

آیا می‌توان شیمی را به فیزیک تحویل کرد؟

مریم معیرزاده*

اشاره

فیزیک‌گرایان معتقدند که تمام امور واقع جهان را می‌توانند در واقعیت‌های فیزیکی توضیح دهند. یعنی یک فیزیک‌گرا باید بداند و بتواند انواع مختلف موارد و رویکردهای غیرمعادل و غیرهم‌ارز را در حوزه تحویل‌گرایی جای دهد. قائلان به تحویل‌گرایی ادعای دربر داشتن طیف وسیعی از باورهای هستی‌شناسانه و شناخت‌شناسانه را دارند.

در حوزه بحث تحویل‌گرایی، تحویل شیمی به فیزیک بسیار مطرح است. فیزیک‌گرایان تحویل‌گرا ادعا دارند که با استفاده از مکانیک کوانتومی نسبیتی و غیرنسبیتی می‌توانند انرژی اتم‌ها را محاسبه کنند. در این مقاله سعی شده است با ارائه نقطه‌نظرات تحویل‌گرایی و الگوها و انواع آن، ناتوانی این ادعا، در حوزه تحویل شیمی به فیزیک مطرح شود.

کلیدواژه‌ها: تحویل‌گرایی، الگوهای تحویل، انواع تحویل، تحویل شیمی به فیزیک، ناتوانی تحویل شناخت‌شناسانه، ناتوانی تحویل هستی‌شناسانه.

*. دانشجوی دکترا - دانشگاه آزاد اسلامی واحد علوم و تحقیقات maryam_mayerzadeh@yahoo.com

تحویل‌گرایی (reductionalism)

تحویل‌گرایی ادعا دارد طیف وسیعی از باورهای هستی‌شناسانه و شناخت‌شناسانه را در بر دارد. با دید تحویل‌گرایی ما از دستگاه‌های پیچیده در سطوح ساختاری، رفتاری و قانونی، همچنین اجزای مختلف دستگاه و ارتباط آنها با یکدیگر بهترین فهم و درک را خواهیم داشت. با این درک ارتباط بین اجزای پایه‌ای دستگاه خودشان به خصوصیات ذاتی دستگاه تحویل می‌شوند، ولی اینکه آیا در ساختارهای هستی‌شناسانه و شناخت‌شناسانه می‌توان مفهومی داشت که همه چیز در جهان را بتوان با آن تعریف کرد و یا مفهومی که نظریه‌های علمی و مفاهیم تجربی فهم عام درباره خصوصیات کلانی (macroscopic) جهان به آن تحویل شود، خود از مشکلات تحویل‌گرایی است، همچنین بنابر ادعای فعالان این حوزه حل مباحث هستی‌شناسانه و شناخت‌شناسانه با هم مرتبط است. به همین دلیل نمی‌توانیم ادعای هستی‌شناسانه را بدون توجه به مباحث شناخت‌شناسانه حل کرد. ما باور داریم که جهان را با نظریه‌های علمی مان توضیح می‌دهیم. موفقیت هر نظریه شاهد و گواه بهتری برای شناخت جهان و یگانگی آن است. (Silberstein, 2002)

تحویل‌گرایی، به منظور یگانگی علم، الگوی برای توسعه علم و تغییر نظریه‌ها، تحلیل شرایط نظری، به تعبیر مختلف در نشریات فلسفه علم مطرح شده است. در این روش فرض بر این است که درک عمیق‌تری از خصوصیات ساختاری مواد به دست می‌آوریم و با توجه به آن مفاهیم جدیدی را در حوزه تحویل وارد می‌کنیم و با نمایش چگونگی ارتباط حوزه تحویل‌شده و تحویل‌گیرنده می‌توانیم درک بهتری داشته باشیم. اگرچه بحث تحویل‌گرایی نقش اساسی در تاریخ فلسفه تحلیلی دارد ولی به لحاظ تاریخ فلسفه نیز می‌توان در سایر حوزه‌ها نیز اثری از آن یافت.

به طور اخص، مفهوم سنتی تحویل در فلسفه علم که اساساً برای یگانگی علم است با تحصیل‌گرایی منطقی (logical positivism) مطرح شد. آنها تحویل نظریه‌ها را نوعی از تبیین می‌دانستند. در زیر مفهوم سنتی تحویل، نمایان است.

- صدق گزاره S قابل انتقال به گزاره B است .

- همه گزاره‌های صادق S منطقاً معادل گزاره B است .
- امور واقع در حوزه B می‌تواند برای بیان همان امور واقع در S بیان شود .
- برای هر فرآیندی در S مکانیسم‌هایی برای B که بیان‌کننده فرآیندها باشد وجود دارد .
- رفتار و گزاره‌های S قابل بیان در رفتارها و گزاره‌های B و تعاملات آن است .
- خاصه‌های S می‌تواند پوشش‌دهنده حوزه B با توابع ریاضی باشد.
- هستومندهای S از همان عناصر با همان تعاملات همانند هستومندهای B ساخته شده‌اند.

- هستی‌شناسی S می‌تواند با هستی‌شناسی B جایگزین شود.
- نظریه‌های تحویل شده می‌تواند با نظریه‌های تحویل گیرند، جایگزین شود.
- قوانین S می‌تواند از همان قوانین در B استنتاج شود.
- مفاهیم ضروری برای توضیح S می‌تواند از روش‌های معادل به وسیله مفاهیم B استخراج شود.

مشخصات تحویل سنتی

B و S به نظریه‌های تحویل‌گیرنده و تحویل‌شونده اشاره دارد (Van Brakel, 2000). کارناپ (Carnap) برنامه تحویل فیزیک‌گرایی را در دو حوزه بیان می‌کرد: حوزه اول اصول موضوع یک زبان تجربی یگانه که به طور میان ذهنی قابل مشاهده هستند و بیان‌کننده معناداری است و حوزه بعدی، قوانین قوی فیزیک علی‌الاصول قابل استنتاج از فرآیندهای قوانین فیزیکی غیر زنده هستند. (Vemulpalli, 1999,p.16) با توجه به این تعریف، فیزیک در بالاترین مرتبه قرار دارد و شیمی به عنوان یک رشته و موقعیت درجه دوم قابل استنتاج از قوانین بنیادین فیزیکی است و از همین باینش بحث تحویل هستومندهای شیمی به فیزیک مطرح شده است.

آنچه که در تحویل تحصیل‌گرایی مطرح شد مشخصات ذیل را داشته است:

- ارتباط نامتقارن، بدون بازگشت (یکطرفه).

- این ارتباط یک ارتباط خطی است که بیش از دو نظریه در آن وجود ندارد.
- هدف اول آن تبیین خواهی است که با نظریه در ارتباط است.
- هدف دوم آن یگانگی تمام علوم حتی در شاخه‌های متفاوت است. (Van Brakel, 2000)
در بحث تحویل‌گرایی روی دو حوزه باید متمرکز شد:
(۱) اینکه چه چیزهایی را می‌توانیم تحویل کنیم و بنابراین انواع تحویل مشخص شود.
تحویل را به دو نوع هستی‌شناسانه و شناخت‌شناسانه تقسیم می‌کنیم که در بحث انواع
تحویل بررسی می‌شود. (Scerri, 1994)
(۲) اضافه شدن فرض‌های مکملی (supplementary assumptions) است که بدون
آنها تحویل امکان ندارد. این فرض‌های مکمل به دو دسته شرایط اولیه و مرزی، قوانین پل
تقسیم می‌شوند.
قوانین پل اغلب به صورت قوانین دوگانه مشروط عمل می‌کند که با قواعد تطابق
(corresponding term) نظریه تحویل‌گیرنده را به نظریه تحویل‌شونده مرتبط می‌کند.
این قوانین انواع محمول‌های نظریه را به نظریه پایه منتقل می‌کند و یا یک ارتباط متافیزیکی
را مشخص می‌کند. (Van Brakel, 2000)
از آنجا که تحویل‌گرایی به قصد یگانگی علم یکی از اهداف فیزیک‌گرایان بوده است،
لذا قبل از اینکه به طور خاص به حوزه شیمی و فیزیک وارد شویم به نقطه نظرات
تحویل‌گرایی و یگانگی علم اشاره می‌کنیم.

تحویل‌گرایی و یگانگی علم

مطابق با آنچه که تجربه‌گرایان منطقی بیان می‌کنند یگانگی علم می‌تواند از طریق تحویل
همه علوم به فیزیک واقع شود. این بحث توسط دانیل بناواک (Daniel Bonevac) در
دو حوزه تحویل‌فراگیر و تحویل‌محدود مطرح شد. او برای توضیح سطوح مختلف
عنوان کرد که وابستگی سطوح بالاتر- پایین‌تر همانند واقعیت‌های تجربی است، اگر چه
این ارتباط برای قائلان به تحویل، ارتباطی بسیار قوی و حتی متافیزیکی است. آنها برای
ارتباط این دو سطح از اصل علیت استفاده می‌کنند، یعنی آنچه که به طور علی در سطح بالا

وجود دارد و قابل توضیح است همانند سطح پایین تر است، در حالی که چنین ارتباط علی در سطوح خرد و کلان به دلیل بحث‌های محیطی وجود ندارد؛ یعنی آنچه در سطح خرد بی‌اهمیت است در سطح کلان می‌تواند از اهمیت برخوردار باشد. به طور خلاصه علت توضیح سطح کلان ممکن نیست که علت توضیح سطح خرد باشد.

مولین (Mouline) فیزیک‌گرا سعی کرد تا هستی‌شناسی را به نظریه‌های علمی تحویل کند، یعنی تحویل هستی‌شناسانه را به مباحث نظری فرو بکاهد. اگرچه برخی از فیزیک‌گرایان به این نکته توجه داشتند که یگانگی علم، شامل یگانگی هستی نیست، تحویل نظری نیز به این معنا که تبیین یک نظریه در نظریه دیگر با استنتاج‌های منطقی انجام می‌شود، مشکلات پیچیده و عدیده‌ای را به وجود آورده است. در جایی که تحویل داخل - نظریه مثلاً زیست‌شناسی مندل به زیست‌شناسی ملکولی امکان‌پذیر است ولی مشکلات جدی در خصوص تحویل میان - نظریه مثلاً تحویل زیست‌شناسی به فیزیک وجود دارد.

بحث اصلی که در این حوزه مطرح شد به مایکل راس (Micheal Ruse) مربوط می‌شود. او با تحویل هستی‌شناسانه این باور را به وجود آورد که همه هستی‌مندان در جهان شکل منطقی یکسان دارند، اگر چه این بحث در حوزه ذهن ضعیف عمل می‌کند ولی در حوزه‌های زیست‌شناسی طیف وسیعی را به خود اختصاص داده است. او در روش تحویل خود، هدف را تبیین اشیا بزرگ‌تر در اشیا کوچک‌تر می‌داند. او پیام اصلی روش تحویل‌گرایی را که فرض سطوح بالاتر باید بدون تبیین در سطوح پایین تر باقی بماند را کاملاً اشتباه می‌داند. (Van Brakel, 2000)

در نهایت ادعای یگانگی علم که با تحویل دنبال می‌شود در ارتباط بین سطوح بالا و پایین و خرد و کلان حامل مشکلات و ناتوانایی‌هایی است که در ادامه این ناتوانی در ادعای تحویل شیمی به فیزیک مطرح می‌شود.

الگوهای تحویل

برای بررسی الگوهای تحویل، طبق قاعده فلاسفه علم از ارنست نایگل (۱۹۶۱) و شیوه او

در کتاب ساختار علم (*The structure of science*) شروع می‌کنند. در الگو تحویل نایگل با مفهوم نظریه‌های علمی تحصیل‌گرایان سر و کار داریم، تحویل فقط برای نظریه‌های قابل صوری سازی کاربرد دارد، یعنی مجموعه‌ای که واژگان آن قابل تمایز به دو دسته اصطلاحات نظری و مشاهدتی باشد.

اگر «ت_۱» و «ت_۲» نظریه‌های صوری شده باشند پس «ت_۲» به «ت_۱» تحویل می‌شود اگر و تنها اگر شرایط زیر برقرار باشد:

برای هر گزاره نظری «م» که در «ت_۲» است نه در «ت_۱»، یک ترم نظری «ن» که قابل ساخت در «ت_۱» است نه در «ت_۲» وجود دارد یعنی برای همه موضوعات «آ»، «ا» شامل «م» است اگر و (احتمالاً فقط اگر) «آ»، «ا» را داشته باشد (قانون پل) قانون پل به مثابه یک پل جهت حفظ ارتباط بین دو بیان زبانی مجزا در دو نظریه مجزا است. بنابراین در الگوی فوق:

ما باید منطقاً بین نظریه‌ها با توجه به قانون پل ارتباط برقرار سازیم.

۲- باید منطقاً قادر به استنتاج قوانین نظریه‌های تحویل‌دهنده از قوانین نظریه تحویل‌گیرنده و قانون پل باشیم.

پس او تحویل را به مثابه یک ارتباط منطقی بین نظریه‌ها می‌داند: نظریه تحویل‌شونده یک نتیجه منطقی از نظریه تحویل‌گیرنده است، بعلاوه، بین بعضی تعاریف نظریه‌های تحویل‌شونده و تحویل‌گیرنده ارتباط برقرار می‌کند. (Scerri, 1994)

الگوی بعدی که در تحویل اهمیت دارد الگوی کمنی، اپنهایم است. در این الگو «ت_۲» در شرایط «ت_۱» قرار نمی‌گیرد. نظریه تحویل‌گیرنده قادر است هر اطلاعات مشاهدتی را در نظریه تحویل‌شونده توضیح دهد. در این الگو شرایط لازم برای تحویل موفق ارائه نشده است فقط شرایط کافی مطرح شده است.

اگر «ت_۱» و «ت_۲» نظریه‌های صوری شده باشند «ت_۲» قابل تحویل به «ت_۱» است اگر: «ت_۲» شامل اصطلاحات «ت_۱» نباشد.

هر اطلاعات مشاهدتی «ت_۲» قابل توضیح با «ت_۱» باشد.

بنابراین در این الگو:

- باید مطمئن باشیم که یک نقطه هستی‌شناسانه در تحویل وجود دارد.
- ایجاد قدرت تبیین خواه به عنوان یک عامل کلیدی در ارزیابی تحویل‌ها.
- خارج کردن تحویل‌هایی با روش نادرست مثل تحویل روانشناسی به کیهان‌شناسی.
مطالعه دو الگوی مهم فوق خوشبختانه بیانگر و تأیید کننده بحث تاریخی مطرح شده است که تحویل‌گرایی کاملاً دید تحصیل‌گرایی دارد و این قضیه در بین فلاسفه علم کاملاً آشکار است. (Scerri, 1994)

در بین فلاسفه علم، کوهن (Kuhn) شدیداً تحویل را رد می‌کند. دو نظریه را نمی‌توانیم با هم مقایسه کنیم، چراکه اصطلاحات مورد استفاده در هر نظریه تناسبی با هم ندارند. فایرابند (Feyerabend) معتقد است که اگر بخواهیم تحویل را بپذیریم باید قابل استنتاج بودن را به مثابه شرایط اولیه در نظر بگیریم در غیر این صورت ناتوانی تحویل باید پذیرفته شود. (Scerri, 1994, p.161)

انواع تحویل

(۱)- تحویل شناخت‌شناسانه به ارتباط بین نظریه‌های علمی توجه دارد. یک نظریه می‌تواند به دیگری تحویل شود زمانی که بتواند از نظریه دیگر استنتاج شود. بنابراین در تحویل شناخت‌شناسانه، علوم می‌تواند از طریق استنتاج کلیه نظریه‌های علمی از نظریه برتر، یگانه شوند. (Lombardi, Labarca, 2005)

در این تحویل، مفاهیم که برای توضیح «س» ضروری است می‌تواند با روشی معادل با مفاهیم «ب» تعریف مجدد شود و خواه ناخواه قوانین «س» می‌تواند از قوانین «ب» استنتاج گردند. (Van Brakel, 2000)

(۲)- تحویل هستی‌شناسانه به ارتباط بین هستومندها، (entities) خصوصیات و قواعد واقعیت تحت هستومندها به مثابه اساس هستی‌شناسی توجه دارد، بنابراین تحویل‌گرایی هستی‌شناسانه یک بحث متافیزیکی است که اصول موضوع‌های پیشینی هستی‌شناسانه مربوط به تراز واقعیت به همه ترازهای باقیمانده به طور مستقیم یا غیر مستقیم تحویل گردیده است. (Lombardi, Labarca, 2005)

اگر دامنه هستی‌شناسانه «ب» و «س» همانند باشد خواه ناخواه هستومندهای «س» و

«ب» دارای ساختار زیر لایه‌ای اولیه یکسان با تعامل‌های اولیه یکنواخت می‌باشند. در بحث هستی‌شناسی ما در مورد نظریه‌ها و اجزای سازنده پایه‌ای که تشکیل‌دهنده جهان است بحث می‌کنیم و فرض را بر آن می‌گیریم که این اجزای به طور مستقل وجود دارند و چون باید بتوانند همه چیز را درباره جهان توضیح دهند بصورت اصول موضوعه آنها را پذیرفته‌ایم.

آیا می‌توان شیمی را به فیزیک تحویل کرد؟

آنچه که ما در ابتدا می‌بایست در ادعای تحویل‌گرایی شیمی به فیزیک مورد دقت قرار دهیم مفهوم این پرسش است که «می‌توان شیمی را به فیزیک تحویل کرد؟» با طرح این سؤال، پرسش‌های متفاوتی مطرح شد که در ذیل به آن اشاره می‌شود.

- چگونه مفاهیم هیبریداسیون و مدار در ترازهای مختلف توضیح داده می‌شود؟

- چگونه واکنشهای شیمیایی با نیروهای فیزیکی توضیح داده می‌شود؟

- چگونه مکانیک کوانتمی با آنتروپی ترمودینامیک مرتبط می‌شود؟

سؤال‌هایی که با پرسش «شیمی می‌تواند به فیزیک تحویل شود؟» ایجاد شده است

(van Brakel, 2000)

پاسخ صریح ابتدایی به سوال فوق منفی است. برای روشن شدن مطلب یک مثال می‌آوریم: «آب». می‌توانیم از خصوصیات فیزیکی، فیزیکی - شیمیایی، شیمیایی، خصوصیات کلان شیمی زیستی آن صحبت کنیم. در حقیقت یک کلی داریم که از ارتباطات ممکن متنوعی برخوردار است. باید در بحث تحویل بر روی این موضوع تاکید شود که کدام یک از موضوعات فوق مورد بحث است به طور مثال:

آیا شیمی ترمودینامیک می‌تواند به مکانیک آماری تحویل شود؟

آیا «هستی آب» (Being Water) می‌تواند به «هستی شیمیایی آب» (Being H₂O)

تحویل شود؟

آیا پیوندهای شیمیایی می‌تواند به مکانیک کوانتمی تحویل شود؟

ولی برای پاسخ جامع‌تر نیازمند پاسخ به این سوال هستیم که آنچه تحویل شده چیست؟

آن چیز نظریه، مفهوم، قوانین است چرا که چگونگی ارتباط آنها متفاوت است. این ارتباط می‌تواند از طریق حذف، انضمام، فرآیی (Supervenience)، جابجایی انجام شود. (Van Brakel, 2000)

فیزیک دانان می‌گویند: رفتارهای دستگاه‌های کلان (macro) به وسیله اجزای خرد (micro) با مفاهیم بنیادین فیزیکی قابل توضیح است. این ادعا نیازمند بررسی ساختمان اتم است. در روند بحث، ناسازگاری‌هایی از تحویل خصوصیات دستگاه‌های ساده به مشخصه‌های ساختاری مطرح خواهد شد. (Vemulapalli, 1999)

ناتوانی تحویل شناخت‌شناسانه

تحویل شناخت‌شناسانه در دو حوزه کمی و مفهومی مطرح می‌شود:

- تحویل مفهومی (conceptual reduction) به تعاریف مفاهیم شیمیایی در ترم‌های مفاهیم فیزیکی توجه دارد.

- تحویل کمی (quantitative reduction) به محاسبات خصوصیات شیمیایی از نظریه‌های فیزیکی یعنی علی‌الاصول مکانیک کوانتومی ارجاع داده می‌شود. این شکل تحویل همان‌طور نیازمند تقریب‌های محاسباتی است که می‌تواند تنها بر اساس پیش‌فرض‌هایی (Post hocs) که بر مبنای اطلاعات مشاهده شده تجربی است توجیه شود. (Vemulapalli, 1999)

برای تعدیل ادعای فیزیک‌گرایی، تحویل را در حوزه ذیل دنبال می‌کنیم:

- انرژی مدارها (orbitals)

بحث انرژی در شیمی، از آنجا که تبیین جدول تناوبی را به عهده دارد از اهمیت برخوردار است. در اینجا لازم است در ابتدا دو روش محاسبه تراز انرژی یعنی روش نیمه تجربی (semi-empirical) و روش آغازین (Ab initio) توضیح داده شود و بعد اصول توضیح جدول تناوبی معرفی شود.

- روش نیمه تجربی تنها به الکترون‌های لایه ظرفیت توجه می‌شود و ضمناً از داده‌های تجربی یا از پارامترهایی که می‌توانند برای هماهنگی با داده‌های تجربی تنظیم شود، کمک می‌گیرند.

- روش آغازین مانند روش هارتری-فاک از دستگاه‌های دو الکترونی و انتگرال‌های چند گانه استفاده می‌کنیم. در این روش داده‌های تجربی جایگاهی ندارد. (Levine, 2000, chapter16)

برای استفاده از این روش باید هامیلتونی دستگاه را بنویسیم، با توجه به تابع موج شکل تابع ریاضیاتی را مشخص کنیم و حداقل انرژی دستگاه را با توجه به پارامترهای متغیر در تابع موج تعیین نماییم. در این روش جرم نسبی نادیده گرفته می‌شود. هامیلتونی برای ملکول ایزوله محاسبه شده و حرکت الکترون و هسته به طور جداگانه است. (Van Brakel, 2000)

جدول تناوبی با دو اصل «آف‌بائو» (Aufbau) و «پاولی» (Pauli) تشریح می‌شود. در اصل آف‌بائو مدارهای یک اتم به ترتیب ازدیاد انرژی روی هم قرار می‌گیرند و الکترون‌ها نیز به همین ترتیب آنها را اشغال می‌کنند.

در اصل پاولی اگر دستگاهی از چند ذره یکسان تشکیل شده باشد بنا بر اصل عدم قطعیت نمی‌توان مسیر دقیق تک تک را مشخص کرد. تابع موج قادر نیست ذرات موجود را از همدیگر تشخیص دهد و برای کل دستگاه فقط یک تابع موج تعریف می‌کنیم. (لواین ۱۳۷۵، فصل ۱۰)

در این روش هیچ کدام از الکترون‌های یک اتم با چهار عدد کوانتومی نظیر هم مشخص نمی‌شوند، که این خود بحث مفصلی است، فقط برای روشن شدن مطلب این نکته را یاد آوری می‌کنیم که یک اتم یا یک یون دو الکترونی که الکترون‌های آن در دو حالت مختلف باشد حالتهای مختلف را با اعداد $n_1, L_1, m_{L_1}, m_{S_1}$ و $n_2, L_2, m_{L_2}, m_{S_2}$ مشخص می‌سازیم که هر کدام از این اعداد کوانتومی معرف خصوصیت هر الکترون در اتم است. این ارتباطات به طور نظری استنتاج شده اند و شامل اطلاعات تجربی نمی‌باشند.

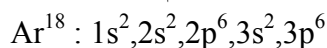
N عدد کوانتومی اصلی است و به انرژی تابع موج ارتباط دارد.

L عدد کوانتومی سمتی (Zimitha) است که به اندازه حرکت زاویه‌ای الکترون مربوط

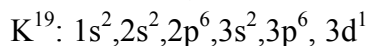
است و مقدار آن $L=n-1..0$ است.

mL عدد کوانتومی مغناطیسی است که مربوط به مولفه اندازه حرکت زاویه‌ای نسبت به محور Z است و مقدار آن $ml=-l, -(l-1), \dots, (l-1), l$ محاسبه می‌شود.
 ms اسپین الکترون که اندازه حرکت زاویه‌ای ذاتی الکترون را به میزان $1/2$ ، $-$ ، $+$ دارا است.

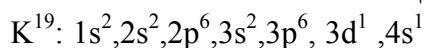
با توجه به دو اصل فوق پر شدن مدارها تا آرگون با قاعده فوق انجام می‌شود



از عنصر پتاسیم به بعد اگر بخواهیم با همان ترتیب فوق پیش رویم می‌بایست:



ولی شواهد تجربی نشان می‌دهد که پتاسیم به شکل زیر پر می‌شود.



پیتر اتکینز (Pitter Atkins) در کتاب شیمی فیزیک خود که در زمره بهترین منابع دانشگاهی است می‌گوید:

زمانی که لایه‌های فرعی با الکترون تکمیل می‌شوند (برای s دو الکترون و برای p شش الکترون، 10 الکترون برای d و 14 الکترون برای f) مدارهای s, p لایه‌های خودشان را کامل می‌کنند. مدارهای d, f رفتار متفاوتی نشان می‌دهند آنها نیاز به تکمیل لایه‌های طبقه بندی شده خود ندارند.
(Atkins, 1997, pp. 122, 123)

حال پرسش این است که چرا مدارهای فوق از قاعده ارائه شده تبعیت نمی‌کنند؟ در تمام کتابهای شیمی علت این ناسازگاری را پایین بودن سطح انرژی مدار $4s$ به نسبت $3d$ بیان می‌کنند. (Scerri, 2004) "انرژی مداری با تغییر عدد اتم Z تغییر می‌کند به طوری که با افزایش Z انرژی‌های مداری کاهش می‌یابد چرا که با افزایش Z جاذبه بین هسته و الکترون‌ها افزایش پیدا می‌کند و موقعیت نسبی برخی از مدارها با تغییر Z عوض می‌شود. در هیدروژن مدار $3d$ زیر $4s$ است، در حالی که برای مقادیر $Z=7-20$ مدار $4s$ زیر $3d$ قرار می‌گیرد. مدار s خیلی نافذتر از مدار p, d است و همین دلیل است که $4s$ در بعضی مواقع پایین‌تر از $3d$ قرار می‌گیرد. توجه به افت ناگهانی در انرژی $3d$ که از $Z=21$ به

عنوان مبدا پر شدن مدار 3d آغاز می شود یعنی الکترون های مدار 3d همپوشانی خوبی دارند و همین سبب افت ناگهانی انرژی 3d می شود. " (لواين، ۱۳۷۵، فصل ۱۱)
 اتکینر با توجه به اصل آف بائو در دهه ۱۹۵۰ بیان کرد که اثر پوششی^۱ و نفوذپذیری^۲ باعث ادغام لایه های انرژی و این تغییر می شود، پس با توجه به دلایل فوق از عنصر ۲۱ اسکاندیم به بعد مدار 3d شروع به پر شدن می کند یعنی:

Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co
$4s^2, 3d^1$	$4s^2, 3d^2$	$4s^2, 3d^3$	$4s^1, 3d^5$	$4s^2, 3d^5$	$4s^2, 3d^6$	$4s^2, 3d^7$
	Ni	Cu	Zn			
	$4s^2, 3d^8$	$4s^2, 3d^9$	$4s^2, 3d^{10}$			

برای روشن شدن مطلب و ارائه دلیل مبنی بر عدم هماهنگی ادعای کوانتم با تجربه از تابع هارتری-فاک برای محاسبه انرژی اتم های اسکاندیم، کروم و مس در دو حالت:

- (۱) مکانیک کوانتمی نسبیتی (Relativistic Quantum Mechanic)^۳
 (۲) مکانیک کوانتمی غیر نسبیتی (Non-Relativistic Quantum Mechanic)^۴
 استفاده می کنیم. (Scerri, 2004)

میزان انرژی اتم اسکاندیم ($Z=21$) در دو حالت یاد شده به شکل زیر است:

محاسبه سطوح انرژی برای ۲ حالت اتم اسکاندیم

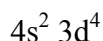
Sc	$4s^2 3d^1$
Non-relativistic -759.73571776	/Relativistic -763.17110138
$4s^1 3d^2$	
Non-relativistic -759.66328045	/Relativistic -763.09426510

محاسبه کاملاً به نفع مکانیک کوانتمی است، یعنی مطابق با اطلاعات تجربی تراز انرژی 4S پایین تر از 3d است، ولی آنچه باید مورد توجه قرار گیرد این است که نتیجه حاصل شده یک استثنا کلی نیست. هر عنصر باید موضوع به موضوع بررسی شود. بحث را با محاسبه انرژی Cr طبق محاسبات زیر ادامه می دهیم.

محاسبه سطوح انرژی برای ۲ حالت اتم کروم



Non-relativistic -1043.14175537 /Relativistic -1049.24406264



Non-relativistic -1043.17611655 /Relativistic -1049.28622286

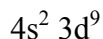
در محاسبه فوق کاملاً آشکار است شکل $4s^2 3d^4$ پایدارتر است یعنی با پیش بینی‌های مشاهده شده تجربی $4s^1 3d^5$ هماهنگی ندارد.

در اتم مس نیز این محاسبات انجام شده است. مطابق با مشاهدات تجربی ما $4s^1 3d^{10}$ را داریم.

محاسبه سطوح انرژی برای ۲ حالت اتم مس



Non-relativistic -1638.96374169 /Relativistic -1652.66923668



Non-relativistic -1638.95005061 /Relativistic -1652.67104670

در این حالت محاسبات غیرنسبیتی نتیجه مشابه تجربه را ارائه می‌دهد یعنی $(4s^1 3d^{10})$ در حالی که محاسبات نسبیتی عکس نتیجه فوق را پیش بینی می‌کند. (Scerri, 2004)

ناتوانی تحویل هستی‌شناسانه

شیمیدان‌ها اعتقاد دارند که ارتباط پیشینی هستی‌شناسانه شیمی و فیزیک یک بحث حل شده است، چرا که اگر ما این ارتباط را بپذیریم یعنی از یک پرسش مهم فلسفی «چرا شیمی یک علم مرتبه دوم است؟» باید پرهیز کنیم. پاسخ به این سوال دقیقاً به فرض تحویل هستی‌شناسانه نیاز دارد. اگر حوزه تحویل‌گیرنده فیزیکی بر جهان تحویل شده شیمی، هستی‌شناسانه پیشینی باشد باید آن مفاهیم شیمیایی که قابل تحویل به مکانیک کوانتمی نیستند دلالت به هستی‌مندهای ثانویه با وضعیت هستی‌شناسانه متفاوت داشته

باشد. به طور مثال، اصطلاح مدار یا شکل ملکولی در مباحث فلسفی به هیچ شیء ارجاع داده نمی شود، ولی شیمیدان‌ها آنرا به مثابه یک واقعیت موجود قبول دارند. در مکانیک کوانتومی اگر چه به مثابه یک ابزار برای تبیین بسیار مفید است ولی به لحاظ هستی‌شناسانه واقعیتی برای آن قائل نیستند. این بحث دلالت بر این دارد که برخی از داشته‌ها^(۲) (Given) در حوزه شیمی در واقع سطوح مشخصه تبیینی دارند که به مکانیک کوانتومی قابل تحویل نیست. این مسئله برای علم شیمی مشکلی به وجود نمی آورد، ولی به لحاظ نتیجه‌گیری فلسفی بسیار مهم است. فلسفه شیمی از مشکلات متافیزیکی مربوط به هستومندهای شیمی بی بهره است و فقط به بحث‌های روش‌شناسانه محدود شده است. "مفاهیم شیمیایی قابل تحویل به مکانیک کوانتومی نیستند، ولی نمی توان این نتیجه را گرفت که شیمی و فیزیک علوم مرتبگی نیستند" ^(۳) (Scerri, 2000, p.52)

شیمیدان‌ها در خصوص مفاهیم شیمیایی کاملاً واقع‌گرا هستند و از رها کردن این تعبیر واقع‌گرایانه و جایگزین کردن اصطلاحات نظری فلسفه علم

که ادعا می‌کند مدارها هیچ تطابقی با دنیا واقع ندارد، اکراه دارند. این شکل واقع‌گرایی یعنی «یک وضعیت میانی جهت درک نقطه نظرات علم تحویل‌دهنده است، ولی نه شکلی از واقع‌گرایی که همه نتایج آن علم، با آن منطبق باشد. به بیان دیگر شیمیدان‌ها در خصوص مدار، واقع‌گرا عمل می‌کنند ولی خوشبختانه این واقع‌گرایی یک واقع‌گرایی خام نیست» (Scerri, 2000, p. 52)

از طرف دیگر همه علوم و حتی هر نظریه در تراز هستی‌شناسانه خود، مورد بررسی قرار می‌گیرد، جایی که هستومندها و قواعد ارجاع داده شده به آن نظریه، به مثابه یک واقعیت باشد، ما تنها یک هستی‌شناسی نداریم که بتوانیم همه دانشهای علمی مان را به آن ارجاع دهیم. به نوعی ما با یک تکثر (pluralism) هستی‌شناسانه روبرو هستیم. این روند هیچ تضادی برای درک مدار به مثابه یک هستومند موجود در تراز شیمیایی ندارد: استقلال شیمی می‌تواند بدون هیچ ناسازگاری مورد دفاع قرار گیرد، ولی در جهان مکانیک کوانتومی چنین واقعیتی وجود ندارد.

شیمی دارای چارچوب مفاهیمی است که به حوزه هستی‌شناسانه خودش ارجاع

می شود. پس می توان با حمایت فلسفه از استقلال ترازهای مرتبط واقعیت سخن گفت.
(Lombardi, Labarca, 2005)

نتیجه گیری

یکی از اهداف فیزیک گرایان، یگانگی علوم است. آنها برای تحقق هدف خود از تحویل گرایی مدد می گیرند. فیزیک گرایان معتقد هستند که تمام امور واقع جهان را می توانند در واقعیت های فیزیکی توضیح دهند. یعنی یک فیزیک گرا باید بداند و بتواند انواع مختلف موارد و رویکردهای غیر معادل و غیر هم ارز را در حوزه تحویل گرایی جای دهد. مشکل تحویل از همین جا آغاز می شود.

از مباحث اصلی فیزیک گرای قائل به تحویل، تحویل شیمی به فیزیک است. در این خصوص با توجه به مباحث مکانیک کوانتومی تحویل شناخت شناسانه شیمی به فیزیک مطرح میشود. برای مشخص کردن ناتوانی کلیت این ادعا موضوع انرژی مدارها مورد بررسی قرار میگیرد و مشخص میشود که محاسبات مکانیک کوانتومی در قیاس با تجربه در هر دو حالت نسبیته و غیر نسبیته در برخی از عناصر چون کروم و مس نتیجه درستی نمیدهد.

در ادعای تحویل هستی شناسانه با بحث تکثر هستی شناسانه مواجه هستیم، در واقع علوم در تراز هستی شناسانه خود، مورد بررسی قرار می گیرند، پس می توان از استقلال ترازهای مرتبط واقعیت سخن گفت. شیمی نیز دارای چارچوب مفاهیمی است که به حوزه هستی شناسانه خودش ارجاع می شود یعنی دارای ترازهای مستقل مربوط به خود است .

در نهایت شیمی و فیزیک علوم مرتبطی هستند ولی نه به این معنی که همه امور واقع شیمی را بتوان با امور واقع فیزیک توضیح داد. ناتوانی کلیت ادعای تحویل شیمی به فیزیک و این ادعا که میتوانیم همه امور واقع شیمی را به فیزیک تحویل کنیم با ارائه موارد نقص در حوزه های مختلف شیمی توسط فلاسفه شیمی بررسی میشود.

پی‌نوشت‌ها

۱. تعدد الکترون‌ها در یک اتم باعث می‌شود هر یک از الکترون‌ها تا حدودی از تاثیر هسته اتم پوشیده باشد.
۲. احتمال یافتن الکترون در فاصله نزدیک به هسته به حداکثر می‌رسد.
۳. می‌توان اسپین الکترون‌ها را طی روال عادی محاسبه به دست آورد.
۴. اسپین الکترون‌ها باید به صورت یک فرضیه اضافی معرفی شود.

منابع

- لواين، ايرا. شیمی کوانتومی، ترجمه صمد طباطبائی، دانشگاه صنعتی سهند، چاپ دوم ۱۳۷۵، فصل ۱۰ و ۱۱ و ۱۲ و ۱۳
- Atkins, P. and Friedman, R. 1997. *Quantum Mechanic*, 3rd ed., Oxford: Oxford University Press.
- Levine, Ira N. 2000. *Quantum Chemistry*: 5th ed.; Prentice Hall: Upper Saddle River,
- Lombardi, O. & Labarca, M. (2005) "The Ontological Autonomy of Chemical World", Springer, *Foundation of Chemistry*, pp.125-148
- Scerri, E. (1994) "Has Chemistry been at least Approximately Reduced to Quantum Mechanic?", *Biennial Meeting of Philosophy of Science Association*, The University of Chicago Press, pp.159-170
- Scerri, E. (2000) "Realism, Reduction and the Intermediate Position", in Bhushan, N. and Rosenfeld, S. (eds.), *Of Minds and Molecules, New Philosophical Perspectives on Chemistry*, New York: Oxford University Press, pp.51-72.
- Scerri, E. (2004) "Just How Ab Initio is Ab Initio Quantum Chemistry", *Foundation of Chemistry*, pp.93-116
- Silberstein, M. (2002) *Philosophy of Science: Reduction, Emergence and Explanation*, Blackwell, pp.80-108
- VanBrakel, J. (2000) *Philosophy of Chemistry: Birth of Philosophy of Chemistry*, Leuven, Leuven University Press, p.34-41
- Vemulpalli, G.K. (1999) "Remnants of Reductionism" *Foundation of Chemistry* " pp.1-25