

# 理论是科学发展的关键

王乃兴

中国科学院理化技术研究所, 北京 100190

**摘要** 理论思维是科学发展的关键。造纸术、指南针、火药、印刷术是中国古代四大发明,但从唐代到清代却无多少相关理论研究。列举了现代化学中一些精辟的理论例证,说明了理论的重要性。

**关键词** 科学方法;理论思维;科学实践

英国哲学家弗朗西斯·培根(Francis Bacon)在《新工具》(《Novum Organum》)开篇指出,科学研究旨在对观察到的自然现象进行思考、理解与诠释,特别强调了诠释的重要性。成功的诠释就是要提出学说,发展理性思维,在理论上有所突破。

经过一系列改革,中国学术界目前确实取得了举世瞩目的成就,特别是在一些面向经济社会发展的高技术方面势头很好。近些年来,学术界对科学评价体系提出了一些问题,但有些问题一时难以解决。现在中国科技界论文数量猛增,论文数量已经超过了美国,从某种意义上看也是好事,但不少人觉得好像中国的科学研究已经超越美国了。我们需要思考:这真的是了不得了吗?实际上中国在理论研究方面的成果很少。

除理论研究方面的不足之外,中国在学科布局 and 大的研究方向等方面也存在一些问题。在我们思考做什么之前,先看看哈佛大学化学与生物学系的做法。20世纪最伟大的化学家、哈佛大学教授 Woodward R B 完成了维生素 B12 的全合成,后又

完成了奎宁等天然产物的全合成<sup>[1]</sup>; Woodward R B 还在高深的有机化学理论方面取得了很大成就,与其学生 Hoffmann R 完成了著名的前线轨道理论研究。哈佛大学教授 Corey E J 因在天然产物全合成方面取得杰出成就而荣获诺贝尔奖,哈佛大学的 Evan D 也在天然产物全合成领域做出了有长远影响力的贡献。

哈佛大学教授 Kishi Y 于 1989 年在《Journal of the American Chemical Society》发表《Total synthesis of a fully protected palytoxin carboxylic acid》一文,报道了海葵毒素羧酸的全合成。1994 年,他在《Journal of the American Chemical Society》又发表《Synthesis of palytoxin from palytoxin carboxylic acid》一文,报道了海葵毒素的全合成。国内一些文献把 Kishi Y 于 1989 合成的海葵毒素羧酸误认为海葵毒素。从海葵毒素羧酸的合成到海葵毒素的合成,就花费了大师整整 5 年的时间!而且,1994 年报道海葵毒素全合成的这篇文章,作者署名只有 Suh E M、Kishi Y 这 2 个人,说明主要参与实验的是

收稿日期:2019-05-06;修回日期:2019-07-22

作者简介:王乃兴,研究员,研究方向为功能分子与手性化合物合成,电子信箱:nxwang@mail.ipc.ac.cn

引用格式:王乃兴. 理论是科学发展的关键[J]. 科技导报, 2021, 39(19): 104-108; doi: 10.3981/j.issn.1000-7857.2021.19.013

第一作者 Suh E M。海葵毒素是一个结构十分复杂的天然产物,分子式  $C_{129}H_{223}N_3O_{54}$ ,有 64 个手性中心,可能的立体异构体是  $2^{64}$  个,立体专一地合成所需要的目标产物海葵毒素,其合成难度不言而喻。笔者以前的一名学生曾在哈佛大学 Kishi Y 研究组从事过 3 年博士后研究,从而得知哈佛大学 Kishi Y 的一些情况<sup>[2]</sup>。美国合成大师 Nicolaou K C 在天然产物全合成方面取得了一系列众所瞩目的成就,例如全合成了超强抗菌素天然产物万古霉素<sup>[3,4]</sup>。他 2003 年完成《Classics in Total Synthesis》以后,又撰写完成一部图文并茂的天然产物全合成方面的介绍性专著——《改变了世界的分子》(《Molecules: That changed the world》),其中选取了从 20 世纪以来 30 多个最具代表性的天然产物全合成方面的重要内容和背景知识,这些重要天然产物都具有非常重要的生物学活性,因此, Nicolaou 认为这些天然产物分子改变了世界。 Nicolaou 在《改变了世界的分子》中,用很大篇幅再次对海葵毒素的分子结构、背景知识、逆合成分析和偶联反应作了介绍,对若干合成步骤进行了剖析,对涉及海葵毒素全合成的 8 篇最重要的核心文献等都作了说明<sup>[4]</sup>。以上仅仅列举了哈佛大学几个教授的工作。美国除了哈佛大学以外,还有麻省理工学院等很多非常好的研究型大学,他们的研究方向和研究领域非常超前,并且具极大的科学意义和深远的研究价值。

反观国内,有不少人在过分地追求论文的影响因子。影响因子是某杂志在一定时段里发表的文章被引用的总次数除以该杂志发表文章的总篇数。思考一下便知,哪一个研究领域热,做这方面的人多,该领域的文章你引他引,引用的次数就多。但这又能说明什么呢?就化学学科来说,综合性的刊物如《Science》等影响因子最高,化学学科类如《JACS》和《Nature Chemistry》等也比较高,专业类的如《JOC》比较低,而细分研究领域类的如合成化学类杂志影响因子一般很低。科学是需要细分的,需要研究专家来解决问题,这种杂志越细化而影响因子越低的表现,说明按照影响因子来评价是反科学的。现在,一边是诸如《Advance Science》等众多新办的高价收费的所谓大刊层出不穷,一边是一些

有猎奇、弄玄、耍把戏之嫌的所谓创新文章屡见不鲜。唯影响因子的弊端主要有:(1) 太多的科学刊物编辑首先考虑的是文章怎样吸引眼球、怎么能够被大量引用,生怕影响因子掉下来。不少好稿件因编辑觉得他引不高而不予送审后直接退稿。这就直接导致了研究者都去做热门,与其说是创新还不如说是猎奇,一些文章发出来作者自己都不再看;(2) 管理部门不少人只注重研究论文发在哪里、影响因子是多少,而不管你做了什么、有什么真正的科学意义和价值,这样容易把研究方向导偏;(3) 科研人员为了争经费不得不拼力发高影响因子的文章,容易忽视颠覆性的、真正原始创新性的研究工作。实际上颠覆性的研究工作和涉及冷门的研究工作被他人引用的时间比较长。

在这里笔者不禁要问:难道一个科学刊物的功能只能够用影响因子去评价吗?笔者认为,作为科学园地,一个科学刊物的功能主要如下。(1) 社会功能:科学杂志有其社会功能。例如有机化学刊物,就是报道有机化学研究新成果的,给公众传播有机化学新知识的。(2) 个人功能:可以作为有机化学家个人研究成果的户头,记录学术研究的特殊的档案材料。(3) 其他功能:可以发表最新进展方面的综述进展,可以发有关学术问题的评论、批评、批判等。另外,如果作者感到已经发表的某篇文章真的有问题,还可以宣布撤回等。如此等等,怎么能够仅仅用他人引用次数的多少作为唯一的判据来衡量一个刊物的质量呢?他人引用次数的多少仅仅是刊物的一个方面,其实刊物质量在读者心中也有一杆秤。我们更不能够仅仅用影响因子的高低来评价科学家的水平和研究价值。经费来自纳税人。一方面,一些会弄经费的团队经费多得发愁;另一方面,一些真正干事的人甚至长期拿不到面上基金。某些个体以极端个人主义为理念,以学术论文和实际应用完全脱节为显著特征,这种学风何时能够扭转?

理论是科学研究中活的灵魂。如果我们不去深入做理论,而只是做表面文章,怎么能够真正超越?一个好的科学理论绝不是简简单单就可以成功的。我们只顾发表文章,又有多少人在认认真真

地读书? 我们现有大量的博士论文, 却鲜有真正的真知灼见。如果能够深入思考一下这方面的问题, 就会避免一些弯路。

以上是当前需要思考的事。古人讲: 温故而知新。我们再回顾一下已过去很久的事。提到祖先的四大发明, 我们喜欢滔滔不绝地陈述赞美之词, 但是现在看来, 遗憾的是没有向理论方面迈出关键的一步! 我们并不是要用现代的认识水平来苛求古人, 但如果这些伟大的发明能够在向理论方面思索半步, 就会事半功倍。

我们确实非常需要具有思想性和理论性的科学思维, 但是好像在这方面存在软肋。四大发明是我们祖先对人类的重要贡献, 就指南针来说, 最早出现在春秋战国时期, 人们一直只注重了它的应用性, 假如后来的人能够进行深入细致的进行理论研究, 在磁学和电磁学方面可能会捷足先登。

再如火药, 最早有文字记载的火药配方是唐代初期著名医学家孙思邈著《诸家神品丹方》(卷五)“丹经内伏硫磺法”一节中所记载配制火药的方法, 将硫磺、硝石的粉末放在锅内, 然后加入燃烧的皂角子, 就会发生火焰。后来经过多次改进, 有了一磺、二磺、三木炭的配方。虽然我们很早就应用方面取得突破, 但并没有在化学层面对其进行理论研究, 对火药发生作用后氮元素变成氮气, 火药成分中的碳元素与氧元素生成二氧化碳(或一氧化碳)气体, 释放出的巨大体积的气体骤然做膨胀功, 因而产生巨大的推力, 其中还有氧平衡的问题以及化学、力学、数学等一系列科学问题, 后来宋代、明代、清代的人好像都没有思索这些问题。如果解决了这些理论问题, 就能够把火药这种混合物(仅是分子间的氧化还原反应)设计发展成为稳定性高、威力巨大的新一代含能材料(分子内发生氧化还原反应), 从而在军事工业上超前发挥极大的作用, 而不是在后来的鸦片战争中让英国人的坚船利炮所轰破。

还有大家熟知的三国故事曹冲称象, 讲的是曹操的第7子曹冲五六岁时, 知识和判断能力就可以比得上成人。当时孙权曾经送来1头巨大的象, 曹操想要知道这象的重量, 便向他的下属询问这件

事, 而下属们都不能想出称象的办法。曹冲说: 把象安放到大船上, 在水没过船的地方刻上记号, 再把石头装上船, 一直装到水痕迹的记号处, 然后称一批批石头的重量, 加起来就知道大象有多重了。这个故事实际上暗含了欧基米德定理的感性认识, 即: 物体所受到的浮力等于物体排开的液体所受到的重力。但是在曹冲之后的多少年, 又有谁把这个实践上升到理论的高度了呢?

几何学里有一个非常重要的定理, 在中国叫勾股定理, 我们的祖先很早就知道勾三股四弦五, 但只给出了比例, 没有推广到普遍的数学层面, 勾股定理在国外叫毕达哥拉斯定理, 即任意直角三角形的2条直角边的平方和等于斜边的平方:  $c^2 = a^2 + b^2$ , 其中  $c$  为斜边,  $a$  和  $b$  为直角边。相传毕达哥拉斯发现这个定理后欣喜欲狂, 宰了100头牛庆贺了许多天, 因此毕达哥拉斯定理也叫百牛定理。

笔者上面列举的这些古代的发现, 当时在中国仅被视为一种技术创新, 后来被一些西方科学家上升到了理论层面。大家可以看到, 上升到理论层面以后会有多么重要。提出这些问题, 希望抛砖引玉, 引起大家对理论的重视。

现在还有一个流行的说法, 认为化学仅是一门实验科学。这句话其实具有主观性、片面性和表面性, 这种认识会直接导致化学科学的浮躁。化学应该是一门以数学和物理为基础的、实验与理论紧密结合的学科。自从化学这门学科建立以来, 各种精彩的理论研究成果, 使人们对物质世界有了更深入和更精确的理解。下面列举一些现代化学中的精辟理论例证, 来说明理论的重要性。杂化轨道和成键理论圆满地说明了石墨( $sp^2$ 杂化)、金刚石( $sp^3$ 杂化)、富勒烯( $sp^{2.28}$ 杂化)的结构与性质。休克尔芳香族理论说明了芳香族的本质。休克尔认为, 芳香族必须满足3个条件: 一是共轭分子结构要有  $4n+2$  个  $\pi$  电子; 二是分子体系必须是共平面的; 三是分子结构必须是闭环的。还有前线轨道理论, 该理论很好地说明了一些有机化合物的紫外光谱特性等, 例如丁二烯用前线轨道理论处理, 其4个  $\pi$  电子中的4个电子进入最高占有分子轨道(HOMO), 这4个电子在紫外光激发下从最高占有分子轨道向能

量较高的最低不占有分子轨道(LUMO)跃迁,然后处于较高能态(LUMO)的电子再回到能态较低的最高占有分子轨道(HOMO),这个从HOMO轨道到LUMO轨道的跃迁需要吸收波长为217 nm的紫外光的能量。前线轨道理论还成功地说明了一些有机反应的问题,例如有机配合物的配位场理论就非常精辟,在说明 $K_3[Fe(CN)_6]$ 和 $K_4[Fe(CN)_6]$ 这些简单的无机化合物时,提出Fe原子的d轨道发生能级分裂,一般认为,Fe原子的5个简并的d轨道分裂成为2组能量不等的轨道。进一步提出再形成配合物时d轨道发生杂化, $K_4[Fe(CN)_6]$ 以 $d^2sp^3$ 杂化,Fe(II)杂化轨道中无单电子,本身不产生磁性,所以很多二价铁配合物呈现出抗磁性。 $K_3[Fe(CN)_6]$ 也采用 $d^2sp^3$ 进行杂化,Fe(III)的 $d^2sp^3$ 杂化轨道中尚有1个单电子,本身会产生磁性,这个理论成功地说明了 $K_3[Fe(CN)_6]$ 的顺磁性。Fe原子杂化后的6个空轨道在能量上平均化,能够均等地与6个可以提供配位键的配体成键,而且在Fe原子的前、后、左、右、上、下这6个方向上成键,成键以后形成了一个八面体场结构, $[Fe(CN)_6]^{3-}$ 一个结构对称的八面体场结构。而在手性催化剂配合物中,配体是不对称的,八面体场已经成为不对称场,严重畸变,正是因为这种不对称场,营造了不对称的微环境,造成有机反应中进攻试剂的选择性,才使得这种手性催化剂能够催化立体选择性合成<sup>[5]</sup>。仔细想来,这些理论达到了出神入化的绝妙境界。提出这些理论的化学家,他们具有极为坚实宽广的学识和高超的思维能力以及想象能力。这些理论与实验结果和物质特性完美地一致。

物理化学为化学科学奠定了一系列精辟的理论,物理化学与有机化学的结合,诞生了物理有机化学学科,物理有机化学与有机合成化学这两大学科,成为有机化学的2个坚强的翅膀。笔者在攻读博士学位期间,在物理有机化学方面下了不少功夫,当时有物理有机化学教材和老师,而现在,作为有机理论科学的物理化学已经缩减了许多。

物理有机化学对化学研究具很高的价值。有机反应中提出的反应机理,一些深刻细致的机理能够为广大化学家接受<sup>[6-8]</sup>,有的反应机理还得到了

实验的充分证明<sup>[9]</sup>,有的为实验揭示了本质<sup>[10]</sup>。例如著名的Heck反应,后来人们对其机理描述较多,但一些机理过于简单,一些机理的描述很难让有机化学家接受。Heck反应机理最为贴切和容易被接受的实际上是Heck首先建议的反应机理<sup>[11]</sup>。Heck不仅开创了著名的Heck反应,而且他提出的反应机理也非常透彻和精到,可见理论功底之深。还有Suzuki反应<sup>[12]</sup>和Negishi反应<sup>[13]</sup>的理论,为有机化学开拓了新生面,是真正原始创新、能够被后人反复应用且能够为化学家提供新方法的理论。

对有机反应的理解非常重要,例如对钯催化的有机反应,深入研究催化机理极为必要<sup>[14-21]</sup>。

有专家指出:化学革命晚于科学革命,一个原因就在于四元素说、燃素说等歪曲事实的理论没有及时抛弃,新的元素理论和科学的燃烧理论在没有及时建立起来。真正能够反映客观事物本来面目的正确的科学理论,是科学发展的关键;而歪曲了客观事物本来面目的错误理论则是阻碍科学发展的顽固绊脚石。歪曲事实的理论应该及时被批判,所以,科学的本质也具有批判性。

一个个精辟的科学理论就是绝对真理之长河里的相对真理。

科学的根本在于思维,首先需要感性认识,感性认识通过产生飞跃上升到理性认识,而理性认识还必须与实验事实完全一致,必须经过实践的检验。一个精辟的化学理论往往由实验到理论,再由理论到实验,反复多次,不断完善,不断改进,才达到绝妙的境界。理论已经完全超越了表面现象,已经深刻地揭示了事物的本来面目,已经把握了事物的本质,已经深入到了根本的东西。所以说,理论之树长青!

笔者在出版自己的著作《有机反应——多氮化物的反应及若干理论问题(第五版)》时,在第11章11.12节引用了这篇文章中的部分内容<sup>[22]</sup>。

牛顿的“力是加速度产生的原因”和万有引力的力学理论,爱因斯坦的相对论,法拉第的电磁学理论,这些伟大的科学理论永放光辉!现在,精辟的科学理论变的稀缺,本文殷切希望年轻学者能够重视这个问题。

## 参考文献 (References)

- [1] 王乃兴. 天然产物全合成——策略、切断和剖析[M]. 第2版. 北京: 科学出版社, 2014: 25-27.
- [2] 王乃兴. 天然产物全合成——策略、切断和剖析[M]. 第2版. 北京: 科学出版社, 2014: 165-166.
- [3] 王乃兴. 有机反应——多氮化物的反应及若干理论问题[M]. 第4版. 北京: 化学工业出版社, 2017: 45-46.
- [4] Nicolaou K C, Montagnon T. Molecules that changed the world[J]. *Journal of Chemical Education*, 2008, 86: 1372-1372.
- [5] Xing Y L, Wang N X. Organocatalytic and metal-mediated asymmetric [3+2] cycloaddition reactions[J]. *Coordination Chemistry Reviews*, 2012, 256(11-12): 938-952.
- [6] Wu Y H, Wang N X, Zhang T, et al. Iodine-mediated synthesis of methylthio-substituted catechols from cyclohexanones[J]. *Advanced Synthesis & Catalysis*, 2019, 361(12): 3008-3013.
- [7] Yan Z, Wang N X, Gao X W, et al. A copper (II) acetate mediated oxidative-coupling of styrenes and ethers through an unactivated C(sp<sup>3</sup>)-H bond functionalization[J]. *Advanced Synthesis & Catalysis*, 2019, 361(5): 1007-1011.
- [8] Lan X W, Wang N X, Zhang W, et al. Copper/manganese co-catalyzed oxidative coupling of vinylarenes with ketones[J]. *Organic Letters*, 2015, 17(18): 4460-4463.
- [9] Zhang J X, Zhou Y Q, Wang Y J, et al. Selective nickel- and manganese-catalyzed decarboxylative cross coupling of  $\alpha, \beta$ -unsaturated carboxylic acids with cyclic ethers via a radical process[J]. *Scientific Reports*, 2014, 4: 7446.
- [10] Lan X W, Wang N X, Bai C B, et al. Unactivated C(sp<sup>3</sup>)-H bond functionalization of alkyl nitriles with vinylarenes and mechanistic studies[J]. *Organic Letters*, 2016, 18(23): 5986-5989.
- [11] Jutand A. In the Mizoroki-Heck reaction[M]. United Kingdom: Wiley, 1999: 1-5.
- [12] Suzuki A. Cross-coupling reactions of organoboranes: An easy way to construct C-C bonds (Nobel lecture)[J]. *Angewandte Chemie International Edition*, 2011, 50: 6722-6737.
- [13] Negishi E. Magical power of transition metals: Past, present, and future (Nobel lecture)[J]. *Angewandte Chemie International Edition*, 2011, 50(30): 6738-6764.
- [14] Dieck H A, Heck R F. Organophosphinepalladium complexes as catalysts for vinylic hydrogen substitution reactions[J]. *Journal of the American Chemical Society*, 1974, 96(4): 1133-1136.
- [15] Ziegler C B, Heck R F. Palladium-catalyzed vinylic substitution with highly activated aryl halides[J]. *The Journal of Organic Chemistry*, 1978, 43(15): 2941-2946.
- [16] Kozuch S, Shaik S, Jutand A, et al. Active anionic zero-valent palladium catalysts: Characterization by density functional calculations[J]. *Chemistry: A European Journal*, 2004, 10(12): 3072-3080.
- [17] Wang N X. Synthesis of 2-Bromo-2'-phenyl-5,5'-thiophene: Suzuki reaction versus Negishi reaction[J]. *Synthetic Communications*, 2003, 33(12): 2119-2124.
- [18] Anderson C B, Bureson B J, Michalowski J T. Methanolysis products of dichloro(1,5-cyclooctadiene)palladium (II) in the presence of bases and of its methoxy adducts [J]. *The Journal of Organic Chemistry*, 1976, 41(11): 1990-1994.
- [19] Zask A, Helquist P. Palladium hydrides in organic synthesis. Reduction of aryl halides by sodium methoxide catalyzed by tetrakis(triphenylphosphine)palladium[J]. *The Journal of Organic Chemistry*, 1978, 43(8): 1619-1620.
- [20] 王乃兴. 有机反应中的极性转化方法[J]. *有机化学*, 2004, 24(3): 350-354.
- [21] 王乃兴. 钯催化的交叉偶联反应——2010年诺贝尔化学奖获奖工作介绍[J]. *有机化学*, 2011, 31(8): 1319-1323.
- [22] 王乃兴. 有机化学——多氮化物的反应及若干理论问题[M]. 第5版. 北京: 化学工业出版社, 2021: 532-534.

## Theoretics are keys to the science

WANG Naixing

Technical Institute of Physics and Chemistry CAS, Beijing 100190, China

**Abstract** Theoretical thinking is the key question for science development. Compass and gunpowder belong to the four great inventions of ancient China, but from Tang dynasty to Qing dynasty, no any theoretical questions on compass and gunpowder were ever studied. This article lists a few incisive theoretical examples in modern chemistry to illustrate the very importance of theoretical questions. Perceptual knowledge needs to rise to rational knowledge that must be completely consistent with experimental facts. Any correct theory should grasp the essence of things. From philosophical opinion, practice is the first; however, theoretics have important instructive effects on new and follow-up practices. Therefore, the tree of rational theory is ever green.

**Keywords** scientific methods; theoretical thinkings; scientific practices ●



(责任编辑 陈广仁)