

科研故事:避免“小错误导致大问题”

科研中因小错误引发大问题的情況很常見,大到航天發射失敗、小到發表的論文被撤回。為了避免小錯誤導致大問題,研究人員必須對原始數據有充足的了解,必須能夠判斷數據的真偽和對錯,這就要求科研人員經常親臨科研第一線;即使不能做到經常親臨科研現場,也應該對數據的疑點保持警惕、追根問底。

現在高校和科研單位的大多數科研工作實際上由研究生完成,有些研究生缺乏科研基礎和科研熱情,也不夠認真和細心,這樣的現實情況經常會導致一些研究數據不準確或者數據分析不準確。如果我們對有問題的原始數據全盤接受,就會作出錯誤的判斷。這樣包含錯誤的工作一步步推演、放大,就可能造成大問題。

我和一個研究生討論樣品的熱重分析結果時,發現該研究生把樣品加熱後的失重計算區間搞錯了,以至於所得失重數值不合理。如果我當時采信了這個研究生的分析報告,就會對化學合成產生錯誤判斷。對存疑的數據,我一般會

要求研究生拿出原始曲線、照片等給我看。於是,我和這個研究生一起對着電腦屏幕計算樣品的失重數值,發現了錯誤並及時糾正了錯誤。在日常科研中,類似的情況還有很多,我們必須把錯誤扼殺在原始數據階段,不讓錯誤傳遞下去。

還有一種小錯誤是由“想當然”造成的。我們曾有一個研究生做了一項科研工作,他把二異氰酸酯和有机胺放在一起反應。當時,我們從教科書上得知這種反應很容易進行,所以想當然地認為我們設計的反應“應該”能夠反應完全。可是後來我們換了一種溶劑再做這個實驗,卻發現反應物不能全部轉化,於是我們重複之前的實驗,發現反應同樣不能徹底。推測原因,可能是二異氰酸酯中一個官能團反應後分子變大很多,空間位阻增加導致另一個官能團反應變慢。於是,我們調整了加料順序,結果有所改善。這個例子就說明“想當然”容易犯錯誤——如果將我們原本“想當然”的這個合成反應放大,結果一定不可控。

注意觀察是實驗中一個重要的環節,決定了數據的可靠性,即便高度現代化的儀器所得的檢測結果也可以被合理地懷疑。我們曾用X射線衍射研究了3種玻璃材料,發現一個樣品在不同的儀器上測得的X射線衍射圖大不相同。我認為是儀器操作的問題,可能是樣品放置的高度不合理。為了搞清楚是怎么回事、應該採信哪一組數據,就需要自己去儀器旁邊觀察、繼續驗證。

上述這些似乎都是小問題,但常常被研究者忽視或者輕信。研究者原先沒想到會出現錯誤,這一方面是缺乏經驗,另一方面是不注意觀察導致的。這些小錯誤延續下去就是大問題。很多科研工作者拿着自己的研究生做出來的初步結果到處吹噓,甚至拿到企業去放大生產,結果企業損失大量資金,科學家損失學術聲譽。因此,科研工作必須對自己手裡的數據有十足的把握,以避免小錯誤引發大問題。

科研故事:應仔細校訂論文的清樣

論文被學術刊物的編輯接收,可喜可賀。很多人以為論文被接收就萬事大吉了,但這並不是結束。論文發表之前還有一個重要步驟:校訂論文清樣,這是對論文把關的最後機會。論文一旦出版,就成了“白紙黑字”,如果有錯誤,就會造成不好的影響。我就曾經因校訂清樣的問題而鬧心。

一個學生的兩篇論文出了同樣的數據問題,被我在校訂清樣時發現了。他使用了固體硅核磁共振數據,按照不同化學環境,硅原子的核磁化學位移分為Q、T、D、M共4組峰,其中Q峰又包括Q1、Q2、Q3、Q4共4個峰,T峰包括T1、T2、T3共3個峰,D峰包括D1、D2共2個峰。這樣,對於帶有各種有機基團的硅原子,往往需要通過分峰來確定不同硅原子的含量。問題就出在這裡了。在同一个表格里,學生把計算得到的单个峰面积占有所有峰总面积的比值(可以认为是相对值)和依此折算的不同硅原子在

样品中的百分含量(可以认为是绝对值)搞混了,而後者的計算要根據硅原子上帶有不可水解基團的數量進行加權。這也是我改論文時的疏忽所致。以前我對學生論文里的數據都會認真核對,尤其是表格,但在改這兩篇論文時卻疏忽了。發現問題了,怎麼辦?一般在校訂清樣時,只能改正文字的疏漏、排版的問題,而不能修改數據。但也不能讓錯誤印在紙上,於是我們還是實事求是地改正了數據錯誤。

這個例子說明,在論文最終出版前,作者一定要對論文的每一個細節認真負責,千萬不要讓錯誤變成“白紙黑字”。

有一次,我們的另一篇論文經過校訂後,已經在期刊的網站上登出來了,但這時我才發現一幅圖里的兩個區域標記弄反了。我馬上給編輯寫了一封信,說明這個問題。編輯很快回信,說可以把印刷版和網頁上鏈接的PDF文件改正過來,而不能修改已經做成的html網頁文

件。他還說感謝我們,讓他們避免刊出一個正式的勘誤。

還有一次,我發現編輯在排版時把一篇論文的兩個段落顛倒了位置,還有丟掉上下標、公式里大小寫符號搞錯等等問題。在我看來,這些情況發生的後果遠比語法問題嚴重。

我們知道,寫論文、改論文需要精雕細琢。而校訂清樣,正是論文發表前的最後一道質檢和微調工序。作者應該非常認真地對待清樣校訂,而不能輕視——這是對讀者負責,對自己的學術名譽負責,也是對學術期刊負責。

文/徐耀

作者簡介 中國科學院西安光學精密機械研究所,研究員。(本期2篇文章作者均為徐耀)

欄目主持人 馬臻,電子信箱:zhenma@fudan.edu.cn。

(責任編輯 李娜)