

化学正在被“肢解”——学科进化的一个方面

Chemistry Is Being “Dismembered”

杨德才
(武汉大学 武汉 430072)

化学,在通常意义上被理解为从原子、分子层次上研究物质的化合、分解的一般规律的科学。本世纪以来,化学一直处于起伏动荡之中。现在,化学开始受到已有学科、新学科的“肢解”。这一趋势,预计到下个世纪会越演越烈。

一、化学被“肢解”的表现

在我国发行的自然科学综合性期刊中,《国外科技动态》(STTA)、《世界科学》(W·S)、《自然杂志》(N·J)是具有代表性的。如STTA就言明,她是“综合而宏观地报道世界科学技术的最新发展”;W·S与之类似,立足于世界性基础学科介绍,世界著名杂志“Nature”上的文章就是其经常介绍的对象;N·J则国内外兼容,是一家综合性的自然科学刊物,涉及基础科学、应用科学和交叉学科。可以说,这三种刊物在反映自然科学发展趋势上,具有一定的权威性。

在对这三种杂志作抽样统计以后,发现了如下情况。

表1 化学类文章在全部文章总数中所占比例

杂志	年	全部文章年篇数 (S ₁)	化学文章年篇数 (S ₂)	S ₂ /S ₁
STTA	1994	529	92	0.174
W·S	1994	322	57	0.177
N·J	1991	447	77	0.172

表2 基础化学文章在全部化学类文章中所占的比例

杂志	年	S ₂	有关基础化学文章数(S ₃)	S ₃ /S ₂
STTA	1994	92	2	0.0217
W·S	1994	57	2	0.035
N·J	1991	77	22	0.280

由表1看出,虽然一年中各刊刊行的文章总量相差较大,涉及化学的文章篇数也不尽相同,但有关化学的年文章数与全部文章年篇数之比,却相当

接近。相差最多者,仅0.005。值得指出,对W·S1989年的统计,结果也类似,S₁为361,S₂为63,S₂/S₁=0.1745。看来,各刊在不同年度刊行的文章,各学科间大体保持了平衡。

由表2看出,国际上,基础化学的研究及其成果的报道不多。另据对W·S1989年的统计,基础化学研究有6篇,占化学文章数的9.5%。而国内这方面的研究则保持较旺的势头。对武汉大学化学系(环境科学系、分析测试系除外)1984年至1990年科研成果的统计,基础化学研究成果更多,占总成果数的50%以上。由此看出,国际上基础化学研究似正在淡化,而国内这方面研究在高校占有十分突出的地位。这既反映了中国对基础化学研究的重视,又反映了中国在这方面相对落后。

表3 生物化学类文章在全部化学类文章中所占的比例

杂志	年	S ₂	生物化学文章数(S ₄)	S ₄ /S ₂
STTA	1994	92	34	0.369
W·S	1994	57	19	0.330
N·J	1991	77	28	0.363

表4 材料化学类文章在全部化学类文章中所占的比例

杂志	年	S ₂	材料化学文章数(S ₅)	S ₅ /S ₂
STTA	1994	92	30	0.326
W·S	1994	57	25	0.438
N·J	1991	77	11	0.143

从三种杂志看,由于现在只确立了“生物化学”学科,而未确立“化学生物学”学科,故化学与生物学共同关心的课题一并归入生物化学,并置于生物学中,如“微生物的地球化学生态学”一文就是这样。从表3看,这类文章数在有关化学的文章总体中,占1/3左右。5年前的1989年,W·S中有关生物化学的文章是24篇,占全部63篇化学类的38%。可见,无论从不同杂志看,还是从同一杂志的不同时间看,反映生物化学的文章数大体保持平衡,涨、跌幅不大,也可看出,生物化学已趋成熟,并

受到人们的青睐。

从表 4 看,三种杂志对材料化学反映强度的差别较大。W·S 最强,近于 1/2,即使 1989 年,22 篇有关材料化学的文章也占有关化学总文章数的 0.35。相比之下,部分反映国内进展的 N·J 的强度只及 W·S 的 1/3。国内、国外对材料化学的关注程度明显不同。

表 5 环境化学类文章在全部化学类文章中所占的比例

杂志	年	S ₂	环境化学文章数(S ₆)	S ₆ /S ₂
STTA	1994	92	26	0.282
W·S	1994	57	12	0.210
N·J	1991	77	16	0.208

看来,环境化学到 90 年代在不同的刊物中,无论国际,还是国内均占有虽然不大但较为稳定的份量;而 1989 年的 W·S 中,这一比例才 0.174,五年期间上升了近 0.04。

化学被“肢解”除表现为生物化学、材料化学、环境化学这几个主要方面外,还有能源化学、物理化学、天体化学、地球化学等。不过,这些方面,所占比例相对不大。

上述学科产生之后,表现出了强大的生命力,并逐渐从化学、化工中独立出来或依附于其它学科。从上述三份杂志的分类中可看出,仅置于化学这一学科栏目中的文章数量,与其它学科相比,少得可怜,见表 6。

表 6 三种刊物中各学科栏目中的文章数量

杂志	年	物理	化学	生物学	天文学	地学
STTA	1994	11	6	33	28	9
W·S	1994	12	5	71*	40**	
N·J	1991	17	8	28	9	10

*, 生物科学、医学、农林科学并为一栏,共载论文 71 篇;

**, 天文学、宇宙学、空间科学、地学、环境科学、海洋学共为一栏,载文共 40 篇。

从表 6 可见,每一刊物各栏中,化学栏拥有论文量最少;若以三刊中同一学科栏文章之和看,化学栏文章数为 19,不及物理学或地学的 1/2,天文学的 1/3,生物学的 1/6。可见,化学正在被“肢解”。

二、化学被“肢解”的原因

自本世纪初以来,自然科学各基础学科经历了交替发展的历程:一二十年代为物理学;三四十年代为化学;五六十年代为生物学。其实,地学,尤其天文学也于六七十年代迅速发展。

化学自上世纪开始至本世纪初,一直以研究微观机制为出发点,以宏观化学效应为目的;以无机物为基本研究对象,以有机物为新起研究对象。这

一趋势到本世纪三四十年代,形成了化学深入、迅速发展的阶段。

然而,这一时段化学的发展,直接借助了物理学,尤其微观物理学的成果。在此之前,化学研究仅立足于原子这一层次。在原子不可分的框框内,踌躇不前,电子、质子直至中子被发现后,化学反应的更为微观的机理得到了深入的揭示,元素周期律的例外之处(如 Ar—K、Co—Ni、Te—I 的位置倒置)得到了解释。由此,化学建立在坚实的理论、实践基础之上,所以,形成了三四十年代的活跃局面。当化学进一步研究微观,深入发展时,开始和物理碰撞,以至于有些研究对象很难分清究竟属于物理学,还是属于化学。如 W·S1994 年的《怎样清点原子》、《量子轨道的反面》、《清晰地看原子核》等文章,就很难判定其学科归宿(前述表中将其划归化学)。所以,化学被“肢解”,物理学成为一个重要原因。

生物学在 50 年代前多立足于宏观,并用经验描述生命现象。50 年代,微观理论进入生物学,分子生物学产生,旧有的生物学分支也开始借助于微观物理学的成果,因此,生物学生机勃勃。生物学的这一局面也危及到了化学。有机化学,尤其天然有机化学本来就是以生命现象或生命物质为对象。在共同的研究对象面前,尽管角度可以有所差异,但是这种差异在研究的直接目的或最终目的中又消失殆尽。在“生物化学”和“化学生物学”很难区分的情况下,在有机化学和生物学很难绝对分开的时候,我国著名的有机合成化学家、中科院院士戴立信提出了“有机化学与生命科学结合”的倡议。否则,诸如 1965 年我国人工合成牛胰岛素这一成就,究竟列入生物学,还是列入化学,就一直会是一个疑案。这从另一侧面说明,化学被“肢解”,生物学也是一个重要原因。这样,物理学和生物学的长足进步和夹击,造成了对化学研究对象的“肢解”。

本世纪中叶以后,由于新型工业生产、航天技术、能源技术的兴起,造就了极富生命力的材料科学。材料除可按化学成分分为金属、无机非金属、有机高分子三类外;还可按材料的组织结构分为单晶、多晶、非晶、复合材料四类;又可按用途分为结构、功能材料两类;也可按功能分为生物、非生物材料两类。这些汇集起来,在本世纪下半叶已经形成了一个独立的部门——材料科学。

无论何种材料,都离不开两种方法,即生产方法和分析测试方法。而任何一种材料的生产和分析测试又都不是仅靠化学方法所能完成的。半导体材料已是支撑现代社会的一种功能材料,其生产已不是简单的化学合成,随着空间技术的成熟,特殊的物理环境越来越发挥重要作用;对其分析也不仅仅是化学分析,更多的是物理化学分析。超导材料是人们竭力追求的一种功能材料,研究者不限于单纯

的化学工作者,还包括了一批掌握和运用综合方法的人。由于生产途径、工艺流程的成熟,方法也得以固定化并有别于单纯的化学方法。也正是基于此,材料科学系或专业、分析测试系或专业得以纷纷成立并和化学系或专业平行。这样,材料科学、分析测试科学的兴起并独立,也造成了对化学研究方法,主要是合成与分析方法的“肢解”。

人类居住的地球,及相依存的环境随着本世纪工业、农业生产的现代性发展,在本世纪中叶受到了人们的极大关注,环境科学应运而生了。环境科学直接着眼于地球及其表面物质,研究的目的在于使其更适合于人类的长期居住。其任务,一是维护平衡的环境;二是改造恶劣环境。

地球表面环境本是一有机动态的、由多种环境或因素相互交织并制约的整体,因而适于人类居住的最佳环境的保护和促成,也就不能仅仅着眼于单一的分支环境和因素,而是立足于分支环境链、因素链。例如化学环境制约生物环境,生物环境制约物理环境,物理环境又制约化学环境。其对应因素也是这样相互制约。这就构成了环境、因素链。整体最佳环境取决于分支环境链,进而取决于因素链表明,环境的治理和保护,化学环境及其因素是重要的,但不是唯一的。这里化学研究的目的仅在治理或维护地球表面的环境,服务于环境科学的目的。因此,化学研究的任务,也受到了环境科学的“肢解”。

研究对象的专一化、研究方法的专业化、研究任务或目的专门化,进而产生新学科,是科学发展到今天,基础学科理应受到“肢解”的普遍原因;而化学和其它基础学科相比,在研究对象上的交叉性、在研究方法上的通容性、在研究目的和任务上的相似性,则是化学被“肢解”的特殊原因。

三、化学被“肢解”的意义分析

科学技术史表明,人类最初的研究由于科学认识的基础低,对自然界知之甚少,其研究对象多立足于整体,故当时的科学也只能限于自然哲学。到近代,由于科学知识基础的奠定,主要由于认识对象的专一化,出现了物理学、生物学等基础学科。尽管 17 世纪的牛顿仍将其巨著命名为《自然哲学之数学原理》,但自然哲学随着自然科学基础学科的诞生,已名存实亡。

如果说自然哲学的解体是人类科学研究的第一次大深入,那么 20 世纪中叶后,基础学科的被“肢解”则是人类科学研究的第二次大深入。如前所述,研究对象不再简单地立足于原有的五大块或六大块。虽然这些基础学科在近代和本世纪上半叶相继建立了自己的分支学科,但发展的结果,这些分

支学科也难以包容或概括新的研究对象。如化学历史地被分为无机化学和有机化学,这一体系似乎包罗了自然界的一切物质对象,但随着高分子研究的兴起与成熟,这一分类体系首先受到了挑战,产生了高分子化学,并与有机化学并列。所以研究对象的再次专一化,促进了科学的深入。过去,无机化学被定义为关于元素及其化合物的化学,专门研究元素周期表及其中的元素;有机化学被定义为关于含碳化合物的化学,但络合物、配位化合物和复杂天然有机物的研究,又一次打破了二者的界限。中心体或中心原子的金属性或无机性,配位体或其它原子的非金属性或有机性,使其既难包容于无机化学,又难包容于有机化学,新的交叉学科出现了,配位化学、生物化学随之产生,化学研究得到了深入。所以,新的研究对象的出现,化学的被“肢解”,表明了科学研究的深入。

化学在近代被确立之后,经过 19 世纪,尤其 20 世纪的发展,已达到相对完善的地步。基础理论,如元素周期理论、有机结构理论、反应类型及机理等得以陆续建立;研究方法,如化学分析、有机合成方法也得以提出;实验技术,由于自身的进展和从其它学科的引进,不仅可操作性强,而且适用范围大。这些基础的奠定,使基础化学的广泛应用成为可能。正是在这一前提下,对专一化了的对象和新涌现的对象的研究,得以借用或套用已有的化学理论、方法和技术。环境科学中,对环境的监测、预防和治理,化学占有突出的地位。在这一意义上,相对成熟了的化学哺育了新学科,“绿化”了科学的新园地,并以削弱自己的地位和领地为代价。在这一意义上,化学的被“肢解”,也表明了化学的日益成熟。

最后,化学的被“肢解”,表明了化学的相对局限性。这种局限性主要表现为研究对象的不定性。在基础科学中,化学是十分年轻的。在其产生之际,固有的研究对象已瓜分殆尽。物理学在古代,尽管未形成完整的体系,但专注于对世界物质,尤其地面无机物质、宏观物体的研究。这一研究对象到近、现代,不仅延续下来了,而且拓展至声、光、电、磁和微观界面。生物学古今都是直接以生命现象为研究对象,其现代性发展,并没有超出这一范围,只不过更为精细化了。地学和天文学在古代原本统一,随着近、现代的发展,这两个基础学科的研究对象有了分工,地学专注于地球这一特殊天体;天文学则以除地球外的其它天体为直接研究对象,也研究它们与地球的关系。这样,以研究的直接物质对象看,化学已无立足之地。波义耳在确立化学的任务时,为难之际,才独辟蹊径,将其定为研究物质的化合和化分,并且沿袭下来。这已足见化学研究对象的特殊性——立足于横向且限于一个侧面。本世纪中

(下转第 18 页)

关,由此发展了“磁体分子工程”。中子衍射及理论计算表明,由于自旋取向对晶格的相互作用,自旋的磁矩有序性并不要求晶格的周期性,自旋可以形成各种自旋的构型。分子磁体的合成实质上也是一个分子组装的问题,例如选择好适当的构造基块,利用铁磁性偶合先形成高自旋链状分子,再将它们在三维空间中适当地组装,对链实行晶体工程,使晶格中链间为铁磁性作用,而通过分子间作用使链间为铁磁性作用排列。通常倾向于直接在三维空间内把几种不同的顺磁基块交替地交联组装以达到自旋有序的目的。

光诱导下分子间的电荷转移、能量转移和结构变化是信息存储和传递的基本途径。在分子间组装的启发下,人们也重新重视了将基块通过刚性非活性基组装在一起的分子内电子和能量的转移体系(有人特称之为 Supermolecule)。这种分子内的转移过程避免了扩散效应而呈现更高效率,这时诺贝尔奖得主马库斯(Marcus)的电荷转移理论有着重要的指导意义;对于光电转移材料及光合作用中心的研究也具有重要实际意义。

将不同基块组合在一起的这种超分子可以实现功能互补。这种在有序体系中分子受限制的性质及反应,不仅在基础研究中具有重要意义,而且其功能对于发展分子电子器件有着重大应用意义。以吡啶盐为珠,以多醚链为线的串珠式(bend-on-thread)结构所构成的分子,可在pH变化或电化学氧化还原而引起的两种状态间可逆地转换,因而可作作为分子开关。光色性希夫碱在光激发下的质子定向转移,及其异构体转化具有光信息存储功能。用固态光化学的规律和理论设计的固态超分子体系(具有高选择分子识别、光电信息处理等特殊功能)正在得到发展。目前欧洲正在发展的,以应用分子替代半导体材料为电子元件的“第六代”分子计算机的计划,则更具科学的魅力。

对这类在高新技术中有潜在应用前景的功能体系进行分子设计的过程中,对基础研究也提出了一系列新思想、新概念和新课题,诸如受体—给体

间的电荷能量传递和转移机理,BCS 超导理论在分子材料中的适用性、电荷密度波和自旋密度波的作用、有效的超分子组装技术、界面膜的微结构及其稳定性等都是有待发展的基础研究课题。

上面所讨论的这些超分子工程例子都不涉及共价键的生成和破坏这类传统的化学反应。而自然界的高催化效应的酶就是以这种非共价方式将基质束缚于酶的活性点上的。但这要求在时间、空间和能量上高度合理的有序组合。其设计难度可想而知,估计不是近期可以突破的问题。

四、结束语

任何一种新学科的建立及探索都有一定的风险,功能体系的分子工程学的建立也不例外,各个学科之间的孤立状态已经打破,在分子水平上实施工程设计的想法必将进一步推动各学科之间的关联。

目前纯粹从第一原理出发的理论方法看来还不够成熟,但也不能只停留在“模型”和“半经验”的阶段上。显然,不能等待所有基本原理都得到解决后才去建立分子工程学。目前,通常的做法是先确定目标功能,然后借助于现有工作理论和实践经验结合进行。从基础研究的观点来看,由较有明确结构的简单功能体系出发,深入探讨其指定功能的机理及微观过程可能是一种较好的途径。

功能体系的范围是如此之大,所涉及的学科是如此之广,在工作中必须瞄准一些与高新技术密切相关的前沿课题,实行多学科合作渗透,取长补短,统筹经纬。为了更深入问题的实质,又需要各方面专家立足于其特长,做细致的基础工作;在把握这一国际前沿课题的主攻方向时应根据我国国情,已有的研究积累、需要发展的紧迫课题及可能的基金等作出可行的抉择;对分子基有序功能体系这个有限目标作重点突破,并分片地建立分子工程学。这些就是我们应采取的策略。(责任编辑 蔡德诚)

(上接第 21 页)

叶后,在进一步讨论化学研究对象时,基于已有的化学研究成果,又将其限于原子—分子层次。然而,这与微观物理学相违。在微观物理学发展强劲、令人注目之时,物理学和化学之间的界限又一次模糊了,在研究对象——特殊的物质结构层次或侧面上,化学仍一贫如洗。这正是生物化学常纳入生物学中,环境科学被纳入地学,天体演化学置于天文

学,材料科学或者归于物理学或者独立的原因。

在科学技术高度发展的今天,基础学科或基础科学均在被“肢解”,这是科学发展规律使然;化学和其它基础学科相比,被“肢解”的幅度更大,而且越来越明显,其原因和意义正是化学工作者们需要思考的。

(责任编辑 孙立明)