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 غیر هم‌ارز 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 دکترای 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 علمی‌مان 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 تعابیر 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 تحصل‌گرایی منطقی (logical positivism) مطرح شد. آنها تحویل نظریه‌ها را نوعی از تبیین می‌دانستند. در زیر مفهوم سنتی تحویل، نمایان است.

ـ صدق گزاره S قابل انتقال به گزاره B است .

ـ همه گزاره‌های صادق S منطقاً معادل گزاره B است .

ـ امور واقع در حوزه B می‌تواند برای بیان همان امور واقع درS بیان شود .

ـ برای هر فرآیندی در S مکانیسم‌هایی برای B که بیان‌کننده فرآیندها باشد وجود دارد .

ـ رفتار و گزاره‌های S قابل بیان در رفتارها و گزارهای B و تعاملات آن است .

ـ خاصه‌های S می‌تواند پوشش‌دهنده حوزه B با توابع ریاضی باشد.

ـ هستومندهای S از همان عناصر با همان تعاملات همانند هستومندهایB ساخته شده‌اند.

ـ هستی‌شناسی S می‌تواند با هستی‌شناسی B جایگزین شود.

ـ نظریه‌های تحویل شده می‌تواند با نظریه‌های تحویل گیرند، جایگزین شود.

ـ قوانین S می‌توانند از همان قوانین در B استنتاج شود.

ـ مفاهیم ضروری برای توضیح S می‌تواند از روش‌های معادل به وسیله مفاهیمB 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 بیان کننده 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 بینش بحث تحویل هستومندهای شیمی به فیزیک مطرح شده است.

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

ـ 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 ومرزی، 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 بنواک (Daniel Bonevac) در دو حوزه تحویل فراگیر و تحویل محدود 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 پایین‌تر است، در حالی که چنین ارتباط علّی 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 هستومندها 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 وناتوانایی‌هایی 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. درالگو تحویل نایگل با مفهوم نظریه‌های علمی تحصل‌گرایان 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 «ت۱» , «ت۲» نظریه‌های صوری شده باشند پس «ت۲» به «ت۱» تحویل می‌شود اگر و تنها اگر شرایط زیر برقرار باشد:

برای هر گزاره نظری «م» که در «ت۲» است نه در «ت۱»، یک ترم نظری «ن» که قابل ساخت در «ت۱» است نه در «ت۲» وجود دارد یعنی برای همه موضوعات «آ»، «آ» شامل «م» است اگرو (احتمالاً فقط اگر) «آ»، «ن» 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 «ت۲» در شرایط «ت۱» 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 «ت۱» و «ت۲» نظریه‌های صوری شده باشند «ت۲» قابل تحویل به «ت۱» است اگر:

«ت۲»شامل اصطلاحات «ت۱» نباشد.

هر اطلاعات مشاهدتی «ت۲» قابل توضیح با «ت۱» باشد.

بنابراین در این الگو:

ـ باید مطمئن باشیم که یک نقطه هستی‌شناسانه در تحویل وجود دارد.
ـ ایجاد قدرت تبیین‌خواه به عنوان یک عامل کلیدی در ارزیابی تحویل‌ها.
ـ خارج کردن تحویل‌هایی با روش نادرست مثل تحویل روان‌شناسی به کیهان‌شناسی.
مطالعه دو الگوی مهم فوق خوشبختانه بیانگر و تائیدکننده بحث تاریخی مطرح‌شده است که تحویل‌گرایی کاملاً دید تحصل‌گرایی 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 نا خواه 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 برروی 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 H_2O) 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، فراآیی (Supervenience) ، جابجایی انجام شود.(Van Brakèl, 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 کمّی (quantitative reduction) به محاسبات خصوصیات شیمیایی از نظریه‌های فیزیکی یعنی علی الاصول مکانیک کوانتمی ارجاع داده می‌شود. این شکل تحویل همان طور 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 روش‌هارتری- 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 بایدهامیلتونی 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 نمی توان 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 کوانتمی نظیر هم مشخص نمی شوند، 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,mL_1,ms_1 و n_2,L_2,mL_2,ms_2 مشخص می‌سازیم که هر کدام از این اعداد کوانتمی معرف خصوصیت هر الکترون در اتم است. این ارتباطات به طور نظری استنتاج شده اند و شامل اطلاعات تجربی نمی باشند.

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

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

است و مقدار آن L=n-1..0 است.

mL عدد کوانتمی مغناطیسی است که مربوط به مولفه اندازه حرکت زاویه‌ای نسبت به محور z است و مقدار آن ml=-l,-(l-1),...(l-1),l محاسبه می‌شود .

ms اسپین الکترون که اندازه حرکت زاویه‌ای ذاتی الکترون را به میزان ۱/۲ -، + دارا است.

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

Ar^{18} : $1s^2,2s^2,2p^6,3s^2,3p^6$

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

K^{19}: $1s^2,2s^2,2p^6,3s^2,3p^6, 3d^1$

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

K^{19}: $1s^2,2s^2,2p^6,3s^2,3p^6, 3d^1 ,4s^1$

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

زمانی که لایه‌های فرعی با الکترون تکمیل می‌شوند(برای s دو الکترون و برای p شش الکترون، ۱۰ الکترون برای d و ۱٤ 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 نمی کنند؟ 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 اتمZ تغییر می‌کند به طوریکه با افزایش Z انرژی‌های مداری کاهش می‌یابد چراکه 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 می‌شود یعنی الکترون‌های مدار 3d همپوشانی خوبی دارند و همین سبب افت ناگهانی انرژی 3dمی شود." (لواین، ۱۳۷۵،فصل ۱۱)

اتکینز با توجه به اصل آف بائو در دهه ۱۹۵۰ بیان کرد که اثر پوششی[۱] و نفوذپذیری[۲] باعث ادغام لایه‌های انرژی و این تغییر می‌شود، پس با توجه به دلایل فوق از عنصر ۲۱ اسکاندیم به بعد مدار 3d شروع به پر شدن می‌کند یعنی:

Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co
$4s^2,3d1$	$4s^2,3d^2$	$4s^2,3d^3$	$4s^1,3d^5$	$4s^2,3d^5$	$4s^2,3d^6$	$4s^2,3d^7$

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 اتم‌های 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 می‌کنیم. (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 استنتاج کلی نیست. هر عنصر باید موضوع به موضوع بررسی شود. بحث را با محاسبه انرژی Cr طبق محاسبات زیر ادامه می‌دهیم.

محاسبه سطوح انرژی برای ۲ حالت اتم کروم

Cr $4s^1\ 3d^5$

Non-relativistic -1043.14175537 /Relativistic -1049.24406264

$4s^2\ 3d^4$

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

Cu $4s^1\ 3d^{10}$

Non-relativistic -1638.96374169 /Relativistic -1652.66923668

$4s^2\ 3d^9$

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 هستومندهای 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 کوانتمی 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 کوانتمی قابل تحویل نیست. این مسئله برای علم شیمی مشکلی به وجود نمی آورد، ولی به لحاظ نتیجه گیری 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 کوانتمی نیستند، ولی نمی توان این نتیجه را گرفت که شیمی و فیزیک علوم مرتبطی 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، جائی 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 درجهان مکانیک کوانتمی چنین واقعیتی وجود ندارد .

شیمی دارای چارچوب مفاهیمی است که به حوزه هستی‌شناسانه خودش ارجاع

می‌شود. پس می‌توان با حمایت فلسفه از استقلال ترازهای مرتبط واقعیت سخن گفت. (Lombardi, Labarca, 2005)

نتیجه‌گیری

یکی از اهداف فیزیک‌گرایان، یگانگی علوم است. آنها برای تحقق هدف خود از تحویل‌گرایی مدد می‌گیرند. فیزیک‌گرایان معتقد هستند که تمام امور واقع جهان را می‌توانند در واقعیت‌های فیزیکی توضیح دهند. یعنی یک فیزیک‌گرا باید بداند و بتواند انواع مختلف موارد و رویکردهای غیر معادل و غیر هم ارز را در حوزه تحویل‌گرایی جای دهد. مشکل تحویل از همین جا آغاز می‌شود.

از مباحث اصلی فیزیک‌گرای قائل به تحویل، تحویل شیمی به فیزیک است. در این خصوص با توجه به مباحث مکانیک کوانتومی تحویل شناخت‌شناسانه 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 نسبیتی و غیر نسبیتی در برخی از عناصر چون کروم و مس نتیجه درستی نمی‌دهد.

در ادعای تحویل هستی‌شناسانه با بحث تکثر هستی‌شناسانه مواجه هستیم، در واقع علوم در تراز هستی‌شناسانه خود، مورد بررسی قرار می‌گیرند، پس می‌توان از استقلال ترازهای مرتبط واقعیت سخن گفت. شیمی نیز دارای چارچوب مفاهیمی است که به حوزه هستی‌شناسانه خودش ارجاع می‌شود 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 حوزه‌های 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.

٤. اسپین الکترون‌ها باید به صورت یک فرضیه اضافی معرفی شود

منابع

لواین، ایرا .شیمی کوانتمی، ترجمه صمد طباطبائی، دانشگاه صنعتی سهند، چاپ دوم ۱۳۷۵، فصل ۱۰و ۱۱و۱۲و۱۳

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.p34-41

Vemulpalli, G.K. (1999) "Remnants of Reductionism " *Foundation of Chemistry* " pp.1-25