

Concept d'émergence et chimie quantique : langage et méréologie chimiques

Résumé

Ce travail étudie la mise en relation possible entre le concept d'émergence et l'ensemble, hétérogène, de pratiques scientifiques que nous subsumons sous le nom de chimie quantique. Une étude menée en laboratoires de recherche interroge l'élaboration et l'utilisation des méthodes quantiques qui permettent d'étudier une molécule à partir d'atomes ou de noyaux atomiques, ou de relier le produit émergeant d'une transformation chimique à la réactivité des corps chimiques qu'elle engage.

Mon objectif est d'abord d'établir que les formalismes et approches quantiques développés par les chimistes sont *constitutivement* dépendants de la question de l'émergence entendue comme un problème d'articulation entre trois niveaux, la molécule en tant qu'entité, son intérieur et le milieu dans lequel elle se situe. De 1920 à nos jours, ces méthodes n'ont jamais cessé de créer un langage traduisant une interrogation méréologique. Je montrerai, en outre, que la plupart des méthodes décrites utilisent le principe de variation qui permet de déterminer les grandeurs primordiales à la description moléculaire par le biais d'un calcul récursif et auto-cohérent de minimisation d'énergie qui intrique les trois niveaux précédents. Au moment où l'état moléculaire est décrit à partir des états atomiques sous forme d'une combinaison linéaire, le principe de variation fait apparaître que la détermination des coefficients de pondération présents dans cette somme dépend de la molécule et de son milieu. Dans cette perspective, toute prééminence ontologique disparaît entre les niveaux moléculaire et atomique en laissant la place à des mises en relation et à des enchevêtrements constitutifs de ces mêmes niveaux.

Je prendrai ensuite l'exemple d'un calcul d'énergie et de géométrie pour bien faire comprendre comment il est possible de prévoir une propriété *sans pour autant affirmer avoir réduit un niveau de description à un autre*. Une étude moléculaire dépend d'un très grand nombre de choix et de stabilisations, utilisables dans un cadre restreint d'application qu'il appartient au chercheur de circonscrire. Il est intéressant de noter que la notion philosophique de « niveaux intrinsèques ou ontologiques » largement débattue à propos de l'émergence est remplacée par les chimistes par celle de « niveaux de description » liée à des outils de description particuliers et l'utilisation de logiciels de calcul. Que signifierait par ailleurs ce type de réduction d'une molécule à ses parties ? Affirmer que la connaissance des parties *isolées* et de celle de leur *organisation* suffisent à réduire un niveau à un autre ?

Sur la base de ces éléments d'étude et de réflexion, et à la lumière des travaux de Peter Simons (1987) et de Stanislas Leśniewski (1992), nous montrerons comment il est possible de repenser le concept d'émergence et d'interroger la différence entre instanciation et exemplification si débattue en philosophie analytique sur la base des travaux portant sur les pratiques quantiques chimiques.

Comme l'ont déjà souligné Pascal Engel (2000) ou Sandra Laugier (2011) il s'agit de dépasser l'opposition classique entre philosophies analytique et continentale, et à montrer comment leur articulation permet un renouvellement fécond et prometteur de ces approches et de leur lien. La richesse des approches sera, dans le cas présent, ouverte au cadre prometteur de la chimie quantique.

Mots Clés : Tout. Parties. Emergence. Méréologie. Logique formelle. Articulation. Tropes. Occurrence. Intrication. Chimie quantique.

Références :

Carnap, R. (1997). *The logical syntax of language*. (London: Routledge & Kegan Paul).

Cartwright, N. (1989). *Nature's Capacities and their Measurement*. (Oxford: Oxford University Press).

Engel, P. (2000). *Précis de philosophie analytique*. (Paris: Presses Universitaires de France).

Harré R., Llored J.P. (2011). Mereologies as the Grammars of Chemical Discourses. *Foundations of Chemistry*, 13, 63-76.

Laugier S., Plaud S. (Dir). (2011). *Lectures de la Philosophie Analytique*. (Paris : Ellipses).

Leśniewski, S. (1992). *Collected Works*. (Boston: Kluwer).

Llored J.P. (2010). Mereology and quantum chemistry: the approximation of molecular orbital. *Foundations of Chemistry*, 12, 203-221.

Llored, J.P. (Ed). (Forthcoming 2012). *Philosophy of Chemistry: practices, methodologies and concepts*. (Cambridge: Cambridge Scholars Publishing).

Simons, Peter. (1987). *Parts. A Study in Ontology*. (Oxford: Clarendon Press).

Wittgenstein, L. (1997a). *Philosophical Investigations*. Translated by G.E.M. Anscombe. 2nd edition. (Oxford: Blackwell).