 p.
5. Claus J. Analysis and synthesis – interdependent operations in chemical language and practice // HYLE – International Journal for Philosophy of Chemistry. 2001. Vol. 7, № 1. P. 31–50.
6. Tontini A. On the Limits of Chemical Knowledge // HYLE – International Journal for Philosophy of Chemistry. 2004. Vol. 10, № 1. P. 23–46.
7. Hoffman R. Under the surface of chemical Article // Angewandte Chemie (International Edition in English), 1988. Vol. 27. P. 1593–1602.
8. Van Brakel J. Philosophy of Chemistry: between the manifest and the scientific image. Leuven : Leuven University Press, 2000. 246 p.
9. Четчина И.И. Философия науки и техники: учебное пособие. Казань : КНИТУ, 2018. 160 с.
10. Hirofumi O. The Logical Structure of Organic Chemistry and the Empirical Adequacy of the Classical Concept of the Molecule // HYLE – International Journal for Philosophy of Chemistry. 2013. Vol. 19, № 2. P. 139–160.
11. Schummer J. The Chemical core of chemistry I: a conceptual approach // HYLE – International Journal for Philosophy of Chemistry. 1998. Vol. 4, № 2. P. 129–162.
12. Кедров Б.М. Три аспекта атомистики : В 3 т. Т. 2: Учение Дальтона. М. : Наука, 1969. 319 с.
13. Scerri E. Macintyre L. Philosophy of Chemistry: growth of a new discipline. Boston : Boston University, 2015. 306 p.
14. Scerri E. The Ambiguity of Reduction // HYLE – International Journal for Philosophy of Chemistry. 2007. Vol. 13, № 2. P. 67–81.

15. Hendry R. Reduction, Emergence and Physicalism // Hendry R., Needham P., Woody A. (Eds.) *Philosophy of Chemistry*. Amsterdam : Elsevier, 2012. P. 367–386.
16. Seifert V. The strong emergence of molecular structure // *European Journal for Philosophy of Science*. 2020. Vol. 10, № 3. P. 1–25.
17. Степанов В.Н., Нестеров И.А. Применение неэмпирических методов квантовой химии для определения внутримолекулярных эффектов взаимодействия заместителей // *Известия Самарского научного центра РАН. Серия: Химия и химическая технология*. 2006. Т. 8, № 3. С. 645–651.
18. Ермаков А.И. Квантовая механика и квантовая химия : В 2 ч. Ч. 2: Квантовая химия : учеб. и практикум для вузов. М. : Юрайт, 2025. 402 с.
19. Белоус М. Блеск и нищета квантовых вычислений. URL: <https://3dnews.ru/1072773/blesk-i-nishcheta-quantovih-vichisleniy/page-1.html>
20. Герасимова И.А. Философия химии: мнение эпистемолога // *Эпистемология и философия науки*. 2012. Т. XXXIV, № 4. С. 130–150.
21. Skorobogatov G.A. Где искать фундаментальные законы / На перекрестках химии / Под ред. Р.В. Богданова. Л. : Изд-во ЛГУ, 1980. С. 148–165.
22. Печенкин А.А. Проблема редукции химии к физике: диалектика и аналитическая философия // *Эпистемология и философия науки*. 2014. Т. XL, № 2. С. 157–173.
23. Четкина И.И. Интерпретация в теоретической химии (на примере квантовой химии и классической теории строения) // *Философская мысль*. 2021. № 12. С. 43–53.
24. Cláudio M., Roque J., Doddipatla S., Wood S.A., McMahon R.J., Fausto R. Simultaneous tunneling control in conformer-specific reactions // *Journal of the American Chemical Society*. 2022. Vol. 144 (45). P. 20866–20874.
25. Баженов Л.Б. Структура и функции естественнонаучной теории. М. : Наука, 1978. 232 с.
26. Суровягин Д.П. Объяснительная модель редукции: эпистемологический и онтологический аспекты // *Философская мысль*. 2018. № 12. С. 128–142.
27. Канке В.А. История и философия химии : учеб. пособие. М. : НИЯУ МИФИ, 2011. 232 с.
28. Van Fraassen Bas C. *Scientific representation: paradoxes of perspective*. Oxford : Oxford University Press, 2010. 408 p.
29. Курашов В.И. История и философия химии : учеб. пособие. М. : КДУ, 2009. 608 с.
30. Четкина И.И. Границы познания математического метода (на примере квантовой химии) // *Вестник Московского государственного областного университета. Серия «Философские науки»*. 2021. № 3. С. 84–92.
31. Дмитриев И. С., Семенов С. Б. Квантовая химия – её прошлое и настоящее. Развитие электронных представлений о природе химической связи. М. : Атомиздат, 1980. 160 с.
32. Четкина И.И. Связь математики и логики в структуре аксиоматизированных и формализованных теорий // *Философская мысль*. 2023. № 12. С. 109–120.

References

1. Cat, J. (2022) The unity of science. In: Zalta, E.N. (ed.) *The Stanford Encyclopedia of Philosophy*. [Online] Available from: <https://plato.stanford.edu/archives/spr2022/entries/scientific-unity/>
2. Nagel, E. (1961) *The Structure of Science: problems in the logic of scientific explanation*. London: Routledge.
3. Spiridonov, O.P. (2014) *Lyudvig Bol'tsman. Zhizn' geniya fiziki i tragediya tvortsa* [Ludwig Boltzmann: The Life of a Physics Genius and the Tragedy of a Creator]. 2nd ed. Moscow: URSS.
4. Seifert, V. (2023) *Chemistry's Metaphysics. Elements in Metaphysics*. Cambridge: Cambridge University Press.
5. Claus, J. (2001) Analysis and synthesis – interdependent operations in chemical language and practice. *HYLE – International Journal for Philosophy of Chemistry*. 1 (7). pp. 31–50.
6. Tontini, A. (2004) On the limits of chemical knowledge. *HYLE – International Journal for Philosophy of Chemistry*. 1 (10). pp. 23–46.
7. Hoffman, R. (1988) Under the surface of chemical Article. *Angewandte Chemie (International Edition in English)*. 27. pp. 1593–1602.
8. Van Brakel, J. (2000) *Philosophy of Chemistry: Between the manifest and the scientific image*. Leuven: Leuven University Press.
9. Chechetkina, I.I. (2018) *Filosofiya nauki i tekhniki* [Philosophy of Science and Technology]. Kazan: Kazan National Research Technological University.
10. Hirofumi, O. (2013) The logical structure of organic chemistry and the empirical adequacy of the classical concept of the molecule. *HYLE – International Journal for Philosophy of Chemistry*. 2 (19). pp. 139–160.
11. Schummer, J. (1998) The chemical core of chemistry I: a conceptual approach. *HYLE – International Journal for Philosophy of Chemistry*. 2 (4). pp. 129–162.
12. Kedrov, B.M. (1969) *Tri aspekta atomistiki* [Three Aspects of Atomistic]. Vol. 2. Moscow: Nauka.
13. Scerri, E. & Macintyre, L. (2015) *Philosophy of Chemistry: Growth of a new discipline*. Boston: Boston University.
14. Scerri, E. (2007) The ambiguity of reduction. *HYLE – International Journal for Philosophy of Chemistry*. 2 (13). pp. 67–81.
15. Hendry, R. (2012) Reduction, Emergence and Physicalism. In: Hendry, R., Needham, P. & Woody, A. (eds) *Philosophy of Chemistry*. Amsterdam: Elsevier. pp. 367–386.
16. Seifert, V. (2020) The strong emergence of molecular structure. *European Journal for Philosophy of Science*. 3 (10). pp. 1–25.
17. Stepanov, V.N. & Nesterov, I.A. (2006) Primeneniye neempiricheskikh metodov kvantovoy khimii dlya opredeleniya vntrimolekulyarnykh effektov vzaimodeystviya zamestiteley [Application of nonempirical methods of quantum chemistry to determine intramolecular effects of substituent interactions]. *Izvestiya Samarskogo nauchnogo tsentra RAN. Seriya: Khimiya i khimicheskaya tekhnologiya*. 3 (8). pp. 645–651.
18. Yermakov, A.I. (2025) *Kvantovaya mekhanika i kvantovaya khimiya* [Quantum Mechanics and Quantum Chemistry]. Part 2. Moscow: Yurayt.
19. Belous, M. (n.d.) Blesk i nishcheta kvantovykh vychisleniy [The splendors and miseries of quantum computing]. *3D News*. [Online] Available from: <https://3dnews.ru/1072773/blesk-i-nishcheta-quantovih-vichisleniy/page-1.html>
20. Gerasimova, I.A. (2012) Filosofiya khimii: mneniye epistemologa [Philosophy of chemistry: an epistemologist's opinion]. *Epistemologiya i filosofiya nauki*. 4 (34). pp. 130–150.
21. Skorobogatov, G.A. (1980) Gde iskat' fundamental'nyye zakony [Where to Look for Fundamental Laws]. In: Bogdanov, R.V. (ed.) *Na perekrestkakh khimii* [At the Crossroads of Chemistry]. Leningrad: Leningrad State University. pp. 148–165.
22. Pechenkin, A.A. (2014) Problema reduksii khimii k fizike: dialektika i analiticheskaya filosofiya [The problem of reducing chemistry to physics: dialectics and analytical philosophy]. *Epistemologiya i filosofiya nauki*. 2 (40). pp. 157–173.
23. Chechetkina, I.I. (2021) Interpretatsiya v teoreticheskoy khimii (na primere kvantovoy khimii i klassicheskoy teorii stroeniya) [Interpretation in theoretical chemistry (based on quantum chemistry and classical structural theory)]. *Filosofskaya mysl'*. 12. pp. 43–53.
24. Cláudio, M. et al. (2022) Simultaneous tunneling control in conformer-specific reactions. *Journal of the American Chemical Society*. 144 (45). pp. 20866–20874.
25. Bazhenov, L.B. (1978) *Stroyeniye i funktsii yestestvennonauchnoy teorii* [The Structure and Functions of Natural Science Theory]. Moscow: Nauka.
26. Surovyagin, D.P. (2018) Ob'yasnitel'naya model' reduksii: epistemologicheskiy i ontologicheskiy aspekty [An explanatory model of reduction: epistemological and ontological aspects]. *Filosofskaya mysl'*. 12. pp. 128–142.
27. Kanke, V.A. (2011) *Istoriya i filosofiya khimii* [History and Philosophy of Chemistry]. Moscow: MEPhI.

28. Van Fraassen, Bas C. (2010) *Scientific Representation: Paradoxes of perspective*. Oxford: Oxford University Press.
29. Kurashov, V.I. (2009) *Istoriya i filozofiya khimii* [History and Philosophy of Chemistry]. Moscow: KDU.
30. Chechetkina, I.I. (2021) Granitsy poznaniya matematicheskogo metoda (na primere kvantovoy khimii) [The limits of understanding the mathematical method (based on quantum chemistry)]. *Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo oblastnogo universiteta. Seriya "Filosofskiyе nauki"*. 3. pp. 84–92.
31. Dmitriyev, I.S. & Semenov, S.B. (1980) *Kvantovaya khimiya – yeye proshloye i nastoyashcheye. Razvitiye elektronnykh predstavleniy o prirode khimicheskoy svyazi* [Quantum Chemistry: Its Past and Present. Development of electronic concepts of the nature of the chemical bond]. Moscow: Atomizdat.
32. Chechetkina, I.I. (2023) Svyaz' matematiki i logiki v strukture aksiomatizirovannykh i formalizovannykh teoriiy [The relationship between mathematics and logic in the structure of axiomatized and formalized theories]. *Filosofskaya mysl'*. 12. pp. 109–120.

Информация об авторе:

Чечеткина И.И. – канд. хим. наук, доцент кафедры философии науки и социальной работы Казанского национального исследовательского технологического университета (Казань, Россия). E-mail: iralena@mail.ru

Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.

Information about the author:

I.I. Chechetkina, Cand. Sci. (Chemistry), associate professor, Kazan National Research Technological University (Kazan, Russian Federation). E-mail: iralena@mail.ru

The author declares no conflicts of interests.

*Статья поступила в редакцию 06.03.2025;
одобрена после рецензирования 02.10.2025; принята к публикации 10.10.2025.*

*The article was submitted 06.03.2025;
approved after reviewing 02.10.2025; accepted for publication 10.10.2025.*