

学校的理想装备

电子图书·学校专集

校园网上的最佳资源

化学哲学

 **eBOOK**
内网资料 免费下载

前 言

现在献给读者的这部《化学哲学》，是对国家社会科学基金会资助的一项研究课题进行研究所获得的成果。

化学哲学是以化学为研究对象的哲学，是自然科学哲学的一个重要的组成部分。化学哲学是化学家和哲学家都关心的一门学问。化学家从事化学研究，在许多问题上，尤其涉及概念和理论问题上，需要从哲学方面进行思考；哲学家从事哲学研究，应当而且需要了解自然科学（其中包括化学）的发展及其成果。长期以来，国内外的许多化学家和科学哲学家关心化学哲学问题，对化学中的哲学问题进行了研究和探讨，发表了许多有价值的见解。同时也应指出，过去的研究成果，大都散见于论文中或论文集式的著作中，系统性不够，对一些问题分析还不够深入，有些问题尚属空白。本书的研究工作是以过去的研究成果为基础的，同时又是针对过去研究工作中存在的薄弱环节而进行的。本书主要做了以下四个方面的工作：

第一，结合化学提供的经验资料和思想资料，从本体论、认识论和逻辑学三个角度对化学哲学做了比较全面、系统而又简明的阐述。全书共设十章，在第一章对化学哲学做了概括性说明以后，第二至第四章，着重对化学哲学本体论问题进行了讨论，分析了几个重要范畴，例如，实体、关系和过程，变化和进化，空间和时间，这些范畴与一定的化学概念相联系，例如，实体和组成，关系和结构，过程和反应等。第五、六两章，专门讨论了化学中的认识论和方法论问题；第七至九章，分别讨论了化学中的概念、规律和理论，涉及逻辑学问题；最后一章，即第十章，研究了化学符号问题。从总体上说，化学中的认识论和方法论，构成本书的核心，除了在第五、六两章做了专门研究以外，在其他各章也都从不同角度、不同侧面涉及这方面的问题。在对本体论问题的探讨中，渗透着认识论和方法论观点，在对化学概念、规律、理论和符号的分析中，也与认识论和方法论有着紧密的联系，而且从分析中得出认识论和方法论的结论或启示。本体论问题是全书的基础，以范畴的形式描绘了化学的客观图景，化学认识就是对化学的客观图景的认识，化学概念、规律和理论，就是对这个图景认识所获得的结果，化学符号是认识的工具和表现形式。综合起来，全书十章，各有特点又相互补充，对化学哲学的主要内容做出了统一的说明，并体现了辩证法、认识论和逻辑学的统一。

第二，从历史、现状和理论的结合上对化学中的概念、规律和理论做了深入的分析 and 说明。历史，化学的历史，化学思想发展的历史，化学概念、规律和理论形成、发展的历史，通过历史的分析可以了解有关问题的来龙去脉；现状，化学发展的现状，化学理论、概念的现状；理论，哲学理论，认识论和方法论。从历史到现状，了解了过去，认识了现在，提出了问题，从理论上进行分析和说明，或者以历史和现状为基础，对理论问题进行论证。应当说全书都力求贯彻这种精神，在第七至第十章这四章中，更明显地体现了这种精神。从这三者的结合上对化学概念、规律和理论进行的分析和说明，力求从总体上阐明化学概念、规律和理论的历史发展，揭示其辩证内容和深刻的内涵。从这三者的结合上对什么是化学符号，化学符号的构成、特点和功能、化学符号和化学模型的关系等问题进行了阐述，为推进化学符号学和化学符号哲学的研究，作了尝试性的探索。

第三，对化学哲学问题与其他科学哲学问题进行了比较研究。化学哲学

是自然科学哲学的一个重要的组成部分。化学哲学有其自身的特点，其特点又是在同其他自然科学哲学比较中显示出来的。本书主要将化学哲学问题同物理学哲学问题进行比较，以揭示化学中哲学问题的特点。本书十章的标题都冠以“化学中的”，意在强调特殊性。化学有其自己的特殊哲学问题，化学哲学中的重要范畴有其自己的特殊内容，化学中的实验有其自己的特点，化学中的认识和方法有其自己的特殊的表现形式，化学中的概念、规律、理论和符号，也有其自己的特殊性，如此等等。通过比较研究说明特殊性，揭示其特殊的本质，特殊性中包含着普遍性，揭示了特殊的本质，也就体现了普遍性，具有普遍意义。

第四，在阐述中提出了一些值得思考的问题，并对这些问题做了尝试性回答。哲学是智慧学，哲学之所以被称为智慧学，就在于它的首要任务不是提供几条结论，而是启迪智慧。如何才能启迪智慧？途径很多，而善于提出具有启发性的问题是重要途径之一，提出问题还要试着回答问题，在回答问题中，一方面可以把问题提得更明确，另一方面可以展开思维和论证过程。正是本着这种精神，本书提出了许多问题，例如，能不能划分化学问题和化学哲学问题？如能划分，该如何划分？对于化学这样一门具体科学中，在什么意义上不能划分唯物主义和唯心主义？在什么意义上存在唯物主义和唯心主义的问题？化学进化是不是化学问题？化学变化和化学进化的统一是否可能？如果能，如何可能？化学理论是否存在？如果存在，如何存在？等等，等等。有些问题是以直接的问题形式提出来的，有些问题虽然没有以直接的问题形式提出来，却以潜在的形式存在于论述中，或者说，论述是以某个问题作为背景而展开的。

上述四点，是本书所着力做的工作，也是本书写作的指导思想。指导思想还不是现实，指导思想落在实处才成为现实。由于作者才疏学浅，也由于病魔缠身，在力图贯彻指导思想方面，在完成预定的任务中，颇有力不从心之感。因此，一定会有许多不尽人如意之处，也一定会存在不少缺陷和错误，恳切希望读者予以批评指正。

本书在写作过程中，得到许多同行的帮助；还得到我的研究生的帮助，他们协助我查阅文献、抄写书稿等。在此，特向所有帮助过我的同志表示衷心的感谢。

我还要对江西教育出版社表示衷心的感谢。他们为推动化学哲学研究，发展学术，促进社会主义精神文明建设，主动约稿，并为本书的出版付出了辛勤的劳动，没有他们的帮助，本书是不可能与广大读者见面的。

作者

1993年10月于北京师大

化学哲学

第一章 化学中的哲学问题

提起化学哲学，熟悉化学史的人不会感到陌生。因为早在 19 世纪，一些化学家的著作就是以“化学哲学”的名称面世的。例如，化学原子论的创立者道尔顿（J·Dalton）于 1808 年出版的著作名为《化学哲学新体系》；对电化学的发展有重要贡献的戴维（H·Davy），将其于 1812 年出版的著作称为《化学哲学原理》；意大利化学家坎尼查罗（S·Cannizzaro）于 1858 年发表了题为《化学哲学教程概要》的论文。不过，这些题为化学哲学的著作和论文所阐述的内容，主要是当时面临的化学本身的基本理论问题，与现在所说的化学哲学不尽相同。

那么，我们将要说明的化学哲学是怎样的一门科学呢？什么是化学中的哲学问题？化学哲学研究的主要内容是什么？说明这些问题，不应当从抽象的定义出发，而应当从具体的实际情况出发，也就是从化学哲学研究的历史和现状出发。

长期以来，无论是在国外还是在国内，都有一些学者从事化学哲学的研究工作。下面，就化学哲学研究的历史和现状，作一简要述评。

一、化学哲学研究的历史和现状

1. 西方国家的化学哲学研究

西方一些国家的哲学家，特别是科学哲学家，对化学问题是非常重要的。美国著名科学哲学家托马斯·库恩(T·Kuhn)在《科学革命的结构》一书中就引用了许多化学史料，其中对于“拉瓦锡的燃烧理论取代燃素说，从而引起化学革命的史实材料的研究、分析可以说是库恩形成并阐发他的科学革命结构思想的关键材料之一”。在该书写作以前，库恩专门研究了化学史，并写了《罗伯特·波义耳和十七世纪的结构化学》；在该书写成以后，库恩于70年代又运用氧的发现史作为论证哲学观点的论据。

除库恩外，还有一些科学哲学家注意化学史料的研究和运用，如拉卡托斯(Lakatos)在《科学研究纲领方法论》一书中，引用普劳特(W·Prout)关于一切元素都是由氢元素构成的假说来论证他提出的观点。

但是，总起来看，在西方，主要是从哲学方面对化学史中的突出事件进行分析，运用化学史料及其分析结果来论证某种哲学观点或理论。因为对化学问题的哲学研究是为哲学研究服务的，因而这种化学哲学研究是零散的、不系统的。严格地说还未形成化学哲学问题研究的专门领域，更谈不上化学哲学了。迄今为止，据本书作者所了解的有限的文献范围，在西方还没有提出建立“化学哲学”的任务，甚至还没形成“化学哲学”概念。当然，这要把历史上道尔顿、戴维等人的著作中的“化学哲学”除外，前面已经指出过，在这些化学家的著作名称中的“化学哲学”与我们这里讲的化学哲学是不同的。

2. 前苏联的化学哲学研究

关于前苏联化学哲学研究概况，笔者曾经从不同侧面作过介绍。在这里，在过去已经介绍过的情况基础上，作些补充，并做一些分析和评述。

首先应当指出，在前苏联，在化学哲学问题研究方面，有一批学者，有学术活动，发表了许多论文，出版了一些著作，比起西方一些国家，要活跃得多，富有成果得多。前苏联学者，在进行化学哲学研究中，力图以马克思主义哲学为指导，在这点上也不同于西方国家。

在前苏联，参加化学哲学问题研究的学者很多，仅据近30年来的不完全统计，出版过著作、发表过文章的，大约有140多人。按专业分，主要由三部分人组成：一部分是化学家或专门从事化学和其他自然科学专业教学、科研的人，另一部分是哲学家或专门从事哲学教育和研究的人，第三部分则是专门从事化学哲学问题研究的学者。其中有科学院院士、通讯院士，高等学校的教授、副教授，有化学科学博士、副博士，数理科学博士、副博士，技术科学博士、副博士，哲学科学博士、副博士等。

据不完全统计，近30年来，前苏联出版化学哲学(方法论)著作近50

金吾伦：《国外化学哲学研究情况综述》，见中国自然辩证法研究会编《国外自然辩证法和科学哲学研究》，知识出版社，1982年版，第185页。

张嘉同：《苏联化学哲学问题研究情况简介》，见《化学通报》1982年第1期；《苏联化学哲学著作》，见《化学哲学基础》一书，科学出版社，1986年版附录3。

部，集体创作的文集7部，译文集2部，发表了250余篇论文。其中影响较大的著作和文集有：著名哲学家和科学院士凯德洛夫的《恩格斯论化学》（该书于1971年出版，1979年经过补充、修改出了第二版，改名为《恩格斯论化学的发展》）；基辅学者集体创作的《化学发展的认识论和社会问题》；著名化学家、科学院院士谢苗诺夫于1952—1972年间发表了许多论文，出版了论文集《科学与社会》；等等。

除了上述著作外，还可以举出如下一些著作：凯德洛夫在化学哲学方面的著作，除了刚提到的以外，还有《道尔顿的原子论》（1949年），《化学元素概念的演化》（1956年），《伟大发现的一天》（1958年），《门捷列夫关于周期律早期著作（1869—1871）的哲学分析》（1959年），《原子学说的三种观点》（1969年），《伟大发现的微观解剖学。门捷列夫周期律100周年》（1970年）等，除了著作外，他还发表了许多论文。凯德洛夫是在化学哲学问题方面著述最多的一位学者。· · · · · · 日丹诺夫，是一位有机化学家，科学院通讯院士，他于1960年出版了《有机化学方法论概要》一书，还发表了许多论文。他同谢苗诺夫一样，可以说是化学家中发表化学哲学著述较多的人物。· · · · · · 库兹涅佐夫是前苏联著名化学哲学家、化学科学博士，他注意从哲学角度分析化学概念、理论的演变和发展，于1973年出版了《化学发展的辩证法》一书。以上分别介绍了一些代表人物及其代表作。还有许多学者发表了一些著述，也很有影响，不一一详细介绍了。

在前苏联，化学哲学问题研究之所以富有成果，除了其他原因外，还有一个重要原因，这就是有组织地开展学术活动。前苏联有一个传统，即注意建立和发展化学家和哲学家的联盟，把两方面的人组织在一起，共同开展研究活动，其基本组织形式之一叫做“哲学方法论习明纳尔”，俄文，有讲习班之意，哲学方法论习明纳尔就是哲学方法论讲习班。前苏联科学院所属研究所，有一些设有哲学方法论习明纳尔委员会，科学院曾专门制订了“关于自然科学问题哲学（方法论）习明纳尔章程”，章程指出，习明纳尔的主要任务是系统地深化科学工作者的马克思主义世界观，以便提高他们的科学研究水平，吸引他们积极参加自然科学领域中的思想斗争。

化学专业研究所也开展了哲学（方法论）习明纳尔活动，有些化学专业研究所以长期坚持开展活动，并积累了一些经验，取得了一定成效。例如，在科学院西伯利亚分院矿物原料加工物理化学基础研究所，据文献说，组织和开展哲学方法论习明纳尔活动已有数十年的历史，有严密的组织，有周详的计划，有适当的选题和内容。西伯利亚分院所属各研究所都设有哲学方法论习明纳尔委员会，经常开展学术活动，并在学术研究的基础上，出版哲学方法论丛书，已经出版了三本书，其中之一就是《化学的方法论和哲学问题》。

如果说习明纳尔是研究所内部的学术活动，那么，学术会议则是社会性的学术活动，是单位外部的学术活动。前一些年，见之于报导的有一些重要的化学哲学问题学术会议，例如，1978年3月，在诺沃西比尔斯克（科学城）举行了一次科学研究所和高等学校哲学方法论习明纳尔代表大会，主题是“科学技术革命时代的化学科学和对化学成就进行哲学综合的问题”；又例

参见《哲学问题》杂志，1976年第2期，第54—74页；《化学的方法论和哲学问题》 滴治鞅榘 掩顺霏勃*1981年版第20—21页。

参见《哲学问题》杂志，1978年第10期，第157—159页。

如，1982年4月，在莫斯科门捷列夫化工学院召开了一次高等院校“化学哲学问题”学术会议。*

无论从著作和论文看还是学术会议上讨论的问题看，涉及的范围是很广泛的。卡尔考文柯曾经将前苏联化学哲学问题研究的内容归纳为三个方面：第一，对化学已经取得的成果进行哲学分析，揭示其世界观意义。例如，从现代化学及其他科学提供的资料出发，讨论化学运动形式的特点，化学运动形式与其他运动形式的关系，物质的化学组成的间断性和连续性，物质的化学变化中的间断性和连续性；与此相对应，确定化学科学的对象，探讨化学和物理学、化学与生物学等科学的关系；与上述两个方面相联系，在化学哲学问题研究中，对于有没有、能不能建立化学世界图景问题开展了讨论。这方面的研究工作有助于深入认识化学所发现的现象的实质，认识化学现象与其他现象之间的联系，揭示化学运动形式在自然界总联系中的地位，至少对建立自然界一般科学图景有重要作用，同时对认识化学进一步发展趋势也有一定意义。

第二，关于化学科学的认识论和方法论问题。在这方面，许多文献探讨了化学中的一些概念、原理、模型等，分析了系统方法、控制论方法等在化学中的应用，研究了一些著名化学家的哲学思想和研究方法。这是化学哲学问题中最为广泛的研究领域。如果说第一方面着重于化学中的已有成果的分析，从而在某种意义上可以说是撇开了认识过程的话，那么这里所说的研究内容涉及认识过程本身。

第三，化学科学的社会意义，主要讨论了化学的理论研究和应用研究、理论和实践、现代化学和化工生产的关系，化学的发展与社会进步的关系，化学的发展对于人和环境关系的影响，等等。事实表明，化学所取得的成果已成为当代科学技术革命的一个重要因素，化学的发展和向生产领域、社会生活的渗透，提出了许多哲学和社会学问题，需要进一步研究。

上述三个方面基本上反映了前苏联化学哲学问题的研究内容。此外，还应当谈谈共振论问题。40年代末50年代初，与自然科学领域中开展的批判运动相联系，对化学中的共振论进行了批判。1949年以后，在《哲学问题》和其他一些刊物上发表了许多批判性文章，认为共振论在哲学上是唯心主义和机械论的。在这种批判的压力下，当时苏联一些化学家承认过去在分子结构研究中有重大缺陷，没有注意方法论问题。

50年代中期开始，随着在自然科学工作指导思想上的变化，一些苏联学者对批判共振论提出了不同的看法。1955年1月11日克努年茨和祖布柯夫在《文学报》上发表了题为《科学中的学派》一文，指出在共振论的讨论中没有根据地给现代化学发展中有巨大意义的量子理论概念和量子力学计算方法投上了阴影，根本怀疑共振论的创始人之一鲍林的全部研究的科学价值是不公平的。

1961年11月30日，以《哲学问题》杂志编辑部的名义邀请鲍林举行了一次座谈会，总编辑米丁在发言中指出，过去由于一些新的确实推进了科学进步的理论，其中也包括共振论，往往伴随着各种在我们看来是不正确的哲学构想，使某些唯物主义哲学家产生了对这些理论的否定的看法，这是不对的。这就表明，米丁开始把化学问题和哲学问题区分开，但似乎仍然认为在

参见《哲学科学》杂志，1983年第4期，第153—154页。*

哲学上的批评是有理由的。库兹涅佐夫在发言中着重从化学问题的角度发表了意见，他认为运用量子力学和定量方法研究化学过程是一个很有成果的和进步的方向，因此，力求把理论化学和量子力学联系起来的共振论，无疑起了巨大的作用。

1972年，库兹涅佐夫和佩琴金在《哲学问题》上发表了题为《化学的概念体系·共振论》的文章，着重从经典结构理论和分子结构的量子理论相互关系方面考察了共振论的方法论问题。文章认为，从方法论上看，对共振论的批判主要是针对该理论将共振结构客观化的倾向，不能说这种批判是毫无理由的，但是，这种批判在对概念客观化的方法论问题的态度上是不正确的。他们认为科学概念的客观化和客观对象的理想化，是统一的认识过程中互相矛盾和相互转化的两个方面。该文已经从肯定共振论的化学意义前进了一步，对过去批判中在方法论上的不适当也提出了看法。这些情况表明，在对于共振论的看法问题上，从40年代开始批判，50年代达到高潮，60年代开始进行反思，发生了重大变化。这种变化与政治气候的变化有联系，也与哲学上的反思密切相关。

总起来看，在前苏联，对化学哲学问题，确切地说，对于化学中的哲学问题，开展了广泛的研究工作，有些研究工作也比较深入，有些著作和论文也提出了一些富有启发意义的问题、观点或研究方向。但是，所有这些工作都是在“化学中的哲学问题”这个主题下进行的，没有提出建立化学哲学的任务。就笔者所看过的专著、论文而言，若从“化学哲学”的眼光来看，过去的研究工作尚处于分析阶段，也就是就一个问题、一个方面进行专题研究的阶段。应当肯定，这种工作是必不可少的，也是必要的、有意义的，只有在深入的分析研究的基础上才能进行综合的研究。正是因为尚处于分析阶段，因而也就显得不够系统，不够深入，使人在观察了研究现状以后不由自主地产生一种希望、一种渴望，就是在已有的分析研究基础上进行综合，建立化学哲学，把零散的研究成果系统化、体系化。这不是简单归纳所能成事的，它包含着更深入的研究，更高的起点和更广阔的视野。可惜，在前苏联的化学哲学界没有提出这个任务，因而也就不可能产生与这个任务相应的成果。现在看来，这个任务不可能提出了，至少在一个时期内不可能提出了，不能明确提出任务当然也就不可能完成任务。

3. 中国的化学哲学研究

我国的化学哲学研究从中华人民共和国建立时就开始了。50年代，我国一些学者译介了苏联对共振论的批判文章，苏联学术界对共振论的批判对我国化学界也产生了影响。在一个时期中，国内出版的有机化学著作，特别是结构理论方面的著作，大都设专节讨论共振论问题。如何认识译介前苏联批判共振论的文章这件事？本书作者认为，如同任何事物都有两重性一样，这种译介也有两重性。一方面，这种译介产生了消极影响，在向前苏联学习的气氛中学习了前苏联的错误的东西；另一方面，通过译介引起了我国化学界和哲学界对化学哲学问题的注意，这不能不说是一种推动，尽管批判本身是错误的，可是通过批判及对批判的批判，推动了化学哲学问题的研究。可以设想，如果没有这种译介，也就可能不受影响，同时也就不会引起思考和反思，也就不会进步。历史经验表明，对于国外的一些理论学说，那怕是错误的有毒害作用的理论学说，经过译介使国人知晓，正确的理论学说不用说将

使国人受益，即使是错误的、有毒害作用的，开始时人们感到新鲜，一些人难免囫囵吞枣，因而难免受毒害，待经过深入研究和反思，增长了学识，增强了免疫力，则是一个进步。

50年代至60年代、在讨论共振论的同时，我国化学哲学问题的研究还涉及了其他一些问题，如《化学通报》等杂志发表过关于物质和运动的关系，周期律的哲学意义，维勒合成尿素与生命力学说以及其他问题的文章。70年代，特别是70年代中期，在当时的政治气候的直接影响下，曾有文章讨论了热寂说以及热力学第二定律问题，分析了化学发展中唯心主义和唯物主义的斗争，并有文章提出了批判自然科学中唯心主义的倾向的问题。70年代末80年代初，我国化学哲学问题研究进入了一个新时期。1979年5月，中国自然辩证法研究会组建了化学专业组筹备小组，在该小组组织下，我国化学哲学研究蓬蓬勃勃地开展起来，并于1981年5月在湖南长沙召开了全国首届化学辩证法学术讨论会。与会代表66人，半数是化学专业工作者，半数是非自然辩证法工作者，提交大会的论文有40余篇。这次会议讨论的问题非常广泛，涉及化学的研究对象、化学科学的特点，化学与其他科学，特别是与物理学的关系，共振论问题，化学中的方法论问题，等等。通过这次会议，总结了过去的研究工作，展望了未来化学哲学的发展。这次会议决定，以后每隔两年召开一次全国性化学哲学学术会议。1983年7月，在长春市和吉林市召开了第二次会议，并扩大为全国化学化工辩证法学术会议，除了化学工作者和自然辩证法工作者以外，还有在化工生产第一线的工程技术人员、干部出席会议，进一步推动了我国化学化工辩证法的研究工作。就是在这次会议上，具体研究和落实了如何总结我国化学哲学研究成果的问题。历经几年，于1986年，由科学出版社出版了一部论文集式的著作《化学哲学基础》，以此为契机，提出了建立化学哲学的任务。此后，中国自然辩证法研究会化学专业组又陆续组织编写了化学思想史、化学社会学等方面的书；1992年，廖正衡等编的《化学学导论》一书出版。这些都表明，我国在化学哲学、化学思想史、化学社会学和化学学等方面的研究工作，取得了进展，也很有成绩。同时，也提出了新的问题：怎样看待化学哲学？它与化学思想史、化学社会学和化学学有什么区别和联系？如果不解决这些问题，就有可能把化学哲学的范围不适当地扩大，甚至把它搞成一个大口袋，什么都可以装在里面。

在探讨这些问题以前，首先应当说明什么是化学哲学问题，而为了说明这个问题，有必要从化学中曾经引起过哲学论争的问题讲起。下面，就让我们谈谈这方面的问题。

二、哲学的基本问题和化学中的哲学论争

1. 哲学的基本问题

恩格斯在《路德维希·费尔巴哈与德国古典哲学的终结》一书中所提出的哲学基本问题，也就是化学哲学的基本问题。恩格斯在这本书中指出：“全部哲学，特别是近代哲学的重大的基本问题，是思维和存在的关系问题。”他还提出：“哲学家依照他们如何回答这个问题而分成了两大阵营。凡是断定精神对自然界说来是本原的，从而归根到底以某种方式承认创世说的人（在哲学家那里，例如在黑格尔那里，创世说往往采取了比在基督教那里还要混乱而荒唐的形式），组成唯心主义阵营。凡是认为自然界是本原的，则属于唯物主义的各种学派。”恩格斯在阐述了这些原理之后特别说明，“除此之外，唯心主义和唯物主义这两个用语本来没有任何别的意思，它们在这里也不能在别的意义上被使用。”

从恩格斯的论述来看，思维和存在的关系也就是精神和自然界的关系，哪个是本原，是哲学的基本问题。本原，有根源、本来存在之意，根源就是本来存在、从来就有的，根源的东西就是本来存在的东西。本原是相对于派生而言的，派生是相对于本原而说的，有本原就有派生。自然界是本原，是本来就有、从来就有的，它是精神的根源，而精神是从自然界派生出来的，也就是自然界物质发展到一定阶段产生出来的东西。恩格斯说，哲学家依照他们如何回答这个问题而分成两大阵营，这说明，哲学基本问题的这个方面的含义是区分唯物主义和唯心主义的唯一标准，而且唯心主义、唯物主义这两个用语也只能在如何回答自然界和精神哪个是本原的意义上使用，除此之外，不能在别的意义上使用。

恩格斯在阐述了上述原理之后又指出：“思维和存在的关系问题还有另一个方面：我们关于我们周围世界的思想对这个世界本身的关系是怎样的？我们的思维能不能认识现实世界？我们能不能在我们关于现实世界的表象和概念中正确反映现实？用哲学的语言来说，这个问题叫做思维和存在的同一性问题。”也就是通常所说的世界的可知性问题，对这个问题的不同回答可以划分可知论和不可知论。

恩格斯实际上把思维和存在的关系分为两个方面，先说的一层意思是第一方面（虽然恩格斯没有直接用“第一方面”的说法），后说的一层意思，也就是恩格斯说的“另一方面”是思维和存在关系的第二个方面。第一方面是关于本原问题，在哲学史上曾被称为本体论。本体论是关于存在或一般存在的学说，也就是关于世界本原的理论。第二方面是关于认识问题，在哲学史上被称为认识论。哲学史上的本体论和认识论是各自孤立的，本体论考察存在，认识论研究认识。在马克思主义哲学中，本体论和认识论是统一的，并且是在唯物主义基础上的统一。无论是本体论还是认识论，其研究对象都是思维和存在的关系。本体论是从思维和存在的关系研究存在的，认识论是从思维和存在的关系研究认识的，本体论和认识论在思维和存在的关系上得到了统一。马克思主义哲学坚持存在是第一性的，思维是第二性的，自然界是第一性的，精神是第二性的，因而马克思主义哲学以唯物主义为基础解决

了本体论和认识论的统一问题。

从哲学的基本问题出发，可以辨别哲学上的唯物主义和唯心主义，划清它们之间的界线，可以讨论化学中的一些哲学问题，并弄清什么是化学中的哲学问题。为此，让我们具体分析一下化学中的哲学论争，而这种论争是很多的，不可能一一加以讨论，仅就其中一、两个问题作一简略回顾和反思。

2. 关于原子论

原子论，确切地说是化学原子论，曾经是现在仍然是化学中的基本理论之一。对于原子论，我们可以从两种既相区别又相联系的不同角度去观察。这两种角度就是化学的角度和哲学的角度。

从化学角度观察化学原子论，可以提出这样一些问题：什么是原子，它有什么性质，原子在物质组成和化学变化中扮演什么角色，原子如何形成分子等。化学原子论对这些问题作出了明确回答。例如，依据道尔顿提出的化学原子学说，原子是元素的最终组成，原子是不可见的，是既不能创造也不能毁灭的，原子是不可再分割的基本微粒，它们在一切化学变化中保持其本性不变；原子有形状、质量和其他性质，每一种元素以其原子的质量为其最基本的特征；同一元素的原子，其形状、质量及各种性质都相同，不同元素的原子，其形状、质量及各种性质不同；不同元素的原子以简单数目的比例相结合，形成化学中的化合现象，如此等等。所有这些，都属于化学原子论的具体化学内容。

道尔顿依据当时的认识水平，对于不同原子之间相互结合提出了假设。他提出：如果1个A原子和1个B原子生成一个C原子，这个C原子是个二元化合物；如果1个A原子和2个B原子生成1个D原子，这个D原子是个三元化合物；等等。这些假设中包含着合理的因素，如指出了原子按一定比例相结合，依据道尔顿采用的概念，简单原子按一定比例结合成复杂原子；同时也包含着许多不确切和不正确的内容，如没有分清原子和分子（或化合物）概念，把化合物称为复杂原子，对原子之间结合比例的规定，带有主观武断的性质，缺乏实验证据，等等。但是所有这些，无论是合理的因素还是不确切或不正确的内容，都属于化学原子论本身的问题，都属于化学假说的范围。在这里只有正确和错误（或者说相对真理和相对错误）、确切和不确切之分，没有唯物主义和唯心主义可言，即使道尔顿提出原子相互结合原则时有些“主观武断”，甚至是想当然，也是受当时历史条件的限制不得已而为之，或者确切地说，由于历史条件的限制，即由于化学资料的积累还不足以概括出科学的理论，对原子之间相互结合的数量关系还缺乏科学的认识，可是迫于实际需要又不得不对原子间相互结合原则提出一定看法，于是，道尔顿只能提出猜测和假定，不这样做就不能推动认识的发展。正如恩格斯所指出的：“只要自然科学在思维着，它的发展形式就是假说。一个新的事实被观察到了，它使得直到现在对和它同类的事实的说明方式成为不可能的了。从这一瞬间起，就需要新的说明方式——它最初仅仅以有限数量的事实和观察为基础。进一步的观察材料会使这些假说纯化，取消一个，修正一个，直到最后纯粹地建立起定律。如果人们要等待建立起定律的材料纯粹化起来，那么这就是在此以前要把运用思维的研究停顿下来，而定律也就因此永

远不会出现。”作为猜测和假设，它本身就存在两种可能：猜对了或猜错了。我们不能因为道尔顿猜错了就说他的“猜”（即假设）是唯心主义的，也不能因为他猜对了就说他的“猜”是唯物主义的。

从哲学角度看待化学原子论，可以提出这样一些问题：原子是不是客观实在，是不是物质的一种具体形式，原子是物质的最基本的粒子还是物质结构中的一个层次，原子是可变的还是不可变的等。这些问题无疑与化学原子学说密切相关，因为原子是否客观存在，是否可以变化等，也是对原子的一种认识，或者说是原子性质的一种看法；同时，又超出了化学原子学说本身的范围，成为化学中具有哲学意义的问题了。为什么呢？这是因为，原子是否客观存在的问题，已经涉及到思维和存在的关系了，这个问题的实质在于，原子概念（思维中或理论中的原子）和客观的原子（作为客观实在的原子），哪个是本原的，哪个是派生的。具体地说，是客观实在通过曲折的过程在人们的头脑中获得反映，从而形成原子概念呢？还是在世界上本来就不存在原子，只不过是人的头脑先想出了原子概念，然后强加于自然界呢？或者人们想出原子概念只是为了解决问题的一种方便手段。所有这些问题可以用一句话来概括，这就是原子的客观性问题。这个问题，与化学（和物理学）研究密切相关，它是化学（和物理学）研究的出发点和建立理论的基础，又不再仅仅是化学（和物理学）本身的问题，或者甚至可以说，已经不是化学（和物理学）的问题，而是化学（和物理学）中的哲学问题了。因为化学（和物理学）只是把原子的客观性作为潜在的前提，而对它不作具体讨论。从哲学方面看，原子是否具有客观性的问题，则是一个重要的、原则性的问题。在哲学上，从不同的哲学立场出发，对这个问题作出了不同的回答，于是发生了哲学观点上的分野：承认原子是客观存在的，原子概念是对客观实在的反映，属于唯物主义观点；坚持与此相反的观点，属于唯心主义观点。

在原子论发展史上，一些化学家，如道尔顿、盖吕萨克（Gay·Lussac）、李比希（Liebig）等，认为原子是客观存在的；另一些化学家，如荷兰的范特霍夫（Von't Hoff），虽然在化学研究中提出了碳的四面体模型，开创了立体化学新领域，但是，他却认为，原子、分子和四面体本身的存在都是值得怀疑的，凯库勒（F·A·Kekule）明确提出：“从哲学观点来说，我不相信原子的实际存在”；还有的化学家认为原子和分子是否存在是不可知的。总起来说，对于原子（包括分子）是否客观存在，在哲学观点上分为三派，或分属三种不同的观点：唯物主义、唯心主义和不可知论。

科学的历史表明，反对原子的客观性，甚至从根本上反对原子论，在19世纪曾经成为一种思潮，其矛头曾被引向传统的自然科学唯物主义。反对原子论的代表人物之一，是著名的化学家和物理学家奥斯特瓦尔德（F·W·Ostwald），他于1895年提出“唯能论”，并企图用“唯能论”克服科学中的唯物主义。

关于原子是否客观存在的争论，随着实验和理论的发展于20世纪得到了解决。1905年，爱因斯坦（F·Einstein）写了《分子大小的新测定法》和《热的分子运动论所要求的静液体中悬浮粒子的运动》等论文，指出只要这里所讨论的这种运动连同所期望的有关它的规律性，实际上能够被观测

恩格斯：《自然辩证法》，于光远等译编，人民出版社，1984年版，第117页。

中科院科学史所近代科学史研究室编：《20世纪科学技术简史》，科学出版社，1985年版，第34页。

到……精确测定原子的实际大小也就成为可能的了，在后一篇论文的最后一节，即第5节，他从求出在时间 t 内粒子在 x 轴方向上的位移的平均值得到一个公式：

$$\lambda_x = \sqrt{t} \cdot \sqrt{\frac{RT}{N} \cdot \frac{1}{3\pi K\rho}}$$

取 N 为 6×10^{23} ，选取 17 的水作为液体 ($K=1.35 \times 10^{-2}$)，而粒子的直径 P 为 0.001 毫米，求得 $\lambda_x = 0.8$ 微米。他指出：“反过来，所求得的关系能够用来测定 N 。我们得到

$$N = \frac{1}{\lambda_x^2} \cdot \frac{RT}{3\pi K\rho}$$

但愿有一位研究者能够立即成功地解决这里所提出的、对热理论关系重大的问题。”*

爱因斯坦论文发表后，许多物理学家对爱因斯坦的理论进行实验验证，1908 年法国的佩兰 (Perrin) 发表了关于检验布朗运动理论的实验研究的四篇论文，1909 年又发表《布朗运动和分子的实在性》一文。佩兰依据爱因斯坦提出的公式，选取大小相同（在半径为 2.12—57.5 Å 的范围内）的藤黄粒子和乳香粒子做了一系列实验，测定它们在水中布朗运动位移，算出 N 的平均值等于 6.4×10^{23} 。他利用刚刚问世的超显微镜观察藤黄粒子的竖向分布，发现用大小相等的藤黄粒子制备的悬浮液中，这些粒子也像空气一样做竖向分布，槽底的粒子数多，上面的粒子数少，依据测高定律公式 $\ln \frac{n_0}{n_1} = \frac{N}{RT}$ 求得 N 值为 6.0×10^{23} 。佩兰又用大小相差很大的粒子做实验，所得结果皆与分子运动论的推测相符合，证实了分子的真实性与可直接观察到的粒子一样。

1908 年 11 月，奥斯特瓦尔德在《普通化学大纲》第四版序言中改变了对原子、分子客观性所持的否定态度，他写道：“我完全清楚地认识到，不久前我们已经有了实验证据，证明物质的分立的或颗粒状的本性——这样证据原子假说寻找了一百年甚至一千年都未曾找到，一方面，通过 J·J·汤姆孙长期杰出的工作，完全成功地离析出并计数了气体离子；另一方面，通过一系列研究，最后由佩兰最完满地证明了布朗运动符合于分子运动假说的要求，这就使得连谨慎的科学家也有充分理由可以谈论关于充满空间的物质原子性组成的实验证据了。原子假说由此提高了地位，成为一种基础巩固的科学理论，并有权要求在用来介绍我们普通化学知识现状的教科书中占有一席之地。”

恩格斯说得好，对唯心主义不可知论“哲学上的怪论的最令人信服的驳斥是实践，即实验和工业。”科学实验驳倒了在原子客观性问题上的唯心主义和不可知论的观点，证实了唯物主义观点。

在原子论中，除了关于原子客观性这个问题以外，还有一些问题，如原子是可分的还是不可分的，原子是可转化的还是不可转化的，等等，既是具

《爱因斯坦文集》，范岱年等编译，商务印书馆，1979 年版，第 2 卷，第 72、82 页。

中科院科学史所近代科学史研究室编：《20 世纪科学技术简史》，科学出版社，1985 年版，第 37 页。

《马克思恩格斯选集》，人民出版社，1972 年版，第 4 卷，第 221 页。

体科学（化学和物理学）要研究和解决的问题，同时也涉及哲学观点和哲学思想问题，在这些问题上反映了形而上学和辩证法的对立。

3. 关于共振论

在化学的各种哲学问题中，没有哪一个问题像共振论那样引起长期的讨论，也没有哪一个问题像共振论的哲学论争影响那么深远，以致时至今日，一谈起化学哲学问题，人们自然会想起对共振论的批判。因此，在讨论化学中的哲学论争时，不能不专门谈谈共振论问题。

前面曾指出过，对共振论的批判，首先是在前苏联展开的。美国著名化学家鲍林（L·Pauling）于1931—1933年提出“共振论”以后的一个时期，该理论在苏联化学界引起了积极的反响。苏联科学院通讯院士苏尔金及其学生加特金娜于1946年出版了《化学键和分子结构》，介绍了共振论，并用共振论解释各种化学问题。1947年出版了他们两人译校的鲍林的著作《化学键的本质》，1948年由他们两人译校的惠兰德（Wheland）的《共振论及其在有机化学中的应用》一书出版，此外，他们还在杂志上发表了许多文章，论述共振论的性质及其应用。赞成这个理论的还有其他一些苏联化学家，如沃尔肯施泰因·等。

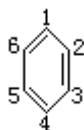
几乎与译介共振论的同时，对共振论的批判也开始了。切林采夫从1945年起写了一些文章批判共振论，他指责一些化学家赞同所谓的“世界的科学”，在前苏联宣传中介论和共振论，迫使他不得不起来反对这些理论，他将中介论和共振论视为伪科学理论。切林采夫的《有机化学理论纲要》一书于1949年出版，在该书中系统阐述了他对中介论和共振论的看法。切林采夫的意见引起广泛注意。1949年第6期《化学的进展》杂志上发表了苏考洛夫的《论化学键理论的物理基础》一文，他认为共振论仅仅有标记方法的意义，这个方法的出现较之经典原子价理论是个进步，但是他对此持批判态度，这篇文章着重从物理学基础、化学键的本质这个角度对共振论进行分析，没有上纲上线，没有给共振论扣什么哲学帽子。1949年11月3日，莫斯科大学举行共振论专题讨论会，会后塔捷夫斯基和沙赫巴洛诺夫合写了一篇文章，题目是《论化学中的一种马赫主义理论及其宣传者》，刊在1949年第3期《哲学问题》杂志上，这标志着将共振论这种化学理论戴上了哲学帽子的开始。一时间，许多杂志，如《科学院报告》、《化学的进展》、《哲学问题》、《物理化学》等，先后发表文章，许多科研所，如苏联科学院普通化学和无机化学研究所、有机化学研究所、列宁格勒技术研究所、卡尔波夫物理化学研究所等，纷纷举行讨论会。1950年8月《真理报》发表社论，支持这种讨论，这标志着前苏联官方直接介入对共振论的批判。1951年6月11—14日，苏联科学院化学局召开了有机化学中化学结构理论问题全苏讨论会，苏联科学院院士捷列宁在会上做了《有机化学中化学结构理论的状况》的报告，会上最后通过了《有机化学中化学结构理论问题讨论会的决定》，会后由列乌托夫执笔写了《会议总结报告》，以《有机化学中化学结构理论问题全苏讨论会述评》为题发表在《哲学问题》（1951年第4期）上。《决定》和《述评》中，把对共振论的批判同其他科学领域中的批判联系起来，认为共振论是唯心主义向唯物主义进攻的一个组成部分，指责赞成和宣传共振论的化学家；同时还指责哲学家，认为他们对理论化学的方法论问题注意不够，并且说这一点特别表现在首先揭露共振概念中的唯心主义的不是哲学家反而是化

学家。会后，一些哲学家也急起直追，凯德洛夫在《布尔什维克》杂志上发表长篇文章《反对有机化学中的唯心主义与机械论》，该文没有具体分析共振论的内容，而是从哲学上指责共振论是唯心主义的、机械论的、还原论的。

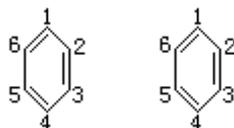
前苏联对共振论的批判的有关文章和情况，于 1952 年初开始，陆续被译介到我国化学界和哲学界，在我国学术界也开始批判共振论。但是，对这种批判一直存在不同看法。1957 年以后至 60 年代初，在毛泽东提出“双百方针”的感召下，一些刊物上对共振论又开展了讨论，实质上是对共振论重新评价，对批判共振论进行反思。不久，文化大革命开始，这种重新评价和反思未能进行下去，相反，又陷入更广泛的批判运动。1979 年，在《化学通报》和《自然辩证法通信》上先后发表了一些文章，有的提出再评共振论，有的提出发扬学术民主是发展科学的必要条件，总之“旧事重提”，为了给共振论“平反”，对过去的批判进行反思。

在今天看来，对共振论的批判以及对批判的批判，似乎已成为历史了。现在，恐怕没有人再去重复过去的错误，也没有人再去办过去的蠢事了。然而，从哲学角度看问题，或者说从化学哲学角度看问题，过去认为共振论在哲学上是唯心主义的，无疑是错了，可是错在哪里呢？实际上并没有讲清楚，更没有讲透彻，在讨论化学中哲学论争时，再就这个问题做一些分析还是有意义的。

共振论的提出不是偶然的，它是经典化学结构式不足以反映一些化合物的性质、而又试图在经典结构理论范围内解决这个问题情况下的必然产物。众所周知，自凯库勒提出苯的价键结构式以后，逐步发现，这种结构式与化学事实不完全相符。例如，



这个式子能够说明它的一元取代物只有一种，二元取代物只有三种等事实。可是，拉登堡 (Ladenburg) 提出异议，他认为就该式来看，1 和 2 与 1 和 6 不同，邻位二元取代物应该有两种，可是实际上邻位二元取代物只有一种。据此，他提出了与此式相对应的第二式，即有如下两种结构式：



他还认为，原子价如同原子间的碰撞，每个 C 原子以相同次数与同它直接相连的两个 C 原子相碰撞，形成两种结构式的连续过渡。但是这种解释是不能令人满意的，而且不能解释苯分子的稳定性和易发生取代反应而不易发生加成反应的事实。

后来，不少化学家还提出了其他形式的结构式，试图解释已知的化学事实。总起来看，各种结构式反映了两种化学观点：其一，坚持采用单、双键的结构式；其二，不受这种框架的限制。沿着前一种思路，一些化学家提出了一些新的概念、新的假定，如伊兹迈利斯基于 1913—1920 年引入了“中介

参见胡盛志：《再评“共振论”》，《化学通报》，1979 年第 2 期；何祚麻：《旧事重提》，王祖陶：《学术民主是发展科学的必要条件》，均刊在《自然辩证法通信》，1979 年 5 月 10 日。

结构”概念，埃脱 (Arndt) 采用“中介结构”概念，提出了“中间状态论”，即认为苯分子的结构处于两种“极限结构”的中间状态。在此基础上，罗宾孙 (Robinson) 和英果尔德 (Ingold) 提出“中介论”，他们指出，有些分子的真实结构不能用任何一个价键结构式来表示，而是“中介”于两个或两个以上价键结构式所表示的结构之间。“中介论”能够解释凯库勒式的第一个疑难，即苯的邻位二元取代物只有一种，但是不能解释苯的稳定性问题，他们提出“中介效应”以说明这个问题。

1931—1933 年间，鲍林在美国化学会志上连续发表文章，提出了共振论。1954 年 12 月，曾以“近代结构化学”为题发表诺贝尔演讲，也阐述了共振论。鲍林认为，许多有机化合物的性质，特别是芳香族化合物的性质，不能用唯一的价键结构来解释，而应当假定比较复杂的电子结构式。他指出，有人认为共轭分子和芳香族分子的许多性质应当用两个或两个以上价键结构式来描述，这个思想在中介论中已经表述出来了；斯莱特和休克尔等人也曾指出，这些假定可以给出量子力学解释，也就是说，这样一种波动力学近似函数，可以从相当于每个假定的价键结构的波函数之和得出，分子的结构可认为是各个价键结构的杂化体，或者说在这些结构之间共振，这就是共振理论。依据这个理论，所谓共振，就是分子的真实基态共振于几个价键结构之间，换句话说，任何一个合理的结构式都不能表示出分子的真实基态，却可以用几个共振结构来表示。

这些都是对具体化学问题的解释，这种解释是否正确，化学家之间可以有不同看法，不同看法之间可以展开争论，这种不同看法的争论均属于化学家之间对化学问题的争论。在这里根本谈不到唯物主义还是唯心主义的问题。如果要从哲学角度看问题，那么鲍林提出共振论的基本思路，是从一些分子（和晶体的实际）存在着的性质出发，鉴于已有的结构理论不能对这些物质的性质做出充分的、科学的解释，从而在原有理论上增加新内容，其目的还是为了更充分地解释已知的事实。这种思路若用哲学术语来表述，就是从实际出发，提出理论解释，也就是从物到感觉和思维的思想路线，是符合唯物主义认识论原理的。尽管鲍林本人不一定或根本没有意识到这一点，但是，他实际上是遵循这种思想路线的。这是绝大多数自然科学家在长期研究工作中形成的一种自发的或自然科学的唯物主义的表现。所谓自然科学的唯物主义，正如列宁所指出的，就是绝大多数自然科学家对我们意识所反映的外部客观实在的自发的、不自觉的、不定型的、哲学上无意识的信念。

如果从哲学角度看待共振论，首先应当看到，从中介论到共振论，都是为了更合理地解释已知的化学事实，是从实际出发的，因而是符合唯物主义认识论的。至于这些理论是否正确，属于化学理论本身的问题，在这里只有是非之分，没有唯心主义可言。对于共振论是否正确，共振论在化学发展中的作用，化学家们可以有不同看法。事实上，自鲍林提出该理论以后，对这个理论本身就有不同看法。有赞成的，有反对的，有采取一分为二观点的。例如，有的文献指出，共振论所要继承的是化学家们熟悉的单、双键等传统概念，然后向化学特别是有机化学领域作直观外推，经典结构式不可轻视，共振论的合理内核或许就在这里；有的文献则认为，共振论虽然应用了量子力学的方法，但它的基准点仍然放在过时的经典结构理论之上，至于用波函数描写极限结构和共振结构，而不是用来描写电子运动状态，显然与客观本质背道而驰。就是对共振论在现代化学结构理论中的作用，仍然存在不同看

法或评价，有人认为即使在分子轨道理论获得迅速发展 的情况下，在讨论一些分子结构时应用价键理论和共振论的正确方法还是可以的，有人则认为，现在随着理论化学的发展，以经典结构理论的结构要素为出发点的共振论已经过时了。所有这些，都是从化学理论的角度对共振论提出的看法。共振论作为一种理论和方法，正如科学假说一样，存在不同看法和不同认识，是自然的、正常的事情。

其次，从哲学角度看问题，对于共振论应当提出这样一些问题，共振结构是不是客观的分子结构的某种近似的反映，共振理论与客观实际的关系是怎样的，等等。在这方面，鲍林及其合作者，既说了一些从哲学家的眼光来看表述得不够确切的话，也说了一些很有辩证观点的话。例如，在《化学键的本质》一书的第三版（1959年）中，为答复对共振论的哲学批评，特别增加了一节，即第六章第五节，标题是“共振论的本质”。在这一节中，鲍林指出，共振论并不比有机化学经典结构理论来得更虚构些，共振论中的各个参与的价键结构也并不比经典结构理论中的结构要素如双键来得更唯心些；谈到苯的分子结构时，鲍林认为用共振论来描述时所用几个结构是构想出来的，它们并不真正存在；在长期地应用了经典结构理论的经验中，化学家们在讲到或者甚至在想到碳—碳双键以及理论中的其他结构单元时，就觉得好像它们是真正的存在一样，但是，经过思虑以后，我们将能够认识到它们并不是真正存在的，而仅是理论上的构想，犹如苯的单个凯库勒结构一样，我们不可能把碳—碳双键分离出来而用实验来研究它。鲍林还指出，正是由于应用共振论来描述分子时所用的几个结构是构想出来的，它们并不真正存在这一点，曾被作为反对共振论的依据。

从上面转述的话中可以清楚地看出，鲍林所要阐明的意思，本来是想说明，由于用单一的结构式不能满意地表示出分子（如苯）的性质，因此共振论构想出几个结构式，用它们的共振来表示；每一个结构式并不真正存在，但是，这些结构式都是为了表示所研究的分子的结构。如果用哲学的语言来表述，概念、理论或思想模型都是客观实在或客观原型的某种近似的反映，概念、理论和思想模型本身只存在于思维中，是在思维中构想出来的（当然是基于实验事实构想出来的），它们在现实中是不存在的，但是它们所反映的原型、对象却是客观的、是在现实中存在的，人们之所以要构想出结构式，正是为了反映现实的结构。鲍林作为一个化学家，面对来自哲学方面的不适当的批评，不能要求他用地道的哲学语言反驳对他的批评。鲍林用自己的语言回答了这种批评，意思是清楚的，用语上、表述上难免有不够确切之处。就在他的这些反批评或者说自我辩护的话中，也包含一些辩证思想，他实际上通过自己的研究工作自然而然地领悟了，理论、概念、结构式等，只能近似地反映所研究的对象，二者不能绝对同一的，不能把结构式看作与实际的结构完全等同的，也不能把实际的结构看成完全如结构式表示的那个样子。

勿庸讳言，由于鲍林在阐述共振论的本质时有些用语不够确切，这就给人以口实提出哲学上的批评，特别是惠兰德的一些表述，使一些人在哲学上抓住把柄。惠兰德在《共振论》一书中说过这样的话，其大意是，共振概念比起其他大部分物理理论来，在一种更基本的意义上只是一种人为的概念，它不反映分子本身的任何内在的特性，只是一种数学的方法，一种物理学家或化学家为了自己的方便的创造，实际上，如果量子力学问题能够精确地解决，或者，甚至只要采用了其他近似方法来解决，共振观念就不可能发生；

可是，这种状况无论如何不会缩小这个概念的实际方便，但是，这种状况却使我们经常记住，共振只有关系到趋近于真正情况的特殊方法时才有意义，同时，还要经常记住不要牵涉到各个共振结构的物理意义，这种物理意义共振的结构是没有的。惠兰德这些话，与鲍林在共振论的本质一节中所说的话，基本思想是一致的，他要说明共振结构是对实际结构的近似反映，却说了一些从地道的哲学观点看不甚确切的话。

应当着重指出的是，即使对共振论作出的进一步理论解释不那么准确，或者说对共振论作出的哲学解释不那么正确，也决不能由此从根本上否定了共振论，确切地说，不能由于哲学上的论据去肯定或否定一种化学理论或假说，也不能由于对共振论的哲学解释上有不够确切之处，或者有人认为有不够确切、不够正确之处，就认为共振论本身是什么唯心主义的，我们已经说过，作为一个具体的化学理论，可能是正确的也可能是错误的，或者包含正确的内容也包含错误的内容，对这种理论本身谈不到唯心主义，因为唯心主义这个术语只能在将思维视为本原的意义上使用，不能在其他意义上使用。在 20 世纪 50 年代前后，前苏联发动的对共振论的批判，除去政治背景和行政干预不谈，恰恰是将本来属于化学理论本身的是非问题硬拉到哲学上进行批判，任意戴上哲学帽子而否定化学理论本身，也就是依据本来就不正确的哲学上的论据去否定一种化学理论，在这样做的时候，往往抓住共振论创始人一些表述上或者说是对其理论解释上的不够准确、不够确切之处作文章，抓住支言片语作批判的对象，完全不看他们在解释中所要说明的问题的本质。这种批判严重损害了马克思主义哲学的声誉，教训是深刻的。

三、化学哲学的内容、地位和意义

1. 什么是化学哲学

从对化学原子论和共振论的分析中可以了解到，化学问题和化学哲学问题是有区别的，不能将它们混为一谈。区别在哪里呢？化学问题问的是化学所研究的是什么，怎么样，为什么。对化学问题，从化学研究的具体内容出发，通过实验提出解答，又通过实验来验证解答是否正确。化学问题的问和答，是就化学的研究对象而论研究对象的，不涉及论的内容和结果（即形成的理论）与对象的关系，或者确切地说，是将研究对象的客观实在性当做不言而喻的、潜在的前提。

例如，化学原子论研究的是物质的组成和变化的基础，提出的问题是什么是原子，它有什么性质，它在化学变化中起什么作用，它如何组成化合物，等等。道尔顿在建立原子论过程中，基于对大气均匀性的观察和思考，并与化学实验事实相结合，抽象出原子概念，论述了原子的性质，假定了原子的结合原则，所有这些都是将原子作为研究对象的基础上提出来的。就这些具体内容而言，没有论及或没有专门论及原子概念和客观实在的关系。也没有论及或没有专门论及这个理论和客观现实的关系。同样，共振论的提出，主要在于说明当时理论（即经典化学理论）未能说明的问题，如为什么采用单键、双键相间的结构式不能很好地说明有些分子的化学性质，应当如何解释这些分子的性质。可以看出，共振论本身提出的问题和解答，也是从具体研究对象出发，涉及为什么和怎么样。

化学哲学问题问的是，原子是不是客观存在的，或者说，原子有没有客观性，原子是不是可分的、可转化的，共振论作为一种化学理论或假说，它是不是对现实的反映，更具体地说，共振论所提出的结构式是不是客观的分子结构的近似反映，如此等等。像这样的问题都以这样或那样的方式提出了或涉及了思维和存在、主观和客观、理论和实践、相对和绝对等等关系。对这些关系问题，从不同的哲学观点出发可以提出不同的解答。例如，从存在是第一性的，思维是第二性的观点出发，就会认为原子概念是对客观实在的反映；或者反过来说，认为原子概念是对客观现实的反映，就是存在第一性思维第二性原理的具体体现，就是唯物主义的观点，而相反的观点是唯心主义的观点。又例如，认为原子是物质结构中一个层次，自然界中没有绝对不变的东西，原子也是可以分割的，可以转化的，这是辩证法观点的体现，而相反的观点具有形而上学的性质。

特别应当再次强调的是，作为具体的化学问题，或者作为自然科学本身的问题，不能任意划分唯物主义和唯心主义。一种化学理论或假说，正如前面已经指出过的，可能是错误的，也可能是正确的，或者既包含正确的内容也包含着错误的部分，可能得到大多数化学家的支持和承认，也可能受到批评或反对，无论哪种情形，凡属化学本身的问题，只能区分是与非、真理与谬误，或者区分相对真理和相对错误。化学（或一般地说自然科学）问题中的真理和谬误与化学哲学问题中的唯心主义和唯物主义，是两对不同的范畴，不能混为一谈。划分唯物主义和唯心主义的标准，是看如何回答思维和存在何者为本原的问题，或者说看其如何体现出对哲学基本问题的回答，这就是说，有时并没有对这个问题作出直接的、明确的回答，但从其叙述中、

从其上下文中可以看出这种回答，体现出对哲学基本问题的回答。划分真理和谬误的标准是实践，是实验和工业。诚然，唯物主义和唯心主义也有个是与非的问题，也就是说看哪种哲学观点或者哲学理论与实际相符合。例如，化学的和物理学的实验证实了原子和分子的客观性，也就证明了在原子客观性问题上唯物主义观点是正确的，唯心主义观点是不正确的。但是，唯物主义和唯心主义不是依照其是否符合实际而划分的，而是依照其如何回答哲学基本问题的第一个方面（即思维和存在何者是第一性的）来划分的。

应当承认，化学问题和化学哲学问题之间的区分不是绝对的，在许多情况下是互相交织在一起的，理论性越强，二者的界限就越难以分清。尤其是在一些基础性理论中，例如在量子力学中，对一些基本性问题的理论解释，实际上已达到了自然科学理论和哲学理论的边缘地带，已经很难截然分清楚哪些解释属于对自然科学问题的解释，哪些解释属于对自然科学哲学问题的解释。自量子力学建立以来，围绕量子力学所展开的理论争论，其中有些很难截然划清哪些争论是量子力学问题的争论，哪些争论是量子力学哲学问题的争论。

但是，笔者认为，很难划分不等于不能划分，提出区分化学问题（或自然科学问题）和化学哲学问题（或自然科学哲学问题）还是必要的、有意义的。这是因为，这两个方面的问题毕竟是有区别的，尽管在一些情况下要认识这种区别很困难，有区别就应当注意这种区别，认真研究这种区别，以免将二者相互混淆起来。同时，提出这个问题可以引起人们的思考，从而有助于化学哲学研究。

基于以上所述可以指出什么是化学哲学了。化学哲学是研究化学中哲学问题的一门学问，是以化学为研究对象的哲学，在我国曾被称为化学辩证法，这个名称与自然辩证法相协调。自然辩证法作为一门学科，是一个广泛的研究领域，包括自然界本身的辩证法，人对自然界认识的辩证法。近些年来，为了便于进行国际学术交流，有人建议用科学技术哲学代替自然辩证法这个名称。这样，化学辩证法也应相应改为化学哲学，或化学技术哲学。在本书作者看来，化学哲学不仅仅是化学辩证法名称的改变，而应把它视为以化学为研究对象的哲学，因此，应当有它特定的研究内容，也就是作为化学哲学这门学问的研究内容，并通过它的内容与其他科学区别开来。

以化学为研究对象，意味着化学哲学既与化学相联系，又不同于化学。化学作为自然科学的基础学科之一，有它的研究对象和内容，就是前面讲过的所谓化学问题；而化学哲学则进一步以化学为研究对象，研究化学中具有哲学意义的问题，也就是所谓的化学哲学问题。具有哲学意义的问题，具体表现很复杂，一般地说或概括地说，是具有世界观、认识论和方法论意义的问题，它们是以化学为基础提出来的，又不同于化学问题，超出于化学问题。

2. 化学哲学的主要内容

在说明化学哲学的主要内容以前，先简要地说一说哲学的主要内容。自古以来，哲学被分成三大部分：本体论、认识论和逻辑；本体论是关于存在及其规律的学说，认识论是关于认识及其规律的学说，逻辑是关于思维规律和形式的学说。在哲学史上，这三个部分长期相互分立，相互脱节，各自独立地发展着。例如，在康德的哲学中，存在规律和认识规律是相互脱节的，这种情况也影响了逻辑，使逻辑变成了脱离实在内容的思维形式的记述。黑

格尔曾试图探讨这三部分的联系和统一，但是，他是以唯心主义为基础的。在黑格尔看来，思维同时就是存在，思维规律也就是存在规律，他的逻辑学包罗了一切，全部哲学变成了逻辑学。黑格尔在唯心主义地解决思维和存在同一性基础上，把三个部分结合起来，并把本体论和认识论溶解在逻辑之中。

马克思主义哲学吸收了黑格尔哲学中的正确思想，在唯物主义基础上解决了这个问题。马克思主义哲学将唯物主义和辩证法结合起来，承认反映原则和发展原则，把实践引入认识论，使本体论、认识论和逻辑三者统一起来。在马克思主义哲学看来，正如前面关于哲学基本问题一节讲过的，思维和存在的关系既是本体论的基本问题，也是认识论的基本问题，这就是说，本体论对存在的研究，是从思维和存在的关系中进行的，认识论对认识的研究，也是从思维和存在的关系中进行的。换句话说，本体论和认识论都是以思维和存在的关系为基础的，本体论着重研究存在，认识论着重研究认识，因此，这两者是互相联系和相互渗透的。同时，思维规律是存在规律的反映，逻辑不是关于思维外在形式的学说，而是关于物质的、自然的和精神的事物发展规律的学说。因此，在马克思主义哲学中，不承认有纯粹的、与其他不相干的、本体论和认识论。马克思主义哲学认为，唯物辩证法的规律，既是存在的规律又是认识的规律，同时也是思维的规律。正是基于这些原理，马克思主义哲学不再将本体论、认识论和逻辑割裂开来，强调辩证法、认识论和逻辑的统一。这里所说的辩证法，既是客观辩证法，也是认识的辩证法，同时也是思维的辩证法。

当然，本体论、认识论和逻辑三者的联系和统一，决不意味着它们之间没有任何差别，更不意味着不能从不同侧面对问题加以研究。当我们说明化学哲学的内容时，也可以从不同侧面、不同角度做适当的区分，只要我们记住这种区分只具有相对的意义就行了。况且，要研究问题，也只能一个一个问题地进行，研究一个问题时，只能暂时将它从与其他问题的联系和统一中分化出来，否则将会无从入手。

那么，化学哲学的主要内容是什么呢？概括起来，可分成三个主要问题：本体论问题、认识论问题和逻辑问题。

本体论问题，以化学认识为中介，探讨化学中的物质、运动、时空等客观存在形式及其辩证法，也就是客观辩证法。如果说，在自然辩证法中有一个重要组成部分，即自然观部分，那么，化学哲学本体论，则是化学自然观，它的具体体现就是物质运动的化学图景，也就是以现代化学所取得的科学成果为基础描述的物质运动图景。本书第二、三、四章，属于这方面的内容，但是并未穷尽这方面的内容，仅仅是这方面内容中的一些问题、一些方面。

认识论问题，以化学认识的历史经验为基础，以哲学认识论为指导，探讨化学认识的特点和规律，化学认识与其他科学认识以及与哲学认识的联系和区别，研究认识的经验 and 规律是为了指导再认识，也就是为了未来的认识，在这个意义上，认识论也就具有方法论功能，或者说也可以转化为方法论。认识论和方法论是统一的，认识论反过来指向进一步认识，就转化成为方法论，而方法论脱离认识论，有可能成为具体的方法的堆积，而不成其为“论”。从这种观点出发，本书把化学认识论和方法论视为一个部分，第五、六两章作了一些尝试性说明。总起来说，化学哲学中的认识论问题，讲的是认识中的辩证法。

逻辑问题，即以本体论、认识论和逻辑学的辩证统一原理为指导，从化

学和逻辑学相结合的角度，探讨一些化学逻辑范畴。化学逻辑范畴这个术语，表明化学哲学中分析的范畴，既具有化学的特征又具有逻辑的特征，既是化学的又是逻辑学的。本书后四章，特别是第七至第九章，化学中的概念、规律和理论，都是“化学中的”；同时，概念、规律、理论与逻辑学中的概念、判断、推理大体上相对应，因此，又具有逻辑特征。当然，化学哲学中的逻辑问题，除了化学中的概念、规律和理论以外，还有许多问题需要研究。应当说，迄今为止，逻辑问题是化学哲学中研究的最不够的部分，尚有大量工作等待人们去做。本书提出了这个问题，但是没有解决这个问题。

3. 化学哲学与其他学科的关系

化学哲学是马克思主义哲学的分支学科——自然辩证法（或称科学技术哲学）中的一个组成部分或一门学科，与它相并列的有数学哲学、物理学哲学、生物学哲学、地学哲学、天文学哲学等。如果哲学作为一级学科，那么科学技术哲学为二级学科，化学哲学及与其并列的其他一些学科组成三级学科。除此之外，化学哲学还与化学、化学学、化学史、化学社会学等有一定联系。关于化学哲学与化学的关系，前面已经讲过，不必再重复。关于化学哲学与哲学及与物理学哲学等的关系，不准备一一叙述。下面，仅对化学哲学与化学学、化学史、化学社会学等学科的关系，作一简要的分析和说明。

化学哲学与化学学。化学学是科学学的一个分支学科，是关于化学的科学；化学哲学，如上所述，是哲学的一个分支学科，是研究化学中的哲学问题的一门学科。化学学和化学哲学都以化学为研究对象，这说明它们之间存在联系；但是，化学学和化学哲学着眼点不同，这又说明它们之间存在差别。化学学以化学为研究对象，着重从总体上研究化学的性质、社会功能、认识方法及化学发展规律等，是化学的自我反思；化学哲学也以化学为研究对象，但是化学哲学着重从哲学上研究化学中带有根本理论性质的问题，也就是本体论、认识论（包括方法论）和逻辑问题。这叫做研究对象相同，着眼点不同。诚然，化学学从总体上对化学进行研究，也必然涉及一些根本理论问题，如结构论、过程论、时空论等，这些与化学哲学内容有一定联系和交叉，但是，总的来看，它们各有特点，化学哲学明确提出思维和存在等各种关系，并对化学的概念和理论作进一步哲学解释，化学学则主要从总体上对化学的内容进行描述、分析和阐述。

化学哲学与化学史。化学哲学是哲学的一个分支，化学史是科学史的一个分支，二者分属不同的领域。化学哲学要以化学史、化学思想史等提供的资料为基础，研究化学史应当以哲学观点为指针，脱离化学史（包括化学思想史）的化学哲学是空洞的化学哲学，脱离化学哲学的化学史是没有灵魂的化学史。因此，应当将这两者结合起来。但是，结合不等于取消和代替，不能因为利用化学史而取消化学哲学，代替化学哲学，也不能因以哲学为指导而不要化学史、用哲学代替化学史。从这个意义上说，以哲学为指导对化学史的研究，仍应属于史学范围，而不应列入化学哲学领域。化学哲学毕竟是哲学，不等于化学史。

化学哲学与化学社会学。化学社会学是科学社会学的一个分支，而科学社会学是把科学研究活动视为一种社会活动，是探讨科学的社会特性以及科学与社会关系的一门学科。从这个观点看，同样可以说，化学社会学是把化学研究活动视为一种社会活动，探讨化学科学的社会特性以及化学与社会的

相互关系的一门学科。正如科学社会学与科学哲学有着十分密切的关系一样，化学社会学与化学哲学也有着十分密切的关系。有密切关系不等于一回事，有密切关系，尽管是十分密切的关系本身，就意味着它们不是一件事，而是两件事，不是一门学问而是两门学问，并且是分属于两个不同研究领域的两门学问。因此，不能将化学社会学与化学哲学混为一谈。当然，这不是说化学哲学研究工作者不能从事化学社会学的研究，但是，化学哲学家研究化学社会学也不能由此将化学社会学归并到化学哲学领域。这就是说，从学科上看，化学哲学和化学社会学是关系十分密切的两门学科，从研究者来说，可以兼顾和跨越，化学哲学家可以研究化学社会学，化学社会学家也可以从事化学哲学研究。这正像物理学家可以研究化学或化学中的某些问题，化学家也可以研究物理学或物理学中的某些问题，但是不能由此将二者中的一个归并到另一个一样。

4. 化学哲学的意义

任何一门科学都有其自身的功能，对任何一门科学的研究归根到底是为了有效地发挥该门科学的功能或作用，这就是该门科学存在的意义，也是研究这门科学的意义。

研究化学哲学的意义是什么呢？研究化学哲学的意义是多方面的，概括地说，可分为两个方面：对化学的意义，对哲学的意义，或者说成是化学意义和哲学意义。

研究化学哲学具有重要的化学意义，也就是说化学哲学研究对化学的发展有一定作用。从哲学观点对化学中的概念、规律、理论进行深入分析和研究，有助于更深刻地理解和揭示其本质；从哲学观点对化学及其与其他科学的相互关系进行考察，有助于发现科学思维方式的特征及其变化和发展；从哲学观点对化学中提出的基本理论问题或者说哲学问题进行探讨，也有助于启迪思想、开阔思路。总之一句话，化学哲学研究，从化学方面看，有其自身的意义。诚然，化学哲学研究应当吸取历史的经验和教训，不能做“审判官”，不能阻碍人们的思考，而应当相反，应当有利于启迪人们的思考。哲学号称是智慧学，它的首要任务不是告诉人们具体结论是什么，而是启迪智慧，不是告诫人们这样做不那样做，而是善于提出有启发意义的问题，并在提出和阐述问题过程中展示出丰富的思想内容。化学哲学也应当成为启迪智慧的智慧学。

化学哲学的哲学意义，就是化学哲学研究对哲学的发展的意义。哲学是自然科学和社会科学的概括和总结，哲学的发展受自然科学的深刻影响。恩格斯有一句名言，“甚至随着自然科学领域中每一个划时代的发现，唯物主义也必然要改变自己的形式。化学是自然科学中的一门基础学科，化学的发展也对哲学产生深刻影响。化学对哲学的影响主要表现在两个方面：一是提供事实材料，二是提供科学思想。前者是经验资料，后者是思想资料。从化学的经验资料和思想资料到哲学概念和理论，需要有一个中介，这就是化学哲学。化学哲学对化学中的经验资料和思想资料进行专门的和深入的分析，提出哲学问题，可以作为哲学概括的基础。近些年来，我国一些学者研究了包括化学在内的自然科学中提供的新资料、新思想，提出了一些新范畴、新

规律，如系统和要素、有序和无序、连续和间断、简单性和复杂性、精确性和模糊性等范畴，作为自然辩证法范畴；又如，提出和探讨了自然辩证法规律：系统层次律，转化守恒律和循环发展律。在对范畴和规律的研究中，在论证中，引用了大量化学经验资料和思想资料，这些资料都是经过分析和概括而提出来的，对这些资料的分析 and 概括，是化学哲学研究的内容，也是化学哲学研究的结果。

详见沈小峰、王德胜：《自然辩证法范畴论》，北京师范大学出版社，1990年版，第308—328页。

第二章 化学中的实体、关系和过程

实体、关系和过程，是哲学范畴，也是化学哲学范畴。化学是研究物质的组成、结构及其变化的科学，化学所面对的世界，是实体、关系和过程的世界，化学研究就是对化学中的实体、关系和过程的探索 and 认识。因此，当我们阐述了化学哲学一般性的问题以后，在这一章，首先阐述化学哲学的实体、关系和过程三个范畴，以说明化学的客观辩证法以及对其认识的辩证法。

化学中的实体、关系和过程，是与化学基本问题紧密相联系的，可以说是从化学基本问题中概括和抽象出来的。我们在第一章中已经明确说明了哲学的基本问题也就是化学哲学的基本问题，现在又提出了化学的基本问题，正如化学问题不同于化学哲学问题一样，化学的基本问题也不同于化学哲学的基本问题。什么是化学的基本问题呢？让我们简略地考察一下化学发展的历史。

一、化学的基本问题

化学中的问题数不胜数，有些问题如过眼烟云，有些问题则具有永恒的魅力，它贯穿于化学的全部历史。这后一类问题，对于化学具有基本的性质，属于化学中的基本问题。

从化学历史来看，似乎问题不断变换。正如有人所描述的那样，从炼金术时代到开始形成一门独立的科学，“化学的目的似乎一个时期一个时期变化很大。一段时期化学可称为生命的理论，另一时期成为冶金学的一个分支；有时研究燃烧，有时成为医学的帮手；某一段时期企图只给一个单词 element（元素）下定义，另一段时期就探求所有现象的不变的基础。仿佛化学有时是手艺，有时是哲学，有时是秘术，有时是科学”。但是，如果我们透过表面现象深入到化学发展的本质，将会发现贯穿于全部化学发展史的一条基本线索。

早在人类文明曙光初升的时代，人类在生产和生活实践中就观察到自然界的许多现象，按其本质来说是化学变化所产生的现象，如动植物死亡后的腐烂，树木的燃烧，泥土经过烧制变成坚硬的陶器，等等。随着实践和认识的发展，人们头脑中产生了一个问题：万物由什么构成？

在古代，化学尚未形成独立的科学，关于万物由什么构成的问题，是自然哲学研究的一个基本问题。古代自然哲学家对此提出了种种猜测性解释，大体上可分为两种解释：一种是元素论，把万物看成是由一种或多种元素构成的，如把水、土、火等视为构成万物的始基，亚里士多德还认为元素是由冷、热、干、湿四种原始性质构成的；另一种是原子论，把构成万物的本原归结为具有一定性质的原子。与此同时，古代哲人还注意到另外一个问题，无论是元素还是原子，它们构成宇宙万物，说明它们之间发生了结合，万物又归结为元素或原子，说明又发生了分解或分离，元素或原子相互结合又相互分离，发生了变化，产生了各种现象。结合和分离又是由什么力量或什么原因引起的呢？

有些古代哲人（如恩培多克勒）借喻人的情感爱和恨解释元素或原子的结合和分离。在这种观念中包含着一种思想，似乎爱使元素或原子相互吸引、结合，恨则相反，它使元素或原子分离。这种观念延续下来，到公元 13 世纪，德国炼金家马格奴斯（Albertus Magnus）提出了一个术语“affinity”，其本意是姻亲关系，用以解释物体的构成及物体的变化。

炼金术是化学的原始形式。中国的炼丹术、埃及的炼金术以及后来的阿拉伯的炼金术，在观念上是相通的或一致的，都认为物质可变。阿拉伯炼金术重要代表人物之一的扎比尔·伊本·海扬（Jabir ibn Hayyan），拉丁文称贾伯（Geger），留有一本文集《扎比尔文集》，其思想受亚里士多德四原性说影响，认为四原性两两结合形成金属，使金属具有相应的性质，成为金属的“外”质，金属还具有“内”质，即其自身的性质。与亚里士多德不同的是，扎比尔认为，冷、热、干、湿不是抽象的质，而是实在的性质，可以从物体中分离出来，获得纯的冷素、热素、干素、湿素，它们又可以按一定比例结合形成各种各样的物体。从这种观点看来，炼金术的任务就是要确定

J·R·柏廷顿：《化学简史》，胡作玄译，商务印书馆，1979年版，第69~70页。

莱斯特：《化学的历史背景》，吴忠译，商务印书馆，1982年版，第69~77页。

这些“素”在物体中的比例，并按一定比例混合生成人们希望得到的东西。

为了获得纯的冷素、热素等，就要进行实际操作，当时主要是蒸馏，蒸馏（动物质）的产物几乎总有气体、易燃物、液体、残渣，这恰好与四元素（气、火、水、土）相对应，从而与四元素观念相吻合。结果，在观念上有四原性，在实践上有四元素，形成了原性和元素的矛盾。后来，将原性具体化为元素，初步解决了这种矛盾，如三元素说中的硫、汞、盐，既是性质又是具体的元素，是原性和元素的统一。

从古代自然哲学到化学的原始形式的炼金术，提出和思考的一个核心问题，正是万物由什么构成和如何构成；与此相联系，自然涉及变化，元素构成万物，万物又分解为元素，这就是变化。

从物质及其变化的观点看，炼金术仅仅涉及了外部表现，着重说明了或反映了一些最简单、最常见的物质及其性质，如可燃物的可燃性，一些物质的可挥发性，金属的颜色和光泽等。从 17 世纪中叶开始，化学开始作为一门科学从其他研究领域独立出来，化学的研究方法发生了重大变化。虽然在炼金术及其以后一个时期，已经产生了萌芽状态的化学实验，但是炼金术操作在本质上不同于近代的科学实验活动。波义耳被誉为近代化学的奠基人，其重要原因之一就在于他把严格的实验方法引入了化学，他以实验方法为基础证明古代四元素说和炼金术的三元素说所说的元素并不是真正的元素，元素是对物质进行化学分解的最后界限，物质分解为元素，物质又由元素组成。物质的性质决定于物质的组成，可以通过物质的组成得到说明；物质分解为元素，元素结合成物质，分解和结合的过程就是物质组成和性质变化的过程，用现代术语来表述，就是化学反应过程。

在近代化学形成过程中，分解和结合的原因问题也没有失去意义，相反，随着近代化学的产生，对于这种原因的解释脱去了借喻人的情感的拟人观色彩，开始了科学的研究。在近代化学中，亲和力概念与原子论或微粒说结合在一起，或者赋予它以纯粹力学的性质，或者将它和化学变化的资料联系起来，具有了化学亲和力的特性。波义耳就曾指出：“相异二元素之微粒相互吸引，则生成第三种物质，即成为化合物。倘若此化合物中二元素成分之相互亲和力小于其中一成分与第四种物质之亲和力，则此化合物即分解，而另生成第五种物质。”波义耳以元素之微粒相互结合的能力说明了物质（即化合物）的化学变化，这个思想在 18 世纪为许多化学家所继承，并在具体研究中获得了发展。如法国化学家杰奥弗瓦（Ezienne Franc Ois Geoffoxy）对物质间亲和力进行了比较研究，于 1718 年提出了第一个亲和力表。继他之后，施塔尔（G·E·Stahl）、贝格曼（T·Bergman）对物质的反应能力和化学反应进行了研究。法国化学家贝托雷（C·L·Berthollet）于 1803 年发表了《化学静力学概论》，提出了有关化学反应的一些重要原理，如化学平衡、反应物质量的作用、化学反应与外部条件的关系等。

从杰奥弗瓦到贝托雷，将近一个世纪。在继续研究化合物的组成的同时，化学家们结合组成的研究，对化学反应进行了探索，贝托雷的工作已经涉及化学反应的方向、化学反应平衡等规律性问题，实质上已接近后来才确立的质量作用定律。但是，这个时期，即 18 世纪，对化学反应的研究没有取得规律性认识。进入 19 世纪，特别是 19 世纪上半叶，化学研究的重点转移到另

一个方向上去了，即转移到物质的组成和结构方面去了。

原因是什么呢？从化学上看，关于化学反应的经验资料积累的还不够，还不足以认识化学反应的规律性；化学家们受亲和力思想的影响，把注意力集中在亲和力大小的量度上，因而对化学反应本身反而不那么精心；18世纪下半期，相继发现了许多元素，特别是气体元素氧，建立了燃烧的氧学说，使化学走上了正确道路，化学研究从定性发展到定量，相继确立了物质组成和化学反应中的一些基本定律，如质量守恒定律、当量定律、定组成定律等，这些迫切需要从理论上进行概括和说明。总之，从化学本身的发展看，对化学反应的认识难于深入，而对物质的组成的认识积累了足够的经验资料，要求深入进行研究，这就使化学研究的重点自然而然地转向了组成这个方向，并从组成的研究合乎逻辑地发展到结构的研究。

从认识论上说，物质和运动是不可分割的，具体的物质形式和具体的运动形式是密切联系的，尽管这种联系具有非常复杂的性质。人们认识物质的性质要通过它的运动形式，认识运动形式也要认识它的物质基础。就认识的一般次序而言，恩格斯曾经指出：“必须先研究事物，而后才能研究过程。必须先知道一个事物是什么，而后才能觉察这个事物所发生的变化。”这段化学发展的历史正是这样。从17世纪开始，近代化学正在形成过程中，化学家们认识了一些物质的化学性质，研究了物质的组成，并依据组成解释性质。在此过程中，化学走上了研究化学反应的道路。但是，由于化学反应的物质基础尚缺乏具体的了解，对于什么东西在化学反应中发生了变化，什么东西在化学反应中没有变化没有搞清楚，因而对化学反应的研究就难以深入下去。进入19世纪，特别是19世纪上半期，化学研究的重点从化学反应转向了物质的组成和结构。

19世纪初，随着道尔顿化学原子论的建立，化学中提出了新的问题：道尔顿的化学原子论认为“复杂原子”是由简单原子组成的，那么“复杂原子”是如何由简单原子构成的呢？这个问题首先涉及原子和化合物之间的关系，其次涉及化合物中原子之间的关系。

这两个问题是相互联系的。分别地讲，关于第一个问题，众所周知，从19世纪初建立化学原子论开始，历经半个世纪，阿伏加德罗提出的分子假说才获得广泛承认，从而将原子和分子区别开来。分子是保持物质化学性质的最小微粒，分子的变化意味着物质的化学性质的变化；原子是组成分子的基本微粒，也是物质进行化学反应的基本微粒。

关于第二个问题，即分子中原子之间的关系问题，实质上是原子如何构成分子的问题，对这个问题的研究，导致了化学结构理论的建立。

这两个问题综合起来，就是关于物质分子由什么构成和如何构成的问题，物质分子的构成与物质的化学性质的关系问题。19世纪前半期，化学在继续研究物质的性质及其化学变化的同时，并结合这种研究，着重研究了物质的组成和结构，在这方面取得了引人注目的成果。

在认识了化学变化中的物质基础以后，为进一步研究化学反应提供了条件。19世纪下半期，化学在继续深入研究物质的组成和结构，尤其是物质的结构的同时，对化学反应的研究也取得了长足进步，相继建立了化学热力学和化学动力学理论，对化学反应的规律性有了初步的认识。

进入 20 世纪后，在科学认识深入到原子内部以后，化学又面临新的问题：物质的化学结构和化学反应的本质是什么？基于电子的发现和量子力学理论的建立，化学研究以化学键概念和理论为中心，进一步揭示了化学结构的实质，在此基础上深入认识了化学反应的规律性，认识了化学结构和化学反应的联系。

我们从上面粗线条式地描述的化学发展的基本线索中可以看出，在古代，包括炼金术及其以后一个时期，提出了元素与形形色色的物体的关系问题，也就是万物呈现出的多样性及其性质是如何产生的问题。古代哲人用实体和偶性（如两种性质的结合，爱和恨的作用）去解释。到了近代，从波义耳开始到道尔顿以前，人们首先从物质的性质入手，进而试图通过组成去解释性质；道尔顿建立化学原子论以后，从认识物质的组成发展到认识物质的结构，并以结构解释物质的性质，通过物质的性质和化学反应认识物质的结构；20 世纪，认识深入到微观领域，化学从研究原子如何构成分子和分子的化学反应，进一步发展到研究物质的微观结构，即从原子的电子结构研究原子如何结合成分子，对化学反应的研究也从宏观的化学变化深入到化学反应机理。这样，如果略去古代化学不谈，从近代化学形成时期算起，化学的发展大体上可以划分成三个时期：近代化学形成时期，也就是相当于从波义耳到拉瓦锡这段时期，化学家们着重研究的是物质的性质和组成，研究物质的组成，也就是探讨物质是由什么成分组成的，组成物质的基本要素是什么，研究组成可以解释物质的性质；近代化学发展时期，相当于拉瓦锡以后直到 19 世纪末这段时期，化学家们从研究物质的组成过渡到研究物质的结构，研究结构和性能的关系，进而研究化学反应的规律性；现代化学发展时期，从 19 世纪末 20 世纪初算起直到现在，化学家们对物质的结构和化学反应的研究，都已深入到原子的内部结构，以原子内部电子运动规律为基础，研究分子的结构和化学反应机理。在化学发展的全部历史中，尽管涉及的问题多种多样，但是，从总体上看，基本的问题是组成、结构和化学反应。近代化学形成时期，重点是组成和化学反应；近代化学发展时期，重点是结构和化学反应，而结构离不开组成，结构是组成的发展；现代化学发展时期，以原子内部结构为基础，进一步认识物质的结构和化学反应。这样，与化学发展的三个时期相对应，可以提出三个基本概念或者称为范畴：组成、结构、反应。认识组成，要求对物质进行分解，分解的界限是构成物质的基本要素，即元素，在哲学上相应于实体范畴；结构是一种关系，即构成物质的各组分之间的关系，结构概念与哲学上的关系范畴相对应；化学反应表现为过程，过程已经不是一个化学概念，而成为哲学范畴了，化学反应与过程相联系，反应概念与过程范畴相对应。这样，我们在化学中的基本概念——组成、结构、反应——基础上，可以提出三个相对应的化学哲学范畴，或者换个说法，与化学中的三个基本概念相对应的，有三个化学哲学范畴：实体、关系和过程。

下面，我们分别讨论这三个范畴。

二、化学中的实体

1. 组成和实体

组成与元素密切相关，或者说，组成概念首先与元素概念直接联系着。古代自然哲学认为元素是组成宇宙万物的基础，是基本要素，是不能再分割为其他物体的最基本的东西。这个思想为近代化学家继承下来。

波义耳在 1661 年出版的《怀疑派化学家》一书中指出：“为了避免发生误解，我必须向大家声明，我所指的元素，就是那些化学家讲得非常清楚的要素，也就是某种不由任何其他物体构成的或是互相构成的和简单的物质，或是完全没有混杂的物质，它们是一些基本成分，一切被称为真正的混合物都是由这些成分直接混合而成，并且最后仍可分解为这些成分。”他所说的“真正的混合物”有人译成“完全混合物”，意思都是指后来所说的化合物。这段话清楚地表明，在波义耳看来，元素是构成化合物的基本成分或不变的基础。

在哲学史上，构成万物的不变基础被称为实体。实体是亚里士多德（Aristoteles）首创的一个哲学概念，在他看来，实体是变中不变的东西，是生成变化的基础。在以后的哲学家中，对实体提出了各种各样的解释，有唯心主义的解释也有唯物主义的解释。在马克思主义以前的哲学中，实体被理解为不变的基础。如果将实体概念与宇宙万物是由什么组成或构成的问题联系起来，实体就是构成万物的基础或始基。与哲学上提出的“万物是由什么组成”的问题相比较，化学中提出的“化合物是由什么组成”的问题，显得范围要窄得多，视野要狭得多。化学家关心的不是宇宙万物由什么构成，而是他们所研究的物质由什么构成。我们刚刚引述的波义耳的话说明，近代化学肇始就已经明确提出了各种化合物是由什么组成的问题，或者说组成这些化合物的基础是什么？如果说回答宇宙万物是由什么组成或构成的问题，产生了实体概念，那么，回答化合物是由什么组成或构成的问题，在化学中产生了元素概念。元素作为组成化合物的基本要素，也是实体，是化学实体。

古代自然哲学将日常生活中可感觉到的东西看作构成万物的本原，如水、火、土、气等，由此形成的实体称为感性实体。炼金术和医疗化学时期，把汞、硫、盐当作元素，也具有感性实体的特征。从波义耳开始，否定了这类感性实体概念，承袭古代物体分解的限度的思想，把元素视为物质分解的限度，是组成物质的基本成分。这个基本思想为后来的化学家接受下来，并继续发展下去。

2. 绝对实体和相对实体

在波义耳之后，许多化学家提出了类似的见解。例如，俄国化学家罗蒙诺索夫曾指出：“应当存在这样一种组成部分，它不能被任何化学操作或推理分为各个不同种类的物体；因此，我们把这类组成部分称作最后的组成部分或终极组成部分，或用化学家的语言称它为元素。”拉瓦锡又进一步提出：“如果我们把分析所达到的最终界限的观念与元素或物体基元的名称联系起

来，那么，对于我们来说，所有还不能用任何方法分解的物质都是元素；然而，我们并不能因此而肯定，这些被我们作为简单的东西不是由两个或者甚至更多数目的基元所组成，而只是因为无论怎样也不能把这些基元相互分开，或者说得更准确些，由于我们还没有任何方法使它们分解，我们才认为这些物体是简单的，并且在实验和观察向我们证明以前，我们不应当认为它们是复杂的。”*

波义耳将不可分解性的和简单性的东西称作元素，罗蒙诺索夫将最后组成部分或终极组成部分称为元素，这种实体观具有绝对性，也就是把元素视为绝对不可分的，可以把这种实体称之为绝对实体。拉瓦锡没有肯定现在不能分解的就是绝对不可分解的，包含了相对性的含义，具有相对实体概念的萌芽。但是，相对实体概念在这个时代还没有也不可能真正确立起来。

拉瓦锡不仅从理论上阐述了什么是元素，而且指出了哪些是元素，在他的元素表中列出了 33 种元素，他把 33 种元素分成四类：第一类包括光、热、氧、氮、氢；第二类有硫、磷、碳、盐酸基、氢氟酸基、硼酸基；第三类是一些金属元素；第四类则是钙、镁等氧化物。尽管这个表中所列元素不都是真正的元素，但是如果我们将拉瓦锡的元素定义和元素表结合起来思考，那么就会发现，在拉瓦锡那里，元素已表现出两种形象，或者说，显示出两种含义：第一，元素是组成各种化合物的基本要素、基本成分；第二，元素具有了独立存在的形式，如氧、氮、硫、磷，等等，都是实实在在的物质形式。这种情况表明，化学中的实体，不仅仅是抽象的不能分解的基本成分，而且是独立存在的物质形式，是实在的物体，在这个意义上，实体乃是实在的物体。在前一种意义上，元素作为实体以潜在的形式存在于化合物之中，或者说进入化合物成为它的基本要素，在后一种意义上，元素表现为实在的物体，表现为独立的物质形式。这是化学实体概念的一个进步，同时孕育了新的矛盾：难道元素是像独立的形式那样存在于化合物之中吗？拉瓦锡或许已经意识到了这一点，就在我们所引述的那一段话的开头，他指出，如果用元素名称来表示构成物体的简单的、不可分的分子（应当说是微粒），那么，“我们也许会不认识它们”。要解决这个矛盾还要等待历史很久。

从波义耳到拉瓦锡，都把元素与分解物质的技术和方法联系在一起。随着分解物质的技术和方法的进步，原来认为不能分解的逐步变成可以分解的，原来被认为是元素、是实体，逐渐地变成复杂的东西，因此应当从元素表中把它们排除，如此下去，终会有那么一天，原来认为是元素实体的东西不复存在，元素的数目等于零。这说明，仅仅将分析的限度作为元素实体的特征，并没有指出它的真正物质内容。那么，元素实体的真正物质内容是什么呢？是原子。

原子概念和元素概念一样，早在古代就已经产生，17、18 世纪在机械观统治下获得了发展，到 19 世纪初，道尔顿将原子概念和化学经验事实相结合，建立了化学原子论。他把化学元素和“基本粒子”看成是同一的东西，“基本粒子”就是原子。原子是组成物质的“基本粒子”，是不可破质点，是最后质点。道尔顿提出的化学原子论为化学乃至全部科学提供了重要的理论基础，并为化学乃至全部科学的进一步发展开辟了道路。特别应当指出的

引自凯德洛夫：《化学元素概念的演变》，陈益升等译校，科学出版社，1985 年版，第 4~5 页。

参见凌永乐：《世界化学史简编》，辽宁教育出版社，1989 年版，第 109~110 页。

是，道尔顿的化学原子论，对于作为组成物质基本成分的元素实体的具体内容是什么的问题作出了明确的回答，这个基本成分不是别的什么不可琢磨的东西，而是原子。具体地说，物质分解的限度，物质的基本要素，在原子论中具有了具体的物质形式——原子。在这个意义上说，原子也是实体，而且是最后的、不可再分的，因而是绝对的化学实体。

在 17、18 世纪，化学中的实体是元素实体，19 世纪，随着化学原子论的建立，化学中的实体形式是原子，可以叫做原子实体。这两种实体概念的基本内容是一致的，都是化合物的基本成分，不变的基本要素。同时，它们之间也有区别。17、18 世纪的元素实体，具有抽象性和否定性。所谓抽象性，就是元素实体的唯一特性是不能分解、未能分解，除此之外说不出什么具体内容；所谓否定性，说的是对元素实体的陈述，不能分解、未能分解，表现为没有被认识或尚未被认识的，而不是已经认识了的内容。因此，随着实践和认识的发展，未被认识的转化为已被认识的，元素实体也就转化为非元素实体了。与此相反，以原子为基础的实体概念具有了具体性和肯定性。除了不能分解以外，原子还有许多性质，如形状、大小、质量等，原子概念反映了具体的物质形式，并以肯定的陈述说明了它的性质。

无论是元素还是原子，作为化学中的实体，都具有绝对不可分性和绝对不变性，因此是绝对化学实体。绝对化学实体是特定时代的产物。正如恩格斯所指出的，那个时代的基本特征是绝对不变观点的形成。在化学中，元素和原子都被认为是绝对简单的，因而也就是绝对不变的。如果说有变化，也只是从一种化合物转移到另一种化合物，它们本身是不变的。这是形而上学实体观的一个显著特征。按照这种观点，物质可以分解，最终达到分解的限度，即达到绝对基本的物质单元；它们是不可破的，是没有内部组成的微粒，是不连续的、相互分立和间断的，是与物质的连续性形式绝对对立的。恩格斯指出：“原子决不能被看作简单的东西或一般来说已知的最小的实物粒子”，而且他还指出，不能认为物质只是分立的，应当看到各个阶段的各个分立部分，如以太原子、化学原子、物体、天体等，是各种不同的关节点，这些关节点制约着一般物质的各种不同质的存在的形式。这些话是在 19 世纪中叶说的，当时一方面还不知道原子内部的结构，恩格斯借用以太原子来表示，另一方面在化学和物理学中占统治地位的观念是原子不可破、不可入，没有内部组成，恩格斯却预言式地提出了相对实体观。19 世纪末，物理学中相继发现了 X 射线、天然放射性和电子，敲开了原子的大门。进入 20 世纪，经过许多科学家的研究揭示了原子的内部结构，进而又揭示了原子核内部的奥秘，进一步研究还表明，基本粒子并不基本，它们也有自己的组成和结构。这是一方面。另一方面，就某个物质结构层次来说，都有其自身的基本组成，有基元性。由此形成了相对实体概念。

从绝对实体到相对实体，是实体观上的重大转折，是从形而上学的实体观到辩证的实体观的转折。绝对实体观追求物质大厦的最后的、不变的基础，相对实体观则把物质大厦的每一层都看成是实体，它既有基元性、不变性，又具有组成性和可变性，物质大厦就是由各个相对实体建立起来的。从相对实体的观点来看，物质大厦的每一层都可以在一定范围内被看成是实体，即

被看成是简单的、起始的物质实体。例如，在力学中，可以把物体看成简单的、起始的东西；在分子运动论中，可以把分子视为简单的、起始的微粒；在化学中，组成分子和原子的粒子可以认为是简单的、起始的粒子，如此等等。

列宁曾经指出：“物的‘实质’或‘实体’也是相对的，它们只表明人对客体认识的深化。既然这种深化昨天还没有超过原子，今天还没有超过电子和以太，所以辩证唯物主义坚决认为，日益发展的人类科学在认识自然界的这一切里程碑都具有暂时的、相对的、近似的性质。电子和原子一样，也是不可穷尽的；自然界是无限的，而且它无限地存在着。正是绝对地无条件地承认自然界存在于人的意识和感觉之外这一点，才把辩证唯物主义同相对主义的不可知论和唯心主义区别开来。”从列宁这段话中可以看出，物的“实质”和“实体”是等价的，在唯物主义哲学看来，物的“实质”或“实体”就是物质本身，对于物的实体不能在固定不变的意义上来理解，这样的实体是不存在的，所谓不变的和不可分的实体，仅仅是人们认识的暂时界限。

相对实体是基元性和构成性的统一。基元性指的是基本性、基础性。追求物质组成的基础或者说探寻物质的基本组成，是化学研究的一种传统、一种思想倾向，这一点上面已经讨论过了。构成性指的是物质组成成分之间的相互作用、相互结合，是复杂的整体。力求认识物质的构成性也是化学研究的特点。现代化学对物质的研究是以相对实体作为基础和前提的。

3. 相对化学实体的形式

现代化学研究的物质形式多种多样，每一种形式向上看具有基础性，向下看具有复杂性、构成性，因此每一种形式都是基元性和构成性的统一，都是相对实体的一种形式。

从现代化学的实际出发，基本粒子或基础性粒子是最基本的结构单元，尽管它们本身也具有复杂性，但对化学而言，它们是构成化学研究的物质形式的砖石。基本粒子是粒子物理学的研究对象，它们已超出了化学研究的视野，只能作为化学研究的物质形式的基础。如同在数学中公理是从外部添加进去的、在数学体系本身中是无法证明的东西一样，在化学研究的物质层次系统中，基本粒子也是从外部（即从粒子物理学）添加进去的，在化学中它仅仅表现为构成物质的砖石。基本粒子中的质子和中子构成原子核，成为核化学的研究对象。核化学在研究核结构、核转变、核性质的时候，把它视为复杂的构成物，而核的组成单位即中子和质子，基本上被看成是基元性物质粒子。原子核和电子构成的复杂性整体，即核电子体系，对化学具有极端的重要性。核电子体系是化学键的物质载体，同时又是相对化学实体的一种形式。从核电子体系中衍生出多种物质形式（或者说是粒子形式）：原子，它不荷电，但有些原子具有不成对电子，这时，它是原子又是自由基，例如激发态具有不成对电子的自由基，在反应历程中起着基本单位或基础粒子的作用，而它本身又具有复杂性和构成性；离子，原子失去或得到电子而荷电荷，形成正离子或负离子，这是由原子形成的离子，叫做原子离子；原子离子自由基，由原子形成的离子带电荷，如果同时有不成对电子，则它们既是原子离子又是自由基，一身二任，如 Cu^{2+} 、 V^{2+} 等；原子实或原子蕊，是由核与内

层电子形成的实体。所有这些可以总称为原子粒子，它们一方面可以形成各种缔合体，可有多种形式，如原子缔合体($A \cdots A$)、原子自由基缔合体($A \cdots A \cdot$)、离子自由基缔合体($A^\pm \cdots A \cdot$)和原子离子自由基缔合体($A \cdots A^\pm \cdots A \cdot$)；另一方面原子粒子之间发生化学相互作用，形成分子。

依据现代化学理论，分子是由原子核和核外电子(简称核电子)构成的、保持物质化学性质的最小微粒。稀有气体原子是核电子体系，又是保持稀有气体化学性质的最小微粒，它们形式上是原子，实质上是分子，是单原子分子，可以看作是从原子过渡到分子的中介。

分子具有质的多样性，可以从不同角度来描述，依据不同原则来分类。例如，可以举出下述种种形式：

普通分子和奇异分子。普通分子是由核电子构成的体系，稀有气体分子是单原子分子，除此之外，其他物质的分子都是由两个或两个以上的核与电子构成的体系。如果在核外的不是电子而是其他粒子，如 μ 介子，即由核- μ 介子构成的体系，称为奇异分子。

中性分子和荷电分子。正负电荷数相等的核电子体系构成的能保持物质化学性质的最小微粒是中性分子，正负电荷不相等则形成分子离子，也可称为荷电分子粒子。

稳定分子和不稳定分子。组成和结构不容易随时间而发生变化的分子是稳定分子。19世纪80年代以前，受认识水平的限制，人们认为分子是稳定的，或者说人们只认识了一些稳定分子。19世纪80年代末，由于化学动力学研究的发展，阿伦尼乌斯(Arrhenius)提出了“活化分子”概念；20世纪建立了过渡态理论，提出了过渡态和活化体概念；化学动力学研究还发现，在光、电、磁等作用下，一些分子中的电子受激发形成激发态分子；还有，化学反应中的分子自由基等等，都是不稳定分子。稳定分子和不稳定分子之间的区别是相对的，稳定是相对于不稳定而说的，不稳定是相对于稳定而说的，在这里没有绝对的界限；稳定和不稳定是有条件的，例如，有些分子自由基是不活泼的，是稳定的，如三苯甲基可在温和条件下独立存在相当长时间，有些自由基是活泼的不稳定的，如甲基只能生存0.001秒。而且，随着射电天文学和分子光谱学的发展，相继发现了许多星际分子，其中大多数是分子自由基，从地球的条件看，一些星际分子都是极不稳定的自由基，但是在星际空间的条件下，它们之间不容易发生碰撞，从而具有相当的稳定性。

双中心键分子和多中心键分子。双中心键分子是价电子为两个原子共享而形成的分子，如氢分子、氯分子等；多中心键分子是价电子为多个中心原子所共有形成的分子， SO_2 为三中心键分子，环戊二烯、环己稀为四中心键分子，苯及其衍生物含有六中心键。多中心键又叫大键、共轭键或离域键。

无机物分子和有机物分子。无机物分子包括碳氢化合物以外的所有元素的单质和它们的化合物分子；有机物分子是碳氢化合物及其衍生物分子。除氢、氧、氮、硫和卤素以外的元素与碳直接结合成键的有机化合物分子称为元素有机化合物分子。

非生物高分子和生物高分子。高分子是由大量(几万以上)原子通过共价键、离子键或金属键结合起来的大分子，其分子量很大，高达几千、几万、几十万甚至几百万，但它们的基本组成却比较简单，常常是由相同或相似的结构单元重复构成的。基本结构单元对高分子而言具有基元性，而它本身又是由原子构成的，又具有构成性。生物高分子是和生命现象有关或具有生物

功能的高分子，也是由大量原子结合起来形成的大分子。但是与非生物高分子不同，生物高分子大多是由不同的结构单元构成的，并且具有多级结构。尽管如此，它也具有基本的结构单元。

原子粒子或分子粒子形成的复杂体系，通常称为化学实物，如单质、化合物、高聚物等概念，表示的不是分子而是分子或原子形成的体系。化合物可分为整比化合物和非整比化合物。化学史上曾发生过一场关于定组成和不定组成的争论。法国化学家普罗斯特(Proust)于1799年指出，两种或两种以上的元素化合而成的化合物，是一种自然特许的产物，自然规定它们具有固定的组成。1801年，普罗斯特的同胞、法国化学家贝托雷却提出了相反的意见，他认为化合物的组成是可变的、不固定的。从此发生了争论。这场争论以普罗斯特的观点获得大多数化学家的承认而告结束。

道尔顿从原子论出发指出，化合物中各种原子的数目成简单整数比，为普罗斯特定组成观点提供了理论支持。这就形成了关于化合物定组成和整比性的观念。依据这种观念，原子以简单整数比构成化合物，化合物具有固定的原子组成和固定的性质。反过来说，只有具有简单整数比且组成固定的物质才能称为化合物。这就是说，定组成和整比性成了判定物质是否是化合物的依据。

普罗斯特和道尔顿的观点虽然得到了大多数化学家的承认，但是贝托雷的观点并没有完全消失，他提出不定组成观点所依据的实验事实仍然存在。20世纪初，俄国科学家库尔纳柯夫对二元及多元合金体系的性质——组成进行了深入研究。他指出，有些化合物服从化学计量定律，属于现代化学所说的整比化合物，有些则不服从化学计量定律，在现代化学中称为非整比化合物。库尔纳柯夫将非整比化合物叫做贝托雷型化合物，与此相对应，整比化合物又叫做道尔顿型化合物。

道尔顿型化合物和贝托雷型化合物，也就是整比化合物和非整比化合物，各自具有多种存在形式。前苏联学者B·库兹涅佐夫对此做了具体分析。他指出，道尔顿型(或称道尔顿体)化合物大致可分成几类：第一类，同类分子形成的气体，如氧气、氢气、氮气、二氧化碳气等，它们的最基本的单位是分子(单质分子或化合物分子)；第二类，如分子晶体、分子液体(许多有机化合物的溶液)，也是同类分子的总和，其基本组成单位是分子；第三类，由不同种分子组成的相，如磷蒸气中含有 P^2 、 P^3 、 P^4 …… P^8 ，这些分子的总和形成相；除了上述情形外，还有离子态、自由基、聚集体等形成的体系，在这类体系中，基本组成单位是离子、自由基、二聚体、三聚体等。

由于化合物中某种原子过多或过少，在层状结构的夹层之间可能嵌入某些金属原子或中性分子，形成组成不固定的非整比化合物。如过渡元素形成的氢化物、氧化物、硫化物、碳化物、硼化物的晶体。嵌入型化合物，如羧形化合物、夹层化合物、分子筛化合物等，大体上可以看作是由两种结构单位组成的，一种是基质化合物，另一种是外来成分，后者被囚禁或嵌入前者形成的骨架之中，其含量可以改变。有的学者指出，如果再扩大一些，差不多所有结晶的以及各种各样的缔合物、分子化合物、表面化合物等，都可以视为非整比化合物。

无论是整比化合物还是非整比化合物，就其组成而论，说到底都是以核

· 库兹涅佐夫：《化学发展的辩证法》(俄文)，科学出版社，1977年版，第72~78页。

电子体系作为基本结构单位，因此，它们之间的区分也只具有相对的性质，在它们之间没有绝对分明的、不可超越的界限。

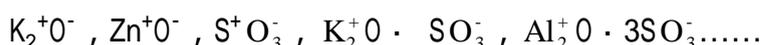
综上所述，化学研究涉及四个物质层次：组成原子的粒子，原子粒子，分子粒子和化学实物，最后一个层次，即化学实物可以分为气态、液体、固态。气态实物，或气体，是同类分子或非同类分子组成的体系。液体，主要是溶液和胶体，溶液是由两种或两种以上的物质组成的均匀体系。胶体是由具有某种尺寸的质点形成的分散体系。固体分为无定型体和晶体，晶体是原子粒子（原子、原子离子）或分子粒子以三维周期性规则排列而形成的体系，它的基本结构单元的晶胞。

化学在研究上述种种形式的物质时，总是力图了解它们各自的基本结构单位，如果从宏观到微观，实物的组成结构单位依实物的不同形式而不同，例如，晶体的基本结构单位是晶胞，高聚物的基本结构单位是链节（单体），有机化合物的基本结构单位是有机物分子，或者是原子团，气体的基本结构单位是分子，胶体的基本结构单位是胶粒；到下一个层次，分子的基本结构单位是原子粒子或者说核电子体系，原子的基本结构单位是原子核和电子，有时把核与一定的电子层看成是一个整体，称为原子实，如此等等不一而足。化学（指现代化学）在追求各种物质形式的基元性的同时，也承认这种基元性不是绝对的，而是在一定条件下的基元性，基本结构单位本身又具有构成性。总之，实体（即相对实体）是基元性和构成性相统一所形成的实在物体或有形物体。相对实体概念已经成为现代化学物质理论的基本概念，相对实体的观点已经成为现代化学家的日常意识、潜在的观点，是思考物质的有关问题时的思维背景和基础。

三、化学中的关系

1. 结构和关系

如前所述，化学最初的研究重点是组成，而组成包含着关系，即组成之间的相互关系。组成之间的关系可分为位置关系和结合关系。位置本身就是一种关系，是空间关系，某种成分在物质中的位置只有通过与其他成分的关系才能确定。例如，道尔顿认为二氧化碳的“复杂原子”（实质上是分子，道尔顿没有分子概念）是由两个氧原子和一个碳原子（他认为氧和碳都是简单原子）组成的，但是相同原子不能相互结合，因此二氧化碳中的碳原子和氧原子只能间隔排列，这种关系基本上表示了一种位置关系，一种排列次序。结合关系是将组成结合在一起的一种作用。贝采里乌斯（J·J·Berzelius）曾依据电化学观点说明这种作用。如果说位置关系（排列次序）是一种外部关系，那么结合关系则是一种内部关系，因为结合关系说到底就是促使各成分结合起来的原因和本质。诚然，位置关系和结合关系是相互联系的，当贝采里乌斯以电性相异解释化合物中各成分相互结合时，他提出了一系列二元式：



这些二元式一方面表示出组成之间的结合关系，即电性相异的两部分彼此结合的作用，另一方面也显示了原子的相互排列。

在化学史上，位置关系在类型论和同分异构概念中得到了发展和具体化。有机化学发展初期形成的第一个理论是基团理论。基团概念早在拉瓦锡时代就已产生，拉瓦锡把化合物看成是由氧和另一部分所组成的，与氧结合的那另一部分被称为基。1815年盖吕萨克将基的概念推广到有机化合物，认为有机基团作为一个整体参加化学反应，它类似于无机物组成中的原子。贝采里乌斯接受了这些观点，并以基的不同形式作为区分无机物和有机物的一个标准。他于1817年提出，无机界中的一切可氧化的物质含有简单基，而一切有机物都是复杂基的氧化物。这些都是与他的二元论思想一脉相承的。但是，19世纪30年代末杜马（J·B·A·Dumas）建立的取代学说则表明，含氢的物质在经受氯、溴、碘等作用时，每失去一个氢原子就获得一个氯原子或一个溴原子或一个碘原子，取代后而生成物质与原来物质相比较，性质没有重要变化。可是，氢和氯在贝采里乌斯的电化学二元理论中一个是正电性的，另一个是负电性的，负电性的氯怎么可以取代正电性的氢呢？取代后性质怎么可能不发生重大变化呢？显然，有机化合物发生取代反应的事实是与电化学二元理论相矛盾的。1834年杜马提出了类型论。类型论的基本思想是认为每一化合物都是由原子按照一定格式（即类型）组合成的整体，化合物的性质主要决定于原子的数目和排列，只要总的格式（即化合物的类型）不变，尽管其中的一部分被与之性质不同的另一部分取代，化合物的性质就不会发生重大变化；而且，化合物中一部分被另一部分取代后所得物质与原来物质的性质即使有很大变化，但总的格式在本质上也没有改变。由此可见，类型论注重化合物的类型（即由原子建立起来的格式），也就是注重原子排列的形式。

同分异构概念也是在19世纪30年代提出来的。1832年，贝采里乌斯总结和概括了别人和自己的实验结果，指出在化学中“长期以来把含有相同组

分按相同比例组成的物质必定具有相同的性质当作公理”，但是实验业已表明，“原子的绝对数目和相对数目可能相等，可是它们的结合可能出现不相同的方式，以致具有绝对相同组成的物质变得不相同”，“我们如果打算提出关于这种关系的假设，就会看到似乎是组成物质的简单原子可能按不同方式结合在一起”，“我建议把相同组成而性质不同的物质称为 isomerism”。这个词被我们译为“同分异构”。在这个概念中提出了结合方式问题，而结合方式不仅包含着原子的排列，也包含了排列中的结合，即原子之间的相互作用。从这点上看，如果说类型论着重形式，那么同分异构概念既看重形式，也开始涉及内容，既包含位置关系，也产生了结合关系的萌芽。

结合关系包含着质和量两个方面。在化学史上提出的亲和力概念，就是关于结合关系的质的方面的反映，贝采里乌斯提出的电化学二元学说，是试图解释结合关系的第一个定性理论。化学的发展否定了电化学二元学说，却积累了日益丰富的关于原子之间相互结合的数量关系的资料。例如，弗兰克兰 (E·Frankland) 在研究金属与烷基的化合物时发现，每种金属原子只能和一定数目的有机基团相结合。基于这个发现，他进而考察了无机化合物的化学组成，使他认识到金属有机化合物和无机化合物在结合上有共同性：在金属有机化合物中，金属原子只能与一定数目的基团相结合；在无机化合物中，元素的原子只能与一定数目的其他原子相结合。由此他提出了化合力 (Combining power) 概念，这个概念是亲和力概念的发展，也是化合价 (原子价) 概念的先声。

此后，许多化学家相继提出了类似的概念，例如，奥德林 (W·Odling) 于 1854 年提出了取代值 (Replaceble Value) 概念，凯库勒 (F·A·Kekulé) 于 1857 年提出了原子的基数 (basicity numbers) 概念和亲和力数 (Affinity numbers) 概念，库柏 (A·S·Couper) 于 1858 年提出了亲和力程度 (Degree affinity) 概念，等等。这些概念反映了一个共同的思想内容：元素的原子具有相互结合能力，这种结合有一定的数量关系。这种思想逐步演变为原子价或化合价概念。

与此同时，关于结合关系的质的方面也有发展，形成了化学键概念。化合价和化学键既相联系又相区别。它们有共同思想和理论来源，都是从化学亲和力概念演变而来的。但是，化学键概念是亲和力质的方面的延续，化合价概念则是亲和力量的方面的发展。化学键着重表示结合的性质和本质，化合价则着重表示结合的数量。19 世纪，在尚未深入认识结合的性质和本质的条件下，化学对结合关系的研究重点在数量方面，因而化合价概念表现得特别突出。

在原子排列和结合方式思想发展的基础上，建立了化学结构理论。凯库勒提出了碳是四原子数的，也就是说，碳有四个亲和力单位，是四价元素。以此为基础，在解释多碳原子的化合物时，得出了碳碳相互结合成链的结论。这两点构成了凯库勒的化学结构理论的核心。凯库勒的结构理论是与类型论思想相联系的。他赞成热拉尔的类型论，而且发现了一种新类型，即甲烷类型；他将甲烷类型与原子结合的数量关系结合起来，推测出碳的价数，进而推论出碳碳结合成链的结论。从思想上看，凯库勒的化学结构理论可以说是类型论思想发展的结果。因此，比较地看重分子中原子的排列、结合顺序和

化合价数的表现，把结构视为一种建筑物。

1861年，布特列洛夫在《论物质的化学结构》的报告中明确提出和阐明了化学结构概念。他指出：“假定一个化学原子具有一定的和有限的化学力（亲和力），化学原子借助这种力来参加形成物质，那么，我拟将这种力的作用的分配或者说在所组成的化合物中各种原子相互结合称为化学结构。”在该定义中，布特列洛夫强调他所说的是化学原子，意指组成分子的元素的最小量，也就是化学不可分的量，与此相对立，他认为物理原子是真正不能分的物质微粒。关于化学原子和物理原子的问题，在当时学术界是个悬而未决的问题。布特列洛夫强调化学原子，是为了与凯库勒为代表的结构思想划清界线。他认为物质的化学性质主要地决定于化学结构，而不是从类型论继承下来的格式。

这样，凯库勒和布特列洛夫分别提出了两种结构概念，他们代表了两种结构观。前者强调结构的样式和形象，后者强调内部的原子结合关系。前者看重原子的结合次序，后者看重原子之间的相互作用和影响。布特列洛夫将原子间相互作用和影响分为两类：一类是直接的，即存在于直接联结的原子之间的相互作用，这种相互作用是主要的，它决定着分子中原子团或结构单位的典型反应；另一类是间接的，即存在于不直接相联结的原子之间的相互影响，这种影响是次要的，但是它使原子团或结构单位的典型反应发生某种变化。

19世纪下半叶，基于物质旋光性与结构的关系的研究，维利森努斯（J·A·Wislicenus）于1873年提出了原子在空间不同排列问题，1874年，范特霍夫（J·H·Van 't Hoff）提出 CH_4 分子四面体模型，把分子结构从平面发展为立体。与此同时，勒贝尔（J·A·Lebel）基于物质的旋光性和晶形的半晶面特征之间的关系的研究，根据事实进行推理，得出了与范特霍夫一致的结论。他们各自从不同的起点开始，建立了立体化学理论。该理论以化合价和化学键为基本概念，将原子之间的相互作用与原子的空间分布联系起来，形成了构型概念，使凯库勒和布特列洛夫为代表的两种化学结构观趋于统一。构型既包含空间形式也包含原子之间的相互作用，是形式和内容的统一。

进入20世纪以后，以量子力学为理论基础逐步揭示了化学键的实质，使化学键理论获得了发展。在此基础上，化学家们对化学结构的有关问题，得到了更为深入的认识。另一方面，结晶化学和立体化学也获得了进一步发展，尤其是立体化学领域，1925年哈沃斯（W·H·Haworth）提出了构象（Conformation）概念，50年代，巴顿（D·H·R·Barton）提出并发展了构象分析（Conformational Analysis）概念，构象分析的基本信条是认为分子的物理和化学性质与其占优势的构象有关。结晶化学和配位化合物化学的发展，形成和发展了配位数概念。构象分析和配位数概念，反映了空间关系。原子之间的相互作用和空间分布，在现代化学中以化学键理论为基础得到了统一。在现代化学中，凡言结构必谈键，这已经成了一种范式，一种公认的准则。键是什么？在一般意义上说，键是关系，反映着原子之间直接的或间接的联系。

什么是关系呢？关系是事物、现象之间及其内部诸要素之间的相互作

用。正如恩格斯所指出的：“既然这是一种关系，这就表示其中包含着两个相互关联的方面。我们分别考察每一个方面；由此得出它们相互关联的性质，它们的相互作用。”世上有各种各样的关系，现代数学已经表明，任何一种关系都可以表示为一个集合自身到自身的映射，用哲学语言表述，关系是事物之间的相互依赖、相互作用。结构也具有这个特点，结构也是关系。正是在这个意义上可以说原子是一种关系，分子也是一种关系，实物同样是一种关系，一句话，只要从它们内部或外部相互作用方面看都是关系。

2. 简单关系和复杂关系

从结构是关系的观点来说，化学中的关系（简称化学关系）本质上是复杂的。因为最简单的氢分子也是由两个核和两个核外电子构成的，其他分子的结构比氢分子还要复杂。化学对关系的研究，有一个突出的特点，就是力求将复杂关系化为简单关系，从简单关系入手，逐步认识复杂关系，在研究复杂关系时仍然力求将其简单化。

关系表现为由部分构成的整体。整体可以分为两类；有组织的和没有组织的。没有组织的整体可以看作部分的简单集合，整体和部分、整体中的各部分之间的关系是简单的。对于有组织的整体，情况则不同，这种整体不是部分的简单相加，整体不等于部分之和，整体大于部分之和。原子和分子都是有组织的整体。原子是由原子核与核外电子构成的有组织的整体，原子的性质不同于原子核、核外电子的性质，同样，分子的性质也不同于构成它的原子（或核电子）的性质。

但是，在化学中却常常应用加合性模型，把复杂物质的性质看成是组成该物质的各个部分所做贡献的总和。诚然，有些性质具有加合性，例如，分子量是组成分子各原子的原子量之和；但有些性质则不具有加合性，而具有结构性。日本学者细矢治夫等指出：“在分子所具有的许多性质中，有的就是原来原子性质的汇合与继续，有的则是因原子与原子之间结合方式不同产生了原来原子所没有的新性质。前者可以分子量为代表，称为‘加合性质’，后者如反应性，称为‘结构性’。”在许多化学教科书或专著中，常常可以看到一些数值表，表中列出了某些原子或原子团对化合物总的性质作出的贡献，这也是以加合性为基础的。海特勒（W·Heitler）和伦敦（F·Lontan）用量子力学理论和方法处理 H_2 以后，化学家们仍然试图以加合性假设解释分子的能量。美国著名化学家鲍林在《化学键的本质》一书中就曾指出，在考虑分子 A-B 时，假设 A-B 的正常共价键在性质上和 A-A、B-B 类似，可以预期它的共价键能量介于 A-A 与 B-B 之间，这个结果来自正常共价键能加合性假设，也就是说，可以假设 $D(A-A)$ 和 $D(B-B)$ 这两个键能值的算术平均就是不同原子 A 和 B 之间正常共价键的能值。在该书中，他还列出了一些键能数值和相应的计算公式。

化学家们之所以把原本是结构性性质简化为加合性质，其原因不外乎两个方面。一方面，人们在一定时期和一定条件下还很难从理论上搞清楚部分与整体、部分与部分之间的相互关系，不得已而为之；另一方面，在不要求很精确的情况下，依据加合性假设并利用经验性资料所得出的结果，可以满足

《马克思恩格斯选集》，人民出版社，1972年版，第2卷，第123页。

细矢治夫、丸山有成：《结构与物性》，方小钰译，上海科学技术出版社，1979年版，第3页。

实际需要。

简单关系和复杂关系是相对的。就多原子分子而言， H_2 是最简单的。依据价键理论，它是由两个氢原子构成的关系；按照分子轨道理论，氢分子是由两个核与两个电子构成的体系或关系。多原子分子含有多个原子核和更多的电子，多原子分子中形成的关系与氢分子相比更为复杂。在有机化合物中，甲烷分子是最简单的分子，可是甲烷分子已经是多原子分子了，至于说其他有机化合物的分子，含的核与电子的数还要多，这还不算高分子、生物大分子。总之，化学家面对的和需要处理的是非常复杂的关系。

组成分子和原子的粒子（主要是核与核外的电子），特别是电子，其运动规律已经不能用经典力学来说明，只能用量子力学来解析。在化学文献中虽然仍沿用“轨道”概念，如原子轨道和分子轨道，但是，“轨道”一词的含义已经发生了根本变化。“轨道”一词的原意系指物体运动的固定路线。哥白尼在《天体运行论》中所说的轨道，指的是天体的运行路线，是正圆形，开普勒把它描绘成椭圆形。他们提出的太阳系的模型对卢瑟福产生了影响，基于 α 粒子散射实验，卢瑟福于1911年提出了原子的类似行星运动的结构模型，将轨道概念从行星运动推广到原子核外的电子运动。在量子力学中，原子轨道是表示电子运动状态的波函数，有时人们说电子在什么什么轨道上运动，例如说电子在 1_s 轨道上运动，其含义决不是像在天体运动中的那种轨道上运动，而是指电子处于 1_s 的空间运动状态，氢原子 1_s 原子轨道的空间图象是个球，电子在空间出现的几率密度分布是球形，其界面图是球面，有时简化地表示为圆。因此，这里所说的原子轨道，或者说电子在 1_s 轨道上运动，不能理解为电子绕核运动的轨迹是圆。马利肯（R·S·Mulliken）称原子轨道为函数或轨函。他指出，“轨函”一词仅仅是单电子轨道波函数的简称，或更好一些，是单电子轨道本征函数的简称，这后一种表达法指单个电子在一个原子或分子的薛定谔量子力学波动方程的任何一个所谓特征解或本征函数，它所反映的是电子在原子核周围空间出现的几率密度。

原子或分子中的关系是复杂的，电子运动也是复杂的，但是在应用量子力学理论研究原子和分子时，又不得不作适当的简化，以使复杂的关系尽可能变得简单，这就是量子化学经常应用的“删繁就简”的方法。例如在多电子原子或分子中，本来原子核与核外电子都处于复杂的运动中，每一个电子都与原子核和其他电子发生复杂的相互作用，可是在实际研究中，经常采用各种各样的近似方法进行处理。近似方法的实质就在于“删繁就简”，使复杂变得简单，因为实际情形是复杂的，在处理时把它视为简单的，因此处理的结果只能是“近似”，不可能完全相同或一致。在这个意义可以说，近似是繁与简矛盾的表现，是“删繁就简”的必然结果。

在量子化学中，提出了各种各样的近似处理方法。首先将原子核视为静止不动的；其次，在研究电子的运动状态时，从复杂的相互作用中选定一个电子，把其余电子对该电子的排斥作用，看作对原子核吸引作用的遮盖或削弱，这样就把该电子所受的吸引和排斥的复杂的关系，简化为核对所选定电子的吸引作用，只不过这时的吸引作用是受到其余电子的屏蔽效应的吸引作用而已。在这种情况下，我们看到，在现实中，电子和电子之间、一个电子和核之间存在着极其复杂的关系；但是在研究中，人们却把核凝固起来，并将一个电子从复杂的相互关系中割离出来，只研究它与核的关系；只是在研

究了一个电子的行为以后，依次照此方法办理，研究第二个、第三个……电子的运动，通过迭代化为整体。这种处理方法实质上是将复杂关系分化为各种简单关系，进而再回复到复杂关系。

类似的情形在量子化学中比比皆是。例如，在众多电子中只考虑价电子的作用，把原子核与内层电子视为一个整体。日本量子化学家福井谦一，从原子的外层轨道类推到分子的外层轨道，在研究分子的变化时，提出了前线轨道理论。他将分子中已被电子占据的最高轨道和未被电子占据的最低空轨道称为前线轨道，他指出，在一些分子发生变化时，发生变化的只是前线轨道。对此，福井谦一说道：“在1952年我找到了如下规律，即芳香烃受亲电试剂进攻时易起取代反应的位置乃是分子中最高占据轨道（HOMO）上电子密度分布亦即该轨道的伸展程度最大的位置。那时分子中电子密度当然指的是所有轨道上占有电子的总和。由于当时区分仅在某特定轨道上电子的理由还不清楚，所以这一显著的结果尚未引起人们的注目。我称这种特定轨道为前线轨道。同一年马立肯（Mulliken）提出了在分子化合物中存在着电荷转移力的思想，这一理论很快就被用来说明前线电子的奇妙行为。此后前线电子理论又指出了对于亲核试剂的取代反应是最低的空轨道（LUMO）起着特殊的作用，从而它便推广到适用于整个化学反应的普遍理论了。”前线轨道理论着重研究特定轨道在化学反应中所起的重要作用，因而把复杂的关系转化为相对简单的关系。在分子轨道理论中有各种计算方法，从方法论上看，大都具有变复杂为简单并使所得结果尽可能符合实验事实的意义。

化学所处理的关系是很复杂的，尽管人们可以通过各种途径和方法，设法使之简化，以求得结果，但是，实际的关系毕竟是复杂的。在一定意义上可以说，化学也面临着探索复杂性的任务。因此，在继续探索研究途径和计算方法的过程中，也应当关注与探索复杂性有关的理论和思想及其进展，如果在理论思想和方法论上有新的开拓，或许会带来更为丰硕的成果。

四、化学中的过程

1. 反应和过程

化学中的反应即化学反应，是物质转变为其他物质的过程，化学中的过程即化学过程，是化学反应经历的途径。化学反应必定经历一定途径，化学过程也就是指这种途径。因此，在化学中，反应就是过程，反应即过程。化学反应和化学过程具有相同含义。

化学既要研究物质的组成和结构，也要研究过程。化学对过程的研究有着悠久的历史。从炼金术时期算起到 19 世纪中叶以前，可以算作前科学时期，也就是关于化学过程经典理论建立以前的时期。炼金术把性质的变化视为化学变化；从波义耳到拉瓦锡，物质组成的变化即意味着物质性质的变化，因而物质组成和性质的变化过程也就是化学过程；从 19 世纪初到 19 世纪中叶，物质的组成和结构决定物质的性质，物质组成和结构的变化也就必然导致物质性质的变化，在这个阶段，人们实际上是把化学过程看作物质的组成、结构和性质的变化过程。那么，为什么会发生变化呢？正如前面指出过的，化学家们把发生化学过程的原因归结为化学亲和力，所以这个时期对化学过程的认识主要是围绕引起变化的原因而展开的。贝托雷在总结已有的研究成果的基础上指出，化学过程一方面决定于化学亲和力的大小，另一方面决定于反应物的质量，同时外部条件对化学过程产生重要影响。在他之后对化学过程的研究，大体上就是沿着这三条线索而展开的。

19 世纪中叶，一些化学家和物理学家从化学过程中能量转化的观点探寻亲和力的量度，实质上是从化学运动形式与其他运动形式的关系，主要是与物理运动形式的关系去寻求亲和力的量度。热力学理论建立以后，一些学者引用热力学理论和方法研究化学反应，获得了带有规律性的认识，结果逐步撇开了亲和力问题，撇开了发生化学反应的原因这个比较抽象的问题，转向了化学反应是怎样进行的这个比较具体的问题。这种研究主要涉及反应物和产物及其状态，通过状态（始态和终态即平衡态）说明过程的方向和限度。这就是通常所说的热力学观点。

与此同时，化学家们从化学反应本身出发，研究它们的内在根据和外部条件的关系，研究外部条件，如温度、压强、浓度等对化学反应进行快慢的影响，探索对化学过程进行控制的方法。这就是通常所说的化学动力学观点。

化学热力学观点和化学动力学观点，着眼点不同解决的问题也不同，但两种观点相互补充，共同解决化学过程问题，为理解化学过程提供了理论依据。

进入 20 世纪，相继建立了双分子碰撞理论和过渡态理论。前一种理论认为，只有活化分子发生碰撞才能引起化学反应；后一种理论也以活化分子碰撞为前提，不同的是该理论认为分子碰撞以后先形成一个过渡态，而后分解生成反应产物。此后，对化学过程的研究一方面进一步深入到具体途径，在微观水平上，从研究分子结构的变化与反应途径的关系，进而研究由指定量子态的反应物所进行的反应，或生成一定量子态产物分子的反应，以及反应物和产物分子的量子态均为定值的反应，这就是态—态反应；另一方面，从平衡态、近平衡态扩展到远离平衡态。1955 年，普里戈金（I·Prigogine）指出，远离平衡态的化学体系可以出现非阻尼振荡的化学过程，后来发现了

这种过程，普里戈金提出了耗散结构理论。

总之，化学反应即化学过程，是分子的组成、结构和性质随时间的延续而发生的变化过程，它包含三个主要因素：反应物和产物的组成和结构；过程的方向、限度和速度；过程的展开，即途径，化学中称为反应历程或反应机理。

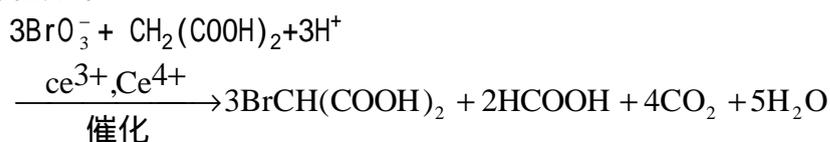
2. 化学过程的形式

化学过程的形式多种多样，概括起来可分成四大类，这就是变化过程、平衡过程、循环过程和演化过程。

变化过程是物质的组成、结构和性质发生变化的过程，通常所说的化学反应，是组成、结构和性质发生变化的过程，因而，化学反应过程也就是变化过程，这是化学研究的过程中的主要内容。

平衡过程是正向反应和逆向反应速度相等的化学过程。在化学中，化学平衡也是一种过程，是随时间延续而保持平衡状态的过程，也可以称之为化学持续过程。平衡过程与变化是不可分的，平衡中有变化，变化中保持平衡。从一种平衡，通过变化，达到另一种平衡，这就是平衡移动过程。依据勒夏忒列原理，一个系统达到平衡时，如果外部条件（如温度、压力等）发生了变化，则系统的平衡状态将被破坏，平衡混合物的组成将发生变化，系统将重新达到一个新的平衡状态。平衡状态的破坏是变化，经过变化又达到一个新的平衡状态。而在平衡状态中，系统内各物质的量不随时间而发生改变，但实际上变化并未停止，只是在任意时刻内，产物的生成速率和反应物的消耗速率相等而已。因此，严格地说，平衡过程也是一种变化过程，或者说是一种特殊的变化过程，即宏观上保持不变（系统内各物质的量）的变化过程。

循环过程是周而复始的变化过程。例如，化学振荡就是一种化学循环过程。1959年，贝洛索夫和扎布金斯基经过大量化学实验发现，丙二酸在3价铈离子和4价铈离子（以硫酸盐形式存在）催化下与溴酸盐发生反应，体系（液相）一会儿变红，一会儿变蓝，每过30秒钟改变一次颜色。该反应的计量方程如下：



反应开始后有 Br^- 生成，它是一种中间物，用电位法测定 Br^- 的浓度以及 Ce^{3+} 与 Ce^{4+} 的浓度比。测定结果表明，反应开始一段时间之后，中间物 Br^- 的浓度以及 Ce^{3+} 、 Ce^{4+} 的浓度比呈周期性的起落变化，颜色变化是浓度变化的表现。“周期性变化”一语道出了这种过程的本质，周期性和变化是这种过程的两个基本要素，没有周期性只有变化不能构成循环过程，而没有变化也就无所谓周期性，只有周期性与变化的有机结合才构成了循环过程。由此可见，循环过程也是变化过程，是一种特殊的变化过程，即周而复始的变化过程。在这种过程中，只是中间物等组元的浓度能呈现振荡现象，反应物和产物的浓度是不呈周期性起落变化的，但其变化的速率呈现出时快时慢现象。整个反应进行过程中体系的自由能呈单调式下降，接近平衡时，振荡现象逐渐减弱，直至达到平衡，振荡现象最终停止下来。迄今已经发现了许多化学振荡反应，有些是非均相反应，有些是均相反应；均相反应中，有些是

气相反应，有些是液相反应，以后者居多。化学振荡反应都包含着自催化过程，正是由于发生自催化反应，才引起了某些中间物的浓度超过了原稳定态时所应具有数值，使振荡现象有可能发生。化学振荡反应中，都有某种物质对于连续发生的反应中的某个步骤，或者起活化作用，或者起阻化作用，它们能够构成一个化学反馈环路，开启或关闭某中间物形成的反应步骤。化学振荡反应体系是远离化学平衡态的，反应历程都是很复杂的。化学振荡表现了周而复始的现象，也就是表现为一种循环，不过，这种循环不能一直保持下去。

演化过程是具有特定方向的变化过程，演化的方向可分为进化和退化。退化过程是熵增加的过程，一般的化学过程总是趋向于平衡状态；进化过程则相反，是熵减少的过程，即有序程度增加的过程，普里戈金的耗散结构理论指出，在远离平衡态的敞开系统（即开放系统）中，系统各要素之间存在非线性相互作用，系统与环境交换物质和能量，系统可从环境中引入负熵而使系统总熵减小，使系统由无序状态转化为有序状态，形成耗散结构。

一般地说，化学研究的主要是化学变化，而化学进化也是化学变化的一种重要形式，是有方向性的、从低级到高级、从简单到复杂的变化。关于化学进化及其与化学变化的关系，将在下一章详细讨论。

3. 过程和中介

过程离不开途径，途径是过程的展开形式，过程是借助于中间环节而展开、而实现的。中间环节在哲学上称为中介，中介也就是中间环节之意。

化学过程的中介有许多具体形式，例如，过渡态、中间体等等。

过渡态概念是 20 世纪 30 年代提出来的。珀兰尼 (Polanyi) 称之为过渡态，艾琳 (Eyring) 称之为活化络合物。过渡态是一种极不稳定的络合物，它是从反应物到产物的中间环节。现在，过渡态概念也被引入哲学，成为哲学研究的一个概念。

化学中的过渡态，不仅是一个中介，而且是控制环节。因为作为过渡态的活化络合物分解才能得到产物，使化学过程完成，而活化络合物分解为产物这一步，是控制反应速度的决定性的一步，它的速度决定了整个过程的速度。

化学过程的中介，除了过渡态外，还有其他许多形式。例如，有机反应中的活性中间体：自由基、离子基、正碳离子，催化理论中的中间化合物、催化活化过渡态，等等，都是过程的中介，借助于这些中介的具体形式，使过程由此达彼，使反应物转化为产物。

下面，对这些作为中介的不同形式作一简要说明。

自由基，也叫游离基，具有不成对电子的原子、分子或基团等。基的概念产生很早，据肖莱马 (Carl Schorlemmer) 考证，最先应用基 (labase) 或根 (Le radical) 这些术语的是拉瓦锡的友人德莫武 (Guyton de Morveau)，而拉瓦锡本人则把化合物中和氧结合的部分叫做基或根。后来，在有机化合物的基团理论中，基被视为有机化合物中不发生变化的基团，它的作用犹如无机化合物中的元素。这个理论使化学家提出了制备游离基（即自由基）的任务。19 世纪 40~60 年代，弗兰克兰、柯尔柏、布特列洛夫等人分别用不

同方法试图得到自由基，但都没有成功。直到 1900 年，冈伯格才发现碳自由基，得到了三苯甲基自由基的黄色溶液；1929 年，潘内斯等人又测定了甲基和乙基的生成。本世纪 30 年代，海伊、沃特斯、卡拉什等人研究发现，有机自由基可作为活泼中间体形成链反应。

离子基，是带电荷的正、负离子自由基，正如前面指出过的，它兼有离子和自由基的特点，既带电荷又有不成对电子。离子是 19 世纪发现的。从 1832 年开始，法拉第进行电解实验，1833 年发现了电解定律，1834 年为解释电解现象，将溶液中被电解出来的带电荷的物质称为离子，1887 年，阿伦尼乌斯提出，电解质在水中离解成离子。20 世纪，发现电子和建立原子结构模型以后，离子的形成机理得到了解释。在发现自由基并确立自由基的结构以后，将离子和自由基结合起来，形成了离子基概念。离子基可以发生自由基型反应、离子型反应和电子转移反应。

正碳离子，是带有正电荷的含碳离子。20 世纪 20 年代，英戈尔德等人研究有机化学反应机理时提出了正碳离子及其反应，正碳离子被认为是共价 C—C 单键中一对电子的异裂反应而产生的，它是一类重要的活性中间体。

除上述的以外，还有温斯坦提出的非经典正碳离子（它是具有某些结构特征的正碳离子），负碳离子，卡宾（又称碳烯），等等。所有这些都是活性中间体的不同形式。化学家们经研究发现，有机化学反应如同其他类型的反应一样，都要经过一定的步骤，或者叫做历程。按照传统的分类，反应历程分为两类：离子反应历程和自由基反应历程。20 世纪 20 年代发现了双烯加成反应，它既不属于离子反应历程也不属于自由基反应历程，曾被称为“无历程反应”。多数有机反应是有历程反应。“无历程反应”是相对于过去已知的有历程反应而言的，“无历程反应”是一步反应，也有一个过渡态。有历程反应，或者说阶段反应从反应物到产物，中间形成活性中间体，它寿命很短，非常活泼，是从反应物到产物的中介。

化学中对催化过程的解释产生了各种理论。中间化合物理论认为，在催化反应中，催化剂先与某一反应物发生作用，生成活性中间化合物，此中间化合物进一步反应生成产物，同时催化剂分解出来。在此过程中，中间化合物就起了中介作用。催化活化过渡态理论则认为，在催化反应中，反应物分子与催化剂表面的活性中心形成吸附活化络合物，进一步反应转变为产物。在此过程中，吸附活化络合物也具有中介作用。在此基础上进一步发展起来的多位催化理论、多位集团催化理论等，虽然对催化反应机理的解释有所不同，但是其基本思想中有共同点，这就是存在着过渡和中介。

广义地说，化学反应都有其从反应物到产物的具体途径，或叫做历程。化学反应所经历的具体途径，都具有中介的性质，它们都是由此达彼的桥梁，或者说，都是从反应物到产物所经历的中间环节。

通常的化学计量反应方程式，如 $\text{H}_2 + \text{Br}_2 = 2\text{HBr}$ 反映的是化学反应的总过程、总结果和计量关系。这种反应式所表示的是总反应，是宏观化学反应过程。一个总反应是由一个或数个基元反应构成的，所谓基元反应是指反应物微粒一步直接转化为产物微粒的过程，每一基元反应又是由许许多多的微观上的分子变化所构成的，微观上的分子变化叫做基元分子过程。

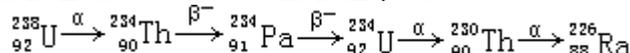
两个或两个以上的基元反应集合起来构成复合反应，构成复合反应的基元反应的集合，称为反应历程，也就是反应物转化为产物所经历的途径与步骤。从揭示反应历程的角度看，复合反应过程可以分成几种形式：连串反应

过程、平行反应过程、对峙反应过程和链反应过程。

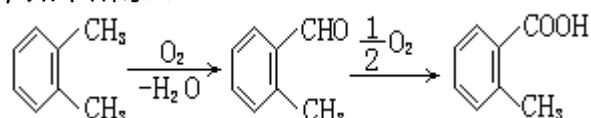
连串反应或连续反应是前后相继的几个基元反应构成的复合反应。所谓前后相继，指的是前一基元反应的产物恰是后一基元反应的反应物，可以下式表示：



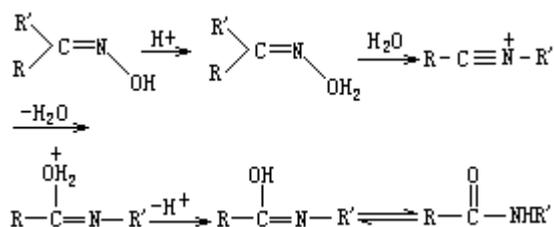
放射性衰变过程是一种连续反应过程，例如：



诚然，这种放射性衰变过程是一种核反应，不是一般的化学反应，核反应是核化学研究的内容。一般化学反应中也存在连续反应形式，例如，邻二甲苯的液相氧化，如下所示：

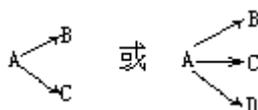


有机化学中的重排反应，是有机化合物分子中共价键结合顺序发生改变的反应，从实质上看也具有连续反应的性质。例如，德国化学家贝克曼于1886年发现的酮肟在酸性条件下发生重排生成N-烃基酰胺的反应，反应过程如下式所示：



从上式可以看出，这个反应具有前后相继的形式。

平行反应是反应物同时参加两个或两个以上的基元反应所构成的过程，具有如下式所示的形式：



例如，乙醇可以进行脱水反应也可以进行脱氢反应。

对峙反应又叫可逆反应，由一个正向的基元反应和逆向的基元反应构成，正向反应的产物恰好是逆向反应的反应物。

链反应是一类重要化学反应，由于反应过程中活性中间体（如自由基或自由原子）的交替和重复产生，使反应物分子转变为产物分子。在反应体系中，依靠光、热、化学引发，使稳定分子分解为自由基，一旦引发，反应会持续进行下去，旧链载体消失新链载体产生，直到链载体消亡，使链反应终止。例如：



开始为光引发，即 $\text{Cl}_2 + h\nu \rightarrow 2\text{Cl}$ 随之发生反应：

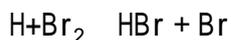


以上说明，任何一个化学总反应过程都是从反应物转化为产物的过程，可写成：

反应物_(总) 产物_(总)

任何一个基元反应也是从反应物转化为产物的过程，可写成：

反应物 产物 每一基元反应只有一个“反应物 产物”，而每一个“反应物 产物”都是总反应中经历的一个步骤。例如，在 $\text{H}_2 + \text{Br}_2 \rightarrow 2\text{HBr}$ 的反应中，历程为：



其中每一个“ ”都表示一个基元反应，即反应物转化为产物，该基元反应的产物又成为后一基元反应的反应物，依此类推。在连续反应、对峙反应和平行反应中，情况也都如此。总之，“反应物_(元) 产物_(元)”乃是化学过程的基本构成要素、基本环节，或者说是构成化学过程的“细胞”。

反应物和产物都是物，在宏观上表现为实物，在微观上表现为微粒，可以是分子、原子和离子，也可以是原子团、自由基，它们具有实体性，或者说它们都是化学实体。在这个意义上说，它们是物而不是过程。可是由物形成的关系，即“反应物 产物”，已经是过程。化学过程是由物的关系、由“反应物— 产物_(元)”的总和构成，而“反应物_(元) 产物_(元)”则是过程的载体。在这里已表现出实体、关系和过程三者之间是有联系的。下面，让我们进一步分析这种联系，并讨论与此有关系的一些哲学问题。

五、实体、关系、过程

1. 实体和过程

恩格斯在《路德维希·费尔巴哈和德国古典哲学的终结》中曾经指出，“一个伟大的基本思想，即认为世界不是一成不变的事物的集合体，而是过程的集合体，其中各个似乎稳定的事物以及它们在我们头脑中的思想映象即概念，都处在生成和灭亡的不断变化中，在这种变化中，前进的发展，不管一切表面的偶然性，也不管一切暂时的倒退，终究会给自己开辟出道路，——这个伟大的基本思想，特别是从黑格尔以来，已经如此深入一般人的意识，以致它在这种一般形式中未必会遭到反对了。”在这段话中，恩格斯认为，在辩证法看来，世界不是一成不变的事物的集合体，而是过程的集体体。应当如何理解恩格斯这个论断呢？

应当注意，恩格斯在事物两字之前加了“一成不变的”修饰语，这一点很重要。在恩格斯从事哲学研究的时期，变与不变的矛盾十分突出，变与不变的矛盾反映了辩证法与形而上学思想的对立和斗争。恩格斯在同一本著作中还指出，“旧的研究方法和思维方法，黑格尔称之为‘形而上学的’方法，主要是把事物当做一成不变的东西去研究”，“认为事物是既成的东西的旧形而上学，是从那种把非生物和生物当做既成事物来研究的自然科学中产生的”。显然，当恩格斯说世界不是一成不变的事物的集合体的时候，斯中的事物是指形而上学理解的事物，也就是认为一成不变的事物，是当做既成的东西看待的事物。由这样的事物构成的集合体仍然是一成不变的，这样的世界是一成不变的世界，是死气沉沉的、没有生气的世界。相反，过程是变化的进程、发展的过程。恩格斯在评述气的世界。相反，过程是变化的过程、发民兵的过程。；成格斯在评述黑格尔哲学的时候这样说过：“黑格尔第一次这是他的巨大功绩把整个自然的、历史的和精神的世界描写为一个过程，即把它描写为处在不断的运动、变化、转变和发展中，北企图揭示这种运动和发展的内在联系。”正是在形而上学和辩证法的对立的意义上。恩格斯作出了世界是一成不变的事物的集合体，而是过程的集合体的论断。

如果将事物不是看作一成不变的东西，而是看作变化的、发展的东西，换句话说，如果对事物不是从形而上学的观点去理解，而是从辩证法的观点去理解，将会得出什么结论呢？事物是变化的和发展的（客观事物本身就是如此），事物的变化和发展形成过程，在这样理解的事物的意义上，世界是事物的集合体必然也是过程的集合体，因为事物是过程，过程也离不开事物，事物是处在不断运动、变化、转化和发展过程中的事物，过程是事物的运动、变化、转化和发展的过程。事物和过程是不可分割的，正像物质和运动是不可分割的一样，设想没有事物的过程和没有过程的事物都是荒谬的。脱离、抛弃事物而涉谈过程，过程失去了载体，过程就是过程，过程就是一切，这种观点是错误的，必将导致错误结论，怀特海的过程哲学就持有这种观点。

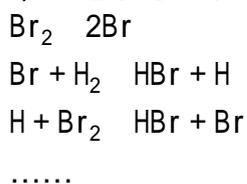
恩格斯讲世界是过程的集合体时，丝毫也没有否定过程与事物的联系，他指出，就认识次序来说，“必须先研究事物，而后才能研究过程。必须先

《马克思恩格斯选集》，人民出版社，1972年版，第4卷，第239~240页。

《马克思恩格斯选集》，人民出版社，1972年版，第4卷，第240页。

知道一个事物是什么，而后才能觉察这个事物中所发生的变化”，因此，当自然科学对事物的研究已经发展到可以向前迈出决定性的一步，“即可以过渡到系统地研究这些事物在自然界本身中所发生的变化的时候，在哲学领域内也就响起了旧形而上学的丧钟”。他接着指出，直到18世纪末，“自然科学主要是搜集材料的科学，关于既成事物的科学”，但是在19世纪，自然科学本质上是整理材料的科学，关于过程、关于这些事物的发生和发展以及把这些自然过程结合为一个伟大整体的联系的科学。很明显，在恩格斯看来，事物是变化和发展的，是处于过程之中，而过程正是事物的变化、发展的过程。

正如前面指出的，在化学中，实体和过程是密切联系的，不可分割的。化学中的实体，如原子、分子以及它们的各种衍生物，在化学反应中经历一定途径，也就是过程。连续反应， $A \rightarrow B \rightarrow C \rightarrow D \dots\dots$ ，分别地看，A、B、C、D等都是化学实体，或者说是某种实物，它们各自既具有一定的稳定性又具有变化性，如果没有一定的稳定性，根本分不出A、B、C、D，如果没有可变性，A不能转化为B，B也不能转化为C，C也不能转化为D；综合起来看， $A \rightarrow B \rightarrow C \rightarrow D \dots\dots$ 构成了从A开始的反应过程。前面指出的链反应，例如氢和溴的化合反应，包含着许多基元反应，在每一基元反应中都表现为“反应物—产物”，这样，在 $Br_2 \rightarrow 2Br$ 中， Br_2 是化学实体的一种形式，是一种分子，同时它又是反应物，“ $Br_2 \rightarrow 2Br$ ”表示 Br_2 分子具有可变性，受到激发生成 $2Br$ （产物）； Br 又成为反应物，与 H_2 发生反应生成产物 HBr 和 H ，如此等等，总起来可以下式表示：



前一个基元反应中的产物成为下一个基元反应的反应物，一环接一环，形成链反应过程。其他化学反应的情形大体上都是如此。

各种化学反应的历程说明，实体（原子粒子、分子粒子等）的转化形成过程，而过程是以实体的总和的形式表现的。在这个意义上可以说，化学世界（化学所研究的世界）是过程的集合体，而过程是由化学实体的连续变化或转化构成的；因此，化学世界也是可变化的实体的集合体。

2. 过程和关系

有一种观点认为，在19世纪，构成宇宙的基本构件基本上是实体，在那种认识水平上，恩格斯作出了世界是过程的集合体，已经使认识前进了一大步；20世纪，科学认识继续从过程深入到关系。按照这种观点，认识的发展的基本线索是：实体—过程—关系。前面刚刚讨论了实体和过程，从存在（或客观）方面说，实体的变化形成过程，过程在实体的变化中获得表现；从认识方面说，正如恩格斯指出的，人们先研究事物，而后才能研究过程。下面，

《马克思恩格斯选集》，人民出版社，1972年版，第4卷，第240～241页。

《马克思恩格斯选集》，人民出版社，1972年版，第4卷，第240～241页。

《马克思恩格斯选集》，人民出版社，1972年版，第4卷，第240～241页。

我们着重讨论过程和关系。

我们在前面已经讨论了结构和关系，结构是关系，是组成之间的结合关系和位置关系。现代科学和哲学进而把系统视为关系。贝塔朗菲认为，系统是处于一定相互联系中的与环境发生关系的各组成成分的总体。结构和系统都不是凝固不变的，它们的变化即过程。现在要问：过程和关系有什么联系呢？

就化学世界而言，过程也是关系，或者说表现为关系，表现为物的关系、状态关系和结构关系。

化学中的过程是变化过程，正如前面多次指出的，首先表现为物的关系，即反应物和产物之间的关系。

反应物 产物

反应物和产物可以是一种，也可以是两种或两种以上：

A B

或 A+B C+D

所谓物的关系，首先指反应物之间的关系，反应物形成的体系（即反应体系）。既然是一种关系，就表示其中包含着相互关系的各个部分，可分别地考察其中的每一个部分，进而考察它们相互关系、相互作用。从这点出发，可以抽出其中的一个部分（如 A）首先加以研究，另一部分 B 则表现为与 A 发生作用的部分。就每一部分来说，其组成和结构是发生某种过程的内在根据；但是，要实际发生某种过程，还取决于与之发生关系的另一部分的情况。例如，酸和碱发生关联，反应物 A 究竟表现为酸还是碱，要视与之发生作用的 B 的性质来决定；同样，在氧化—还原反应中，A 是氧化剂还是还原剂，也要看与之发生关系的 B 的性质是什么。不必说所谓的两性化合物，就是氢，在氧化—还原反应中一般都作为还原剂，可是，在与碱金属发生反应时，它却成了氧化剂。

所谓物的关系还表现为反应物和产物的关系。反应物转化为产物，产物也可以再转化为反应物，在后一种情况下，产物变成了反应物，而原来的反应物变成了产物。反应物和产物是在相互关系中确定的，是相对于对方而言的，反应物是相对于产物说的，产物是相对于反应物而说的，脱离了对方自己一方就失去了意义，脱离了这种关系，任何一方也就失去了意义。

反应物变为产物，它们之间通过转化或变化建立联系和关系，也只有通过转化或变化才能建立起联系和关系。如果不发生转化，也就是说，反应物未发生化学反应，没有产物生成，也就不能建立反应物和产物的关系。这就表明，反应物和产物的关系表现了变化和转化，变化和转化形成过程，因此，关系体现了过程，过程寓于关系之中。

反应物和产物都是实物。分别地看，反应物和产物都是物，联系起来看，从反应物到产物则是过程。换句话说，物的关系表现了过程，形成了过程。

其次，我们简要说明状态关系与过程。物质分子及其性质发生的变化，可以从实物的角度通过反应物和产物之间的关系来说明，也可以从别的角度通过其他关系来认识。状态是研究问题的一个重要角度，状态关系是一种重要关系。

一般地说，状态是系统特性的量度或描述。在科学中，物质系统的状态

用状态参量（简称态参量）来描述或量度。如刚体的机械运动的状态用位置和动量来描述，热力学系统的状态用温度、压强等态参量来描述，处于定态的微观粒子的状态由波函数 (r, t) 来描述；同样，在化学反应中，反应物和产物形成的体系可以看作化学热力学系统，它的状态可用温度、压强、组分的摩尔数等来描述，如此等等。反过来说，我们也可以用体系的性质（用态参量表征）规定它的状态，如用温度、压强等性质规定气体的状态。规定体系热力学状态的宏观性质的态参量，用数学语言来表述，叫做状态函数。

体系处于确定的状态，其状态函数具有确定数值，状态变化状态函数值也随之改变；反过来说，状态函数值不变，表明体系的状态不变，状态函数值的改变，表明体系的状态发生了变化。状态变化时，状态函数的变化只与体系的始态和终态有关，而与变化途径无关。

始态和终态的关系，可以表示成下述形式：

始态 终态

始态和终态，分别地看，都是体系的特定状态，它们反映的是体系相对静止特征；但是，把它们联系起来看，或者说从它们之间的关系来看，从始态到终态，表示了状态之间的差异，一个用“始”来表示，另一个用“终”来说明，这种状态之间的差异，就是状态的变化，在化学领域中，就是化学变化，状态变化通过状态关系，状态关系体现出状态变化。

状态关系在化学热力学中用状态函数的变化来表征。根据热力学第一定律，一个封闭体系，从内能状态 U_1 变化到内能状态 U_2 应有下列关系：

$$U_2 - U_1 = q - w$$

式中， U_1 为始态的内能， U_2 为终态的内能， $U_2 - U_1$ 等于体系由始态到终态时发生的内能变化，用 $U_{\text{体系}}$ 来表示：

$$U_{\text{体系}} = U_2 - U_1 = q - w$$

该式表示的意思是：体系从始态变到终态时，内能的变化等于供给体系的能（热量 q ）和体系对环境做功（ w ）耗去的能量之差， U 为正值时，表示内能增加， U 为负值时，表示内能减少。 w 有膨胀功和非膨胀功两种形式，假定一封闭体系在变化中只做膨胀功， w 代表膨胀功，又假定体系变化是在体积不变情况下发生的过程，即不做膨胀功，即 $w = 0$ ， $U = q_v$ ，该式表示，体系在恒容过程中所吸收的热量全部用来增加体系的内能。如果体系变化是恒压过程，则有如下形式， H （焓）= $U + PV$ ， H （焓变）= qp ，通过焓变可以剖析化学反应是吸热反应还是放热反应： H 为正值，表示体系从环境吸收热能，反应为吸热反应； H 为负值，则为放热反应。

在化学热力学中，把可以做有用功的能叫自由能，又称吉布斯自由能，用 G 表示。

$G = G_{\text{产物}} - G_{\text{反应物}}$ ， $G_{\text{反应物}}$ 和 $G_{\text{产物}}$ 分别表示反应物和产物的自由能，也可以说分别代表终态和始态的自由能， G 叫做自由能变，即自由能的变化，它可以作为化学反应方向的判据。

当 $G < 0$ 时，产物的自由能小于反应物的自由能，反应是自发的；

当 $G > 0$ 时，产物的自由能大于反应物的自由能，反应是非自发的。

当 $G = 0$ 时，产物的自由能等于反应物的自由能，反应体系处于平衡态

。G 与质量有关，始态 终态，G_{反应物}不断减小，G_{产物}不断增大，最后达到平衡态。平衡态是体系内部矛盾暂时相对统一的表现。

1834 年，克拉珀龙 (Clapeyron) 导出一个表示相变温度与蒸气压关系的方程，后来克劳修斯 (Clausius) 从热力学理论推导出该方程。方程把相变平衡曲线的斜率 dp/dT、相变潜热 L₁₂、相变温度 T 及相变时物质比容的变化 v 联系起来，表示成：

$$\frac{dp}{dT} = \frac{L_{12}}{T(v_2 - v_1)}$$

1864 年，范特霍夫把此方程加以推广，导出一个能适用于任意的反应过程，并称之为动态平衡原理：在物质（体系）的两种不同状态之间的任何平衡，因温度下降，向着产生热量的平衡方向移动。同年，法国勒夏忒列提出了平衡移动原理：任何一个处于稳定的化学平衡状态的系统，当受到外部作用的影响而改变整个系统或某些部分的温度或聚集性（压力、浓度、单位体积的分子数）时，如果这种变化一旦发生，将引起温度或聚集性按外部作用引起的变动符号相反的变化。吉布斯用抽象的数学方法建立了热力学基本方程和包括自由能概念在内的各种相应的平衡判据，引入了热力学势 μ（在化学上叫化学势或化学位），把原来只能处理单组分体系的克拉珀龙——克劳修斯方程推广到能处理多组分的多相系统，对化学平衡问题有了理论依据。

化学平衡移动原理表明，化学反应达到平衡状态，如状态所处的条件发生变化，平衡则向削弱或解除这种变更的方向移动。依据这个原理，条件的变更引起平衡移动，平衡的移动又反作用于条件的变更。如果我们用因果性的哲学语言来表述，平衡移动原理说明，原因（条件的变化）引起结果（平衡移动），而结果（平衡移动）又反作用于原因（对条件的变化削弱或解除），原因和结果发生了交互作用。

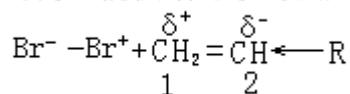
封闭系统总是自发地趋向于平衡态，对平衡态的研究是化学热力学的核心内容之一。但是，实际的化学反应体系常常既不是孤立系统（系统与环境没有物质和能量交换）也不是封闭系统（系统与环境没有物质交换只有能量交换），而是敞开系统，即体系与环境之间既有物质交换也有能量交换。同时，实际的化学体系有些不是可逆的，而是不可逆的。耗散结构理论指出，一个敞开系统（又称开放系统）到达远离平衡态的非线性区，某个特定的非平衡定态失去稳定性时，通过涨落可能发生突变，自发地发展到一个时间、空间或时空有序的新的状态，这种状态需要不断地与环境进行物质和能量交换才能维持，这种新的有序结构叫耗散结构。

最后，我们讨论结构关系和过程。状态是系统性质的明确表征，结构则是系统性质的隐蔽凝结，状态既显露了系统的内部特性，也反映了外部条件的作用，结构则主要是系统内部要素相互关系的集中表现。如前所述，状态变化形成关系，状态关系体现变化。同样可以说，结构形成关系，而结构关系可以说明结构变化，进而说明化学变化。结构关系也有许多形式，可举例说明如下。

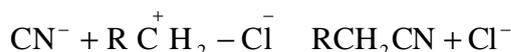
北京师范大学无机化学教研室等：《无机化学》，人民教育出版社，1982 年版，第 87~110 页。

编写组编：《化学思想史》，湖南教育出版社，1985 年版，第 222 页。

对立关系。例如，一种反应物具有亲电子结构，另一种反应物具有供给电子结构，二者发生化学反应。在亲电反应中，一反应物需要电子或具有“亲近”电子的结构，它容易与另一能供给电子的反应物发生反应。例如：

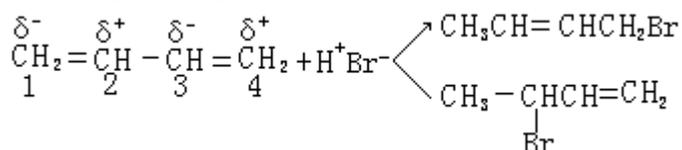


在 $\text{Br}^- - \text{Br}^+$ 中，具有缺少电子的 Br^+ 结构，叫亲电试剂；在 $\text{CH}_2 = \text{CH} - \text{R}$ 中，具有电荷密度较大的 C_1 结构， Br^+ 首先进攻 C_1 ，而后 Br^- 再与 C_2 发生作用。从电子结构看， Br^+ 和 C_1 二者对立，相反相成，发生化学反应。在亲核反应中，一反应物能供给电子，容易与另一种需要电子的反应物发生反应。例如：



在这个反应中， CH^- 能供给电子，叫做亲核试剂，它首先进攻 C^+ ，而后 Cl^- 带着电子离去。亲核试剂和亲电试剂是相反的，对立的，在同一反应中，相对于亲电试剂的另一种试剂（或称为底物）就是亲核试剂；同样也可以说，相对于亲核试剂的另一种试剂就是亲电试剂。

诱导关系。在单双键交替出现的共轭分子中，电子的运动发生离域现象，其中任一原子受到另一种试剂的作用，很快就会传递给其他原子。例如：



丁二烯中的 C_1 受到 H^+ 的影响，很快传递到 C_2 、 C_3 和 C_4 ，使电子分别向 C_1 和 C_3 转移，增强了 C_1 和 C_3 的电负性，使 H^+ 更容易和 C_1 结合，而后 Br^- 再与 C_2 或 C_4 结合。这种情况表明，一种反应物的结构受到另一种反应物结构的影响，或者说，一种反应物结构诱使另一种反应物的结构发生变化，它们之间存在诱导关系，经过诱导造成更为有利的发生反应的结构。

匹配关系。电子的转移过程是化学键的断裂和形成过程，而化学键的成和毁，又是化学反应的基础。分子轨道理论表明，可以把分子轨道看成是原子轨道的组合，只有分子轨道的能量比相应的原子轨道能量低，才能形成成键分子轨道，而且成键的原子轨道的能量应当相似或相同，才能相互匹配。这种情况说明，构成统一体的双方具有某种共同的或相似的特点，才显得“门当户对”，易于形成统一体，这叫相似相成。

对称关系。分子轨道对称守恒原理指出，在协同反应中，反应物与产物的分子轨道对称性相合时，反应易于发生，不相合时反应难于发生。对称是变化中的不变性，是事物或运动以一定的中介进行某种变换时所保持的不变性。对称是不变性，而且是变化中的不变性；反过来说，有不变才能有变。协同反应中，对称性不变才易于变，易于发生反应。例如，在丁二烯转为环丁烯的电环化反应中，丁二烯四个轨道 x_1 、 x_2 、 x_3 、 x_4 中，处于基态的 x_1 、 x_2 是占据轨道，环丁烯中有一个轨道和一个轨道是占据轨道，还有一个 *轨道和一个 *轨道是空轨道。在顺旋过程中，反应物和产物基态的分子轨道一一相连，是基态之间的关系，所需能量低，加热时即可由丁二烯转变

为环丁烯，而且在加热时只能得到顺旋产物。在对旋过程中，有 x_2 与 π^* 相连，即基态与 π^* 激发态相连，加热时基态难于反应，经过光照时，将电子激发到 x_3 轨道，可与环丁烯 π^* 轨道关联，反应容易进行。因此，光照条件得到对旋产物。

综合以上所述可以看到，物的关系（反应物和产物）、状态关系（始态和终态）和结构关系（对立、诱导、匹配、对称）都是关系，这些关系与过程相联系。一定的关系决定和影响过程，而过程通过关系而发生，通过关系而实现，通过关系而表现。

化学领域中，实体之间发生关系，关系决定和影响过程，而过程是实体（或实物）的变化过程，实体、关系和过程相互联系、相互制约。就化学认识而言，正如前面指出过的，从实体到关系到过程。所以，我们可以说，化学世界是变化着事物（实体）的集合体，也是过程的集合体；化学认识从实体深入到关系，又从实体和关系发展到过程。实体、关系、过程既表现了化学世界的辩证法，也体现了对化学世界认识的辩证法，后者不过是前者的反映而已。

第三章 化学中的变化和进化

通常认为，化学是研究物质的组成、结构、性质、变化以及合成的科学，从来不谈进化、发展，似乎化学只研究变化，与进化、发展无缘。随着科学的发展，进化、发展的观念逐步在科学领域中产生、生根、发展。

从 18 世纪中叶开始，首先是天体演化学，从研究存在过渡到研究演化。康德第一个提出了天体演化的思想，把太阳系看作一个形成、演化的过程。接着是地质学，19 世纪 30 年代，莱伊尔运用现实主义的方法，从认识地球表面的现在去推测和研究地球表面的过去，使地质学具有历史的含义。到 19 世纪中叶，生物学成为研究进化的典型科学，生物进化论是科学的进化理论。20 世纪，特别是 20 世纪 60 年代末，由于耗散结构理论的建立，物理学也开始研究进化。正是在科学的发展中，在各门科学纷纷从研究存在、变化过渡到研究进化、发展的过程中，化学在继续研究化学变化的同时，也逐步地研究进化，即化学进化，由此建立了化学进化的理论和学说。

那么，什么是化学变化，什么是化学进化？它们之间有什么区别和联系？这些问题正是这一章所要讨论的。

一、从化学变化到化学进化

化学中的进化、发展观念，不是一下就产生和发展起来的。最初，进化、发展的观念消融于或溶解于物质的变化和转化的一般观念之中。众所周知，在古代，化学和其他科学一起，以自然哲学的面目出现和存在着。古代自然哲学提出了万物的起源（本性）问题。古代哲学家，无论是中国的还是外国的，都把万物的本原或者归结为某种感性实体——元素，或者归结为某种性质——原性，或者归结为某种微粒——原子。万物由它的本原（或称始基、原初物质、原始物质等）产生，万物又复归为本原。产生和复归，包含着物质循环的思想，而循环是周而复始的运动过程，是周期性变化，因此，循环包含着运动和变化。同时，循环也可以说是演化（进化和退化）的原始形式。但是，从演化的原始形式到进化观念的产生和形成，经历了漫长的历史过程，因为，一般地说，人们对事物的认识，首先要弄清楚它是什么，如何变化，而后才能研究它的进化和发展。

1. 化学变化思想的产生和发展

恩格斯在《自然辩证法》中指出，17、18世纪，与近代自然科学发展水平相适应，形成了形而上学的自然观，它的中心是“自然界的绝对不变性这样一个见解。”这种自然观对化学家也产生了影响。19世纪末以前，化学家和其他领域中的科学家一样，认为元素和原子是绝对不变的，是不可分的，是不可转化的。但是，在具体的科学研究中，化学家们所面对的是物质的变化。

从炼金术开始，化学形成了一种传统，即研究物质变化的传统，炼金术研究的是性质的变化；波义耳和拉瓦锡时代，研究的是性质和组成的变化；19世纪，研究的是性质、组成和结构的变化。如果说，在恩格斯所处的时代，辩证法和形而上学之间对立和斗争的焦点是变与不变，那么我们可以指出，化学所研究的基本内容是物质的变化，变化的思想在化学中已经成为不言而喻的事了。从历史来看，早在17、18世纪，化学中的变化观念是与辩证法一致的，到19世纪，化学中取得的成就，如尿素的人工制成，元素周期律的发现，化学反应理论的建立，都是辩证自然观赖以产生的重要自然科学基础。

20世纪以来，就一般科学思想或哲学观点而言，变与不变的矛盾基本解决了，变化的观点已经深入人心，成为人们的日常意识。新的问题是如何变，经过什么途径变。化学对化学变化（或化学反应）的研究也进入了一个新的阶段。从研究物质的化学变化发展到研究化学反应的历程，使化学理论向着解决如何变、通过什么途径变化的方向前进。在这点上，化学也走在了前面。

2. 化学进化思想的产生

早在19世纪中叶，门捷列夫等发现了元素周期律，建立了元素周期系，揭示了元素之间的内容联系。从表面形式上看，元素周期表仅仅表现了元素之间的并列关系：各个元素并列在一起形成族和周期，各个族和各个周期并列在一起形成元素周期表。透过形式看其实质，不能不引起科学家的进一步思索：元素之间为什么会有这样的并列关系，这种并列关系意味着什么？

早在发现元素周期律之前的 1815 年,英国年青医生普劳特基于原子量数据提出了一个假说,他认为氢是母质,其他元素都是由不同数量的氢构成的。就其科学思想而言,这个假说是古代自然哲学万物起源于某种始基思想的复活,在这里,元素代替了万物,元素的始基正是氢,一切元素起源于氢,包含了起源思想,而起源是发展的前提。在发现元素周期律以后的 1886 年,英国科学家克鲁克斯在《元素的产生》一文中,重新提出了与普劳特相类似的思想:所有元素都是由一种原始物质逐步凝聚而成的,这种原始物质叫做“Protyle”,即最初的物质。俄国科学家莫罗卓夫进而提出了物质进化思想。他认为已知的化学元素是由较简单的元素逐步复杂化而产生的。应当指出,元素周期表中的元素,在 19 世纪被丝醋魔遣槐涑模 姑挥斜蒙闯墒强杀涑模 勺; 摹*19 世纪末 20 世纪初,随着放射性的发现和对放射性的研究,才从根本上改变了对元素周期律的认识,进一步揭示了它的内在本质,从而进一步认识了元素的演化性质。人们逐步从元素之间的并列关系中意识到它们的演化和发展。现代天体物理学的发展,提出了许多假说,描述了宇宙中化学元素的形成和演化过程。诚然,这些假说都是依据原子核反应而建立起来的,而原子核的演化过程也就是化学元素的演化过程,一般地说,已涉及核物理学。但是,无论如何,元素周期表作为元素的分类系统,它在元素的并列关系中孕育着、包含着元素演化和发展的内容,因而也就在化学中孕育着演化和发展的思想。

分子的分类,或者确切地说,化合物的分类工作,是在有机化学中展开的。1843 年,法国化学家日拉尔(Gerhardt)提出了“同系列”概念,同系列中各化合物的化学性质相似;它们按照同一化学方程式进行化学变化;同系列中各化合物的物理性质有规律地变化,分子式中单纯量的增加,每次都形成一个不同的化合物,量变引起质变。此后,霍夫曼(Hofmann)、威廉逊(Williamson)、日拉尔、凯库勒等人提出和发展了类型论。尽管类型论存在着缺点和问题,而且随着有机化学的发展逐步被有机化学结构理论所代替,但它不失为一种有机化合物的分类理论,在有机化学发展史上起过一定作用。有机化合物的分类,就其内容和直接结果来看,不过是将已知的或既成的事物(化合物)并列在一起,使之系统化。如同 19 世纪对化学元素的分类一样,在现存的事物的并列关系中,引起了人们进一步思考。例如,1859 年,日拉尔提出,“化学研究物质转化的顺序,……研究它们的过去和未来”。

3. 化学进化思想的形成

19 世纪中叶,物理学中发现了热力学定律,并用熵增加原理表述第二定律,第一次揭示了过程的不可逆性。化学很快就引用热力学成果研究化学反应过程,建立了化学热力学,探讨化学反应的方向性和限度等问题。方向性或不可逆性,具有演化的含义,热力学第二定律所揭示的演化,实质上是退化而不是进化。化学进化思想的形成,与哲学研究相联系,特别是与恩格斯

编写组编:《化学发展简史》,科学出版社,1981 年版,第 243—244 页。

札布罗茨基:《门捷列夫的世界观》,裴光楠,徐贤珊译,三联书店,1959 年版,第 127 页。

转引自伊利切夫主编:《作为一般发展理论的唯物辩证法——现代科学中的发展问题》(俄文版),莫斯科《科学》出版社,1983 年版,第 74 页。

关于自然科学哲学问题的研究相联系。

恩格斯在《自然辩证法》等著作中，考察了自然界辩证发展和物质运动形式的相互关系，明确提出了化学进化的思想。他指出，物质运动形式有低级和高级之分，有简单和复杂之别，物体的机械运动是最低级、最简单的运动形式，按照从简单到复杂、从低级到高级的发展，恩格斯认为物质运动形式的顺序依次是机械运动形式、物理运动形式、化学运动形式和生物运动形式。他认为，生命或生物运动形式，是自然界最高级、最复杂的运动形式，而“生命是整个自然界的一个结果，这和下面这一情况一点也不矛盾：蛋白质，……是在特定的由整个自然界的联系所给予的条件下产生的，可是它又正好是作为某种化学过程的产物产生的”。恩格斯从运动形式转化的观点提出了从化学向有机生命领域的转化，他特别强调指出：“真实的转化在历史中——在太阳系的、地球的历史中。”

从这些论述可以看出，在恩格斯看来，化学进化是与生命起源问题密切联系在一起的，化学进化实质上是通过化学过程产生出生命的物质载体——蛋白质，而生命是蛋白质的存在方式，因而，化学进化是从非生命世界向生命世界转化过程的一个重要环节，化学运动是从非生命运动形式向生命运动形式转变的中介和桥梁。在天然自然界中，化学过程最终会导致生命的产生，在人工自然界中，人们可以通过化学过程合成蛋白质，从而模拟和证实生命的起源。

科学史表明，科学思想的发展正是沿着恩格斯所揭示的道路前进的。化学进化思想正是在与生命起源问题相联系而逐步形成的。这就是说，化学进化思想是在化学与生物学相接触的领域产生的。此外，化学进化思想的产生，还与化学和其他科学的边缘领域的研究工作密切相关。

地球化学的创始人之一维尔纳茨基在《地球化学概论》（1924年）一书中，阐述了地壳中硅和硅酸盐、锰、溴、碘、碳以及一些放射性元素的历史。地球化学研究的历史，只限于与地球历史相联系的事物的演化过程，也就是与岩石圈、水圈和气圈相联系的事物的演化过程。地球化学是从化学观点考察地球上的物质演变，首先是地壳物质的演变的科学，它涉及化学元素的迁移和重新分布，从而导致了原子的历史的研究。维尔纳茨基曾把地球化学称为关于地球上原子历史的科学。维尔纳茨基提出了“活物质”概念，所谓“活物质”指的是生物圈内有机体的总和。维尔纳茨基认为，活物质是地球表面最强大的地质营力，它的影响遍及整个地壳化学，几乎影响地壳所有元素的地球化学史，不研究生物就不能很好地理解化学元素的历史。维尔纳茨基由此提出了生物地球化学的基本思想，形成了生物地球化学理论，在生物圈的背景上研究化学元素的历史，并把化学运动的历史视为地球历史的一部分，探讨地球上无机物质的历史和地球上生命起源的原因和条件。

从地球化学扩展开去，就进入了一个更加广阔的领域，即宇宙化学的研究领域。宇宙化学研究宇宙物质的化学组成及其演化。宇宙物质一般指的是构成太阳系、银河系、河外星系的物质以及星系间介质等。研究宇宙物质的化学组成及其演化，意味着探讨宇宙物质的具体的历史图景，包括宇宙物质的前化学阶段到化学阶段的发展过程。

恩格斯：《自然辩证法》，于光远等译编，人民出版社，1984年版，第32页。

恩格斯：《自然辩证法》，于光远等译编，人民出版社，1984年版，第148页。

当代宇宙化学研究发现，星际介质好像是一个巨大的有机合成实验室，在这个实验室中已经合成了像甲醛、氰的衍生物、有机酸、不饱和的有机化合物、复杂的醚、腈、氨的衍生物，还有如丙烯腈、乙醛、甲酰胺、甲酸甲酯等化合物分子。研究陨石和月球岩石的物质组成，也发现了多种多样的有机化合物分子，甚至还发现了氨基酸、腺嘌呤、卟啉等。所有这些发现表明，物质的化学过程和前生物系统的产生是密切联系着的，这些发现在某种程度上证明了通过物质的化学进化导致生命的起源的学说。

从化学观点研究生命的起源，使我们进入了生物化学研究领域。生物化学是研究生命物质的化学组成及其在生命过程中的功能和转化的科学，它的研究内容是十分丰富的，但归根到底，生物化学探讨的最基本的问题，或者说生物化学研究的首要目的是说明生命是什么，生命是怎样产生的，也就是生命的实质和起源。

上面所说的地球化学、生物化学、生物地球化学、宇宙化学等，都是化学与其相关学科之间形成的边缘学科或者叫交叉学科。这些研究领域都与化学有着密切的联系，又不是化学本身，在这些研究领域都这样或那样地涉及了历史的观点，或者体现了历史的观点。因此，可以看到，进化、发展的观点正是从化学与其他科学（如地球科学、宇宙学、生物学等）相接触、相交叉的领域逐步渗入到化学中来的；反过来说，在化学的核心领域，或者说在本来意义上的化学科学中，研究的内容主要是物质分子的组成、结构、性质及其变化，从反应物到产物的变化，并未涉及进化和发展问题。

4. 化学进化思想的发展

在当代，生命的本质和起源问题，已经成为现代自然科学的一般性问题，引起了许多科学领域的专家的关注和兴趣。在生物学家、生物物理学家、生物化学家看来，这个问题是最重要的一个问题；化学家、地质学家、地质化学家、天体物理学家、宇宙学家等，也从不同角度关注着这个问题，同时，生命的本质和起源问题也引起了哲学家的注意，甚至可以这样说，在当代很难指出一个研究领域或一门科学与这个问题毫无关联。

关于生命起源问题，自本世纪 20 年代奥巴林首次提出一个具体的模型（团聚体模型）以来，许多科学家结合具体的科学成果提出了各种假说。一些假说认为，地球上的生命是通过化学进化而产生的，从而发展了化学进化的思想。在化学中，随着对催化作用的深入研究，发现了催化剂在催化过程中的易变现象，使催化剂的概念发生了根本性变化，引起了对催化剂变化方向问题的研究。这种研究与生命起源问题的研究相联系，使化学进化的思想在化学研究领域获得了发展和具体化。1969 年，前苏联化学家鲁金科（A·P）试图将达尔文进化论与化学进化相对比，提出了“进化催化作用”概念和开放催化系统自我发展理论。鲁金科认为，这个理论不仅使化学家关注化学进化和生命起源问题，而且产生一门新的化学学科——进化化学，它应当具有自己的特殊的研究对象（开放催化系统）、研究方法和任务。由于进化化学的产生，传统化学即通常所说的研究物质分子的组成、结构、性质及其变化的化学，被称为经典化学。

凯德洛夫和谢列布罗夫斯卡娅：《生命的起源和本质及其哲学观点》，载于《门捷列夫全苏化学学会杂志》，1980 年第 3 期，第 262—264 页。

近一二十年来，以耗散结构理论、协同学、超循环理论为主体的自组织理论产生并获得了迅速发展，自组织理论研究系统的演化和发展，它涉及系统演化、发展的动力、过程及与时间的关系等诸多方面和诸多问题。发展是从简单到复杂、从无序到有序、从低级到高级的变化。发展可以划分成四种类型，即生物个体的发育，物理化学耗散结构的形成，生物的进化，社会的进步。其中，物理化学耗散结构的形成是自组织理论研究的一个重要问题，这种研究用现代科学理论和实验成果具体说明了进化和发展，从而也有助于对化学进化的进一步认识。

二、化学变化

1. 变化和化学变化

变化是辩证法的范畴。辩证法承认变化，形而上学不承认变化。正如前面刚刚说过的，在《自然辩证法》一书中，恩格斯指出，形而上学自然观的中心“是自然界的绝对不变性这样一个见解”。毛泽东在《矛盾论》中也指出，形而上学的宇宙观的物点之一，就是用静止的观点去看世界，把世界一切事物、一切事物的形态和种类都看成是永远不变化的，如果说有变化，也只是数量的增减和场所的变更。与形而上学相反，辩证法则承认变化，用变化的观点看待世界的一切事物。恩格斯指出，由于自然科学的发展，辩证自然观代替了形而上学自然观，他用流畅的语言描述了辩证自然观的基本点：一切僵硬的东西溶化了，一切固定的东西消散了，一切被看作永久存在的特殊东西变成了转瞬即逝的东西，整个自然界被证明在永恒的流动和循环中运动着。变化作为辩证法的一个范畴，其含义只能通过它与其他范畴的关系才能被揭示出来。正如物质、运动等范畴的含义只有通过每一范畴与另一范畴的关系才能被揭示出来一样。物质是唯物主义哲学中的一个基本范畴。列宁谈到物质定义时说道：“下‘定义’是什么意思呢？这首先就是把某一个概念放在另一个更广泛的概念里。”像物质、运动、变化这样的一般性的概念，不可能再找到比它们更广泛的概念，因此，对于这样的概念（也就是范畴），除了指出它们与其他概念（即范畴）的关系，实际上不可能下别的定义。例如，恩格斯在给运动下定义的时候，实质上是揭示运动和物质的关系，他写道：“运动，就它一般的意义来说，就它被理解为存在方式、物质的固有属性来说，包括宇宙中发生的一切变化和过程，从单纯的位置变动起直到思维。”在这里，恩格斯指出了运动是物质的存在方式、物质的固有属性，在这个基础上进一步指出了运动形式的多样性。变化这个辩证法的范畴与什么范畴相关联呢？可以举出三种关联或三种关系：变化和运动，变化和不变，变化和进化。

关于变化和运动的关系，恩格斯在研究自然辩证法的笔记中写了这样的话：“可以应用到物质上的运动，就是变化一般”。运动和变化是同义的。运动是变化一般，变化一般就是运动，但运动和变化又不是绝对同一的。例如，形而上学者可以承认行星及其卫星的运动，但是却不承认这种运动状态的变化，在他们看来行星及其卫星的运动是从来如此永远如此的，或者像恩格斯所描述的，依照形而上学观点，行星及其卫星一旦由于神秘的“第一推动”而运动起来，它便依照预定的椭圆轨道继续不断地旋转下去，或者无论如何也旋转到一切事物的末日。由此看来，只有承认运动同时又承认变化，才是辩证法。

恩格斯：《自然辩证法》，于光远等译编，人民出版社，1984年版，第9页。

《毛泽东选集》，人民出版社，1991年第2版，第1卷，第301页。

恩格斯：《自然辩证法》，于光远等译编，人民出版社，1984年版，第15页。

《列宁选集》，人民出版社，1972年，第2卷，第146页。

恩格斯：《自然辩证法》，于光远等译编，人民出版社，1984年版，第124页。

恩格斯：《自然辩证法》，于光远等译编，人民出版社，1984年版，第124页。

恩格斯：《自然辩证法》，于光远等译编，人民出版社，1984年版，第9页。

变与不变是互相对立的，不变指的是稳定、静止、平衡，它使事物、种类、状态具有质的规定性，变指的是变动、变更、转变、转化；同时它们又是相互依赖、相互联系的，没有不变无所谓变，没有变也无所谓不变，变化的含义通过不变得以显示和体现。恩格斯在谈到运动和平衡的关系时指出，平衡是和运动分不开的，物体相对静止的可能性，暂时的平衡状态的可能性，是物质分化的本质条件，因而也是生命的本质条件，但一切平衡都只是相对的和暂时的。在这里所说的运动和平衡的关系，同样适用于变化和不变的关系。只承认不变而不承认变化是形而上学，但只承认变化根本否定暂时的、相对的不变，任何事物转瞬即逝，它们不能存在，也是不正确的。

化学变化是一种特殊的变化，是相对于其他变化而言的，在一定意义上说，自然科学中各个部门都是研究变化的。力学研究宏观物体在时间和空间中的变化，量子力学研究微观客体的变化，生物学研究生物体的变化，物种的变化，天文学研究天体的运动和变化，地学研究地球表面和内部变化，如此等等。化学研究的变化，即化学变化，从现代化学研究的实际内容来看，主要是物质分子的组成、结构和性质的变化。这是化学变化区别于其他变化的根本标志。众所周知，就研究客体这一点而言，化学与物理学、生物学有共同之处，化学研究分子，物理学和生物学也研究分子。但是，物理学研究分子，或者着重于研究分子状态的变化，如分子的聚集态的变化，或者着重于研究分子的组成和结构，而不研究它们的变化；化学研究分子，一方面研究分子的组成和结构，另一方面研究分子的转化。生物学研究的分子，主要是生物大分子及其复杂的、高级的结构和功能，并把它们看作生命的物质载体。化学所研究的分子，主要是无生命物质的分子，作为生命载体的生物大分子是化学与生物学共同研究的分子，是生物化学研究的对象。

2. 化学变化中的矛盾

化学变化在化学科学内部称为化学反应，主要是物质分子的转化。物质分子是核电子体系或由核电子通过相互作用所构成的体系。这种体系可以是单核电子体系，如稀有元素的单原子分子；也可以是由两个或两个以上的核电子构成的体系，可以是同种元素的原子的核电子构成的，如单质分子，也可以是不同元素的原子的核电子构成的体系，如化合物分子。这里所说的相互作用或化学相互作用，就是核电子体系之间的相互作用，也就是化学键。

化学键有多种类型，如离子键、共价键、离子—共价键、配位键、氢键、金属键等，它们或者是基于电子的转移而形成的离子之间的静电作用，或者是基于核电子之间的电磁相互作用。在价键理论中，分子被视为由原子构成的，原子保持其自身的电子结构，因此，化学键的分类是依据成键的原子轨道类型和沿键轴交盖的形式进行的。在分子轨理论中，把分子看作一个整体，每一个电子（主要指价电子）都属于整个分子，它在所有原子核和其余电子所形成的势场中运动，分子轨道就是电子在这种势场中的运动状态。

化学键是核电子体系之间相互作用即吸引和排斥的结果。当吸引作用占优势时形成化学键，排斥作用占优势时化学键被破坏。例如，当 A、B 两个氢原子趋近时，电子在两核间出现的几率密度增大，分子能量降低，形成化学键。能量是排斥的一种形式，分子能量降低，表示分子在成键时释放出能量，排斥减小，吸引增大，吸引占了优势，分子成键时所释放出的能量或分子能量降低的部分，用数字表示就是键能。如果情形相反，则不能形成化学键。

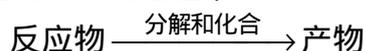
成键分子轨道使分子成为相对稳定的体系。在一定条件下（如与其他物质分子发生碰撞）使化学键受到破坏，分子自身的组成或结构发生变化，导致原来分子的瓦解，新分子的形成，即从一种分子转化为另一种分子，发生了化学变化。这样看来，化学变化是核电子体系之间的排斥和吸引，化学键的破坏和形成，表现在化学个体上，就是物质分子的分解和化合。其实质是电子、电子对、质子或原子分子粒子的转移过程。

分解是指核电子体系之间相互作用的瓦解，也就是由吸引占优势转化为排斥占优势；化合则是指核电子体系之间相互作用的形成，也就是吸引占了优势。用一般的化学术语来表述，分解是化学结合（化学键）的瓦解，化合则是化学结合（化学键）的形成。

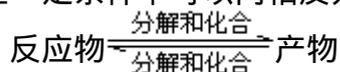
化学中所说的化合反应，指的是两种或两种以上的物质相互作用，生成一种新物质的过程。化合反应中一般先有分解后才化合，或分解和化合同时进行。化学中所说的分解反应，是一种物质生成两种以上较简单物质的过程，从反应机理看，也包含着分解和化合。化合反应和分解反应是方向相反、互相对立的两种不同的化学反应，化合反应使两种或两种以上的物质合而为一，突出地表现出“化合”的特征；分解反应使一种物质分成两种或两种以上的物质，突出地表现出“分解”的特征。但从内部过程来看，这两类化学反应都是分解和化合的对立统一，它们是同一内部矛盾的不同的表现形式。作为内部矛盾，分解和化合是化学反应中相互联系的矛盾着的两个方面，有分解就有化合，有化合就有分解。在化学史上，燃素说把分解和化合割裂开，认为物质燃烧是分解出燃素的过程，把相反的过程又看作是灰烬和燃素的单纯化合的过程，从而掩盖了燃烧及其逆过程的本质。作为外部表现，分解和化合分化为分解反应和化合反应两种独立的化学反应形式。由此可以看出，分解和化合与分解反应和化合反应是有区别的，其区别在于：前者是各种化学反应共同具有的矛盾，后者是两种具体的化学反应形式；前者是内部矛盾，后者是这一矛盾的外部表现。

不仅分解反应和化合反应是分解和化合的对立统一，是通过分解和化合而实现的，其他化学反应也是如此。正是因为一切化学反应，就其内部过程来说，都是分解与化合的对立统一，所以分解和化合是一切化学反应共同具有的矛盾，这表现为矛盾的普遍性；各种不同的化学反应各有其自身的特点，表现出矛盾的特殊性。分解和化合不能脱离各个特殊的化学反应而存在，每一特殊的化学反应中不但包含了矛盾的特殊性，表现出该种化学反应的特点，同时也包含了矛盾的普遍性，包含了分解与化合的矛盾。

如果撇开各种化学反应的特点，一切化学反应都是反应物通过分解和化合生成产物的过程，即：



有些化学反应在一定条件下只能向一个方向进行，叫做不可逆反应，有些反应在一定条件下可以向相反方向进行，称为可逆反应，表示如下：



在这种反应中又产生了新的矛盾，即正向反应和逆向反应的矛盾。上式表示，无论正向反应还是逆向反应都是通过分解和化合而实现的。

在可逆反应中，反应物通过分解和化合转化为产物；同样，产物也通过分解和化合再转化为反应物。在后一种情况下，产物变成了反应物，

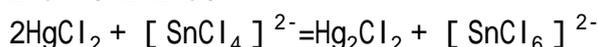
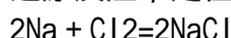
反应物变成了产物。反应物和产物是相对于对方而言的，反应物是相对于产物而存在的，产物是相对于反应物而存在的，离开了对方，自己一方也就失去了意义。

反应物变为产物，它们之间通过转化建立起联系和关系，而且只有通过转化才能建立起联系和关系。如果不发生转化，也就是反应物未发生化学反应，没有生成产物，也就不能建立这种联系和关系。反过来说，反应物和产物的关系，表现了变化和转化，变化和转化寓于这种关系之中。反应物和产物相互转化的速度相等，达到平衡，这是反应物和产物形成的动态平衡体系。在这种体系中，反应物和产物相互制约着，反应物的存在与由它产生的产物的存在不可分割地联系着，产物的存在与由它转化成的反应物的存在也不可分割地联系着。如果将产物从体系中分离出去，反应物将会迅速消失，反之亦然。反应物和产物共处于一个统一体中，它们各自以自身的否定为自身存在的前提，构成平衡体系的矛盾双方，只是由于自身的否定才产生自身的对立物，从而自身才能够存在和保持。

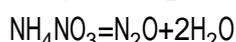
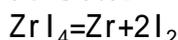
3. 化学变化的形式和内容

化学变化在化学中叫化学反应。化学反应有多种多样的形式，如分解反应、化合反应、氧化—还原反应、酸碱中和反应、缩合反应、取代反应、加成反应、重排反应等等，它们都是某种粒子的转移过程。从粒子转移过程的角度，可以把化学反应分成如下几种类型：

电子转移反应，即原子的氧化数变化产生的氧化—还原反应。氧化—还原反应总是伴随着电子从一个原子向另一个原子的转移过程。依据电子理论，得电子者叫氧化剂，失电子者叫还原剂，氧化—还原反应是在氧化剂和还原剂相互作用中发生的反应。氧化—还原反应可以再细分成两类：分子（或原子）间的氧化—还原反应和分子内的氧化—还原反应。分子（或原子）间的氧化—还原反应，是在不同分子或原子之间发生的，例如：



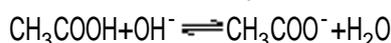
分子内的氧化—还原反应，是在分子内原子之间发生的，例如：



氧化—还原反应的发生，取决于原子之间、分子之间或分子内部原子之间电子的转移，这种氧化—还原反应属于电化学氧化—还原反应。

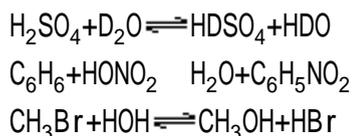
电子对转移反应，也可以叫做配体交换反应。在反应中，电子对从电子给体向电子受体作不完全的转移，形成配位键。

质子转移反应，即酸碱中和反应。依据质子理论，酸是交出质子的物质，碱是接受质子的物质，酸和碱形成共轭关系，如下式所示：



酸 碱 碱 酸

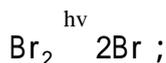
原子分子粒子转移反应，如原子分子置换、同位素置换、自由基置换、有机化合物分子及其他分子中亲电子和亲核交换等，这类反应的发生导致一些原子分子粒子被另一些原子分子粒子所替换。例如：



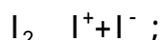
.....

这些反应的特点在于，反应中在相当程度上保持了被转移的原子分子粒子的性质。离解作用、缔合作用、聚集作用也是原子分子粒子的转移过程。离解作用，包括

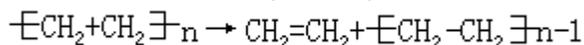
分子离解为原子，例如，



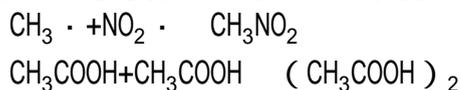
分子离解为离子，例如：



热解聚或光化学解聚，例如，



缔合反应是离解反应的逆反应，例如，



.....

聚集作用是由原子分子粒子和缔合体形成的聚集体。

有机化合物和高分子化合物，数量多，结构复杂，这就决定了有机化学反应和高分子反应的具体形式具有极其多样性的特点。从化学键断裂方式看，可分成两类：一类是在反应之中成键的一对电子平均分给两个原子或原子团，另一类是成键的一对电子为某一原子或原子团所占有，前者为自由基型反应，后者为离子型反应。离子型反应又可分为亲电反应和亲核反应。如此等等。

仅从上面的简单描述中可以得出结论，化学反应的形式是多种多样的；但是，它们具有共同的内容，这就是电子、质子、原子分子粒子的转移。内容（或本质）通过形式（化学反应的具体形式）表现出来，形式反映内容。因此，化学反应形式与某种粒子的转移之间的关系，是形式和内容的关系。化学从研究化学反应入手，揭示其内容，通过对化学反应内容的认识，又帮助对具体化学反应的研究，指导这种研究。

通过各种各样的化学变化，自然界中的物质复杂化了、向前发展了，这就涉及化学进化了。下面讨论化学进化问题。

三、化学进化

1. 进化和化学进化

进化和变化，既相区别又相联系，进化离不开变化，但进化是朝向一个方向的变化；变化固然也有方向，例如从甲变为乙，即指出了方向，但这种方向是不定的，可以从甲变为乙，也可以从乙变为甲，甲和乙之间没有简单和复杂、低级和高级之分，进化则是从简单到复杂从低级到高级的发展。

什么是化学进化？对于这个问题不同的科学家有不同的理解和回答。例如，有一些科学家将地球宇宙条件下有机物和具有生物功能的物质的自然合成看作化学进化；另一些科学家则把元素的起源和一般化合物的形成过程视为化学进化；还有一些科学家认为考察生命起源的一般条件，探索在宇宙天体上生命存在的条件，确定生命现象和其他现象之间的相互联系等，都属于化学进化范围，如此等等。

一般地说，所谓化学进化，通常被理解为物质化学运动形式的起源和前进发展。现代科学业已表明，在通向生命起源的道路上，物质的化学进化是从无生命到产生生命过程中的一个过渡阶段。从生命起源的角度来看，化学进化是产生生命以前的物质的进化，或者说，是从元素的产生到原始生命诞生以前的物质的进化，是从无生命物质向生命物质过渡的阶段。

2. 元素的起源和演化

化学元素是化学运动形式的载体之一，化学元素的形成是物质的化学运动形式发展的起点。因此，我们首先讨论在化学元素层次上的进化观念。

化学元素周期表，从 1 号元素氢开始，包括了迄今已知的 100 多种元素，其中有天然存在的，也有人工合成的。这里所说的天然存在首先是指在地球上所发现的化学元素，而随着宇宙化学的发展，地球上的化学元素在许多天体上也陆续被发现了；反过来说，在天体上发现的化学元素，地球上都有。当人们发现了许许多多化学元素，进而制订了反映化学元素周期律的周期表之后，很自然地会提出问题：地球上乃至宇宙间化学元素是从哪里来的？这就提出了元素的起源问题。其次，地球上乃至宇宙间的元素，是一下子产生出来的呢，还是循序产生的呢？这就是元素的演化问题。

凡是起源和演化问题，“都是‘截取’物质世界的某一层，某一历史阶段而谈其发生过程。”我们讨论元素的起源和演化，就是取元素这一层次，并从氢元素开始，讨论元素是怎么产生的。元素的起源和演化，与恒星演化理论密不可分。根据现代恒星演化理论，元素核的合成是恒星演化的动力，而元素核的合成、元素的演化是与恒星演化同时完成的。

元素起源和演化，有各种各样的理论。但这些理论都是以一定的事实为基础，都必须能够解释迄今科学已经积累起来的关于元素或同位素在宇宙中的丰度。所谓丰度，原来是地球化学中的概念，表示地球中各元素相对平均含量，以重量百分数表示，后来推广到宇宙化学，表示宇宙物质中化学组分（元素或核素）的原子或分子数密度的相对值，或原子数比。现代宇宙化学

解强：《从周期表到核素图》，内蒙古教育出版社，1981年版，第192页。

赵南生编著：《宇宙化学》，科学出版社，1985年版，第4—5页。

认为，太阳的组成是银河系恒星组成的代表，基于这种认识，20世纪50年代，美国科学家聚斯和尤里综合各种资料，确定了元素在宇宙中的相对丰度，绘出了元素和同位素丰度曲线。

基于已知的科学事实，综合原子核聚变反应的研究和大爆炸宇宙学说，认为宇宙爆炸初期形成了氢和氦元素，后来在形成的恒星中，由于引力收缩作用体积缩小，温度升高，恒星内部温度上升到 $7 \times 10^6 \text{K}$ 时，发生氢核聚变，叫做氢燃烧，即4个氢核（质子）聚变成一个氦核，释放出大量能量使恒星膨胀和引力收缩达到平衡。像太阳目前所处的主序星阶段主要依靠此种反应提供能量。继氢燃烧之后，发生氦燃烧，即当恒星内部温度上升到 10^8K 时，氦核聚变，3个 ^4He 合成一个 ^{12}C ，还有2个 ^4He 合成一个 ^8Be 。继氦燃烧后，大约在 5×10^8 — 10^9K 高温条件下，可能发生碳和氧的聚变反应而生成更重的元素，如 ^{20}Ne 、 ^{23}Na 、 ^{24}Mg 、 ^{32}S 、 ^{31}P 、 ^{28}Si 等，这些反应中可释放高能粒子，进而可使 ^{24}Mg 生成 ^{28}Si ， ^{32}S 生成 ^{36}Ar ， ^{36}Ar 生成 ^{40}Ca 等等。应当说明，碳氧燃烧，目前还只是一种设想，尚未得到实验证明，依据设想，恒星内部温度进一步升高，可发生硅爆发反应，即碳氧燃烧中产生的 ^{28}Si 发生聚变，生成 ^{56}Ni ，如此等等。科学家们还设想了其他许多核反应过程，可以说明周期表中已知元素和目前尚未合成的超重元素的产生，同时可以说明元素和同位素的丰度曲线。

尽管在化学元素的起源和演化问题上，迄今还有许多不清楚的地方，还需要科学家们进一步进行探索和研究，但是，从化学哲学的角度看问题，化学元素的起源与演化问题的提出和成为科学家们研究的一项重要课题本身，就具有重大意义。我们知道，在上个世纪，人们还认为元素是不变的、是不可转化的，曾几何时，人们不仅认为元素是可变的、可以转化的，而且认为元素也像其他事物一样，有其自身的起源和演化的历史，这样的观点和科学思想已经成了科学家们的日常意识。这个事实说明，随着科学的发展，形而上学的观点必然要被辩证法观点所代替，科学的发展迫使人们放弃固定不变的形成上学观点，接受变化的、发展的观点，接受辩证法的观点，并以这种观点来指导科学研究工作。这个事实还说明，不管科学家是否明确意识到自己的哲学观点，他们在科学研究中总是这样或那样地体现出一定的观点，实际应用着某种哲学观点，根本不涉及一般理论观点（或者说哲学观点）是不可能的。

3. 分子的化学进化

化学元素的产生和演化只是化学进化的一个阶段。化学元素产生之后，物质的化学进化并没有停止，物质及其运动形式继续向原始生命产生的方向演化。这个阶段的化学进化，从物质客体方面来说，主要表现为分子的化学进化。

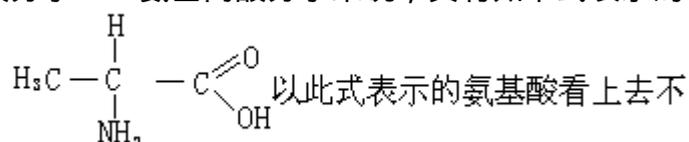
对于化学元素产生以后的化学进化的研究，角度不同，形成的理论和观点也就不同或不尽相同。关于化学进化的理论和观点，概括起来，大致有以下几种。

第一、实体结构观点

奥巴林于1920年提出了一个生命起源的化学进化的具体模型。他指出，最简单的有机化合物——碳氢化合物是产生生命的最初物质，碳氢化合物的

进化导致类似蛋白质的化合物的形成，进一步形成胶体系统，由于自然选择的结果，这种胶体系统内部组织不断进化，最后产生生命。现代生物化学和分子生物学的研究成果表明，地球上物质分子是进化的，进化是分阶段的：从无机物分子到有机物分子，从有机物分子产生出具有生物功能的小分子，如氨基酸、卟啉、嘧啶等，从具有生物功能的小分子产生出复杂的生物大分子，如蛋白质、核酸等，生物大分子形成超分子系统，产生生命。可以看出，进化的物质载体是分子，分子的化学进化与其结构密切相关，这种从分子实体及其结构的角度研究化学进化的观点，我们称之为实体结构观点。

从实体结构观点研究化学进化，人们自然特别注意有机化合物分子及其高度的化学活性。前苏联学者日丹诺夫指出，即使不怎么复杂的有机化合物的分子也是对立性质和对立因素的集中点，具有非常丰富的内涵。就以非常简单的氨基酸分子——氨基丙酸分子来说，具有如下式表示的结构：



怎么复杂，但具有内在矛盾性。首先，从酸碱的观点看，它不同于无机化合物分子，在同一分子内部，同时存在羧基——COOH 和氨基——NH₂。计算表明，在有机化合物分子中引入—NH₂，自由能升高，而引入—COOH，自由能降低，而自由能是化学活性的量度。其次，从氧化还原方面来分析，该分子中既包含氧化态（COOH）的碳原子，也包含还原态（CH₃）的碳原子。COOH 有吸引电子的倾向，而 CH₃ 由于诱导效应有交出电子的倾向。这两个基团具有不同的极性，导致这样的结果：在水溶液中，COOH 表现出亲水性，而 CH₃ 呈现出疏水性。这种区别在形成蛋白质大分子的特殊结构中起着重要作用。再次，从化学键来看，该分子中既包含饱和键又包含不饱和键（C=O），既存在亲核中心又存在亲电中心。还有，中心碳原子是对称的，它可以形成左旋构型也可以形成右旋构型。化学家在实验室中可以合成数量相等的左旋化合物和右旋化合物，可是在生物体中只存在左旋化合物。最后，该分子具有复杂的化学动力学性质。氢离子可以从一个碳原子转移到另一个碳原子，或者投向氮原子，形成内盐。分子中的氢原子被分在两种基团上：一种处于 NH₂、COOH 基团中，另一种则处于 C—H 之中，后者中的氢原子可以形成分子内的氢键和分子间的氢键。

日丹诺夫对这个简单的氨基酸分子的结构特征所作的分析，意在说明，有机化合物分子内部存在着多种多样的对立的基团和矛盾性质，这些是无机化合物，即使是复杂的无机化合物不能与之相比的。简单的氨基酸分子尚且如此，比较复杂的色氨酸、核苷、叶酸、泛酸等分子所包含的结构特性则更为丰富，更不用说更为复杂的蛋白质和核酸等生物大分子了。这些分析表明，从无机化合物到有机化合物，从比较简单的有机化合物到比较复杂的有机化合物，再到生物大分子，体现了从简单到复杂、从低级到高级的进化序列。我们之所以说它们是进化序列，是因为它们的内在矛盾一步步丰富了、复杂了。这就是说，有机化合物比无机化合物的内在矛盾丰富、复杂，生物大分

参见日丹诺夫：《唯物辩证法和化学进化问题》，见（前苏联）《哲学问题》，1980年，第1期。

子的内在矛盾比简单的有机化合物分子的内在矛盾丰富、复杂。同时，正是分子的内在矛盾及其逐步复杂化，决定着分子的进化，决定着物质的化学进化。随着分子内部矛盾的复杂化，分子的功能变得复杂化，化学变化的可能性也随之增大，分子的活性增加，所有这些综合起来成为化学进化的标准。当然，在化学进化的同时，也存在化学退化现象，即分子内部矛盾的贫乏化，功能的简单化，化学变化可能性的降低等等。

徐光宪在综合现代化学、生物化学、天体化学等研究成果的基础上提出，化学进化分为四个阶段：第一阶段，化学元素的合成阶段；第二阶段，星际小分子的合成阶段，特别是甲烷(CH_4)、氢气(H_2)、水(H_2O)和氨(NH_3)等分子的合成；第三阶段，生物小分子的合成阶段；第四阶段，生物大分子的合成阶段。他指出，关于宇宙演化中从无生命到生命的飞跃是在什么样的环境中完成的问题，目前尚无定论，现代理论比较倾向于认为，在水陆交界处含金属离子的泥土可能是生物大分子合成的无机模板。

从实体结构观点研究进化，其实质是研究化合物分子的进化。正如上面已经表明的，在我们这个星球上的化合物的进化，大体上可以分成三个阶段：无机化合物、有机化合物、生物化学化合物。处于后一个阶段的化合物以前一个阶段的化合物为基础，在历史上是从前一个阶段的化合物成长和发展而来的，同时后一阶段的化合物又是进一步发展的基础。在化合物分子层次上所确立的进化观念，就其实质而言，是与生物学中自达尔文以来所确立的进化观念一致的。这种观念所指出的化学进化的方向，是从简单到复杂、从低级到高级的前进发展。

然而，如何从理论上说明化学进化不是热力学第二定律所指出的方向，而是生物进化论所描述的方向呢？具体地说，化合物分子的进化途径，从无机化合物到有机化合物，从不可数计的可能存在的有机化合物中产生出数目不多的具有生物化学特性的化合物，以及达到高度有序的形式，这一切是如何发生的呢？在这里，即在化学进化中，自然选择似乎同样起着重要的作用。化学元素的自然选择是确凿的科学事实，在已知的众多元素中，只有几种(如C、H、O、N、P、S)是构成有机体的主要元素，约占总量的97.4%；还有十几种元素(如Na、K、Ca、Mg等)次之，约占1.6%；还有二十余种元素约占1%，其他元素在有机体中含量甚微。化合物的选择也是客观的事实，在已知的几百万种化合物中，有机化合物约占96%而组成有机体的化合物为数不多。可是，仅仅提出自然选择，似乎仅仅承认了事实，并没有进一步说明事实。这个问题尚待进一步研究和回答。

第二，开放催化系统自发展理论

前苏联学者鲁金科提出，要研究和揭示化学进化的原因、动力和规律性，确立化学进化的物理化学基础，必须确定化学进化的特殊的物质客体。鲁金科通过化学进化和生物进化的比较研究指出，生物进化的客体是物种或种群，在物种概念基础上揭示了物种的起源和物种的进化规律性，建立了生物进化理论；可是，长期以来，在化学中始终没有能够提出和确立化学进化的客体，即类似于生物学中的物种那样的化学“物种”。化学进化的客体是

徐光宪：《辩证自然观与化学进化》，载《方法（自然辩证法研究）》，1983年，试1刊，第42—43页。

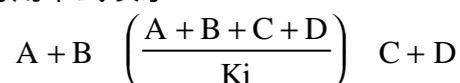
鲁金科：《化学进化的物理化学基础》，见《物理化学杂志》（前苏联），1983年，第7期。

什么呢？按照实体结构观点，化学进化的客体是化合物分子，而鲁金科基于对催化作用的研究提出，化学进化的客体应当是开放的催化系统。

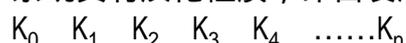
鲁金科提出，化学系统可分成四种类型：第一种，孤立（或称封闭）非催化系统；第二种，孤立（或称封闭）催化系统；第三种，开放的非催化系统；第四种，开放的催化系统。最后一种系统既是开放的又是催化的化学系统，应当是化学进化的客体。按照鲁金科的见解，开放的催化系统具有如下特征：系统与周围环境发生物质和能量交换，从而保持自身的存在；这种系统是一个相互关联着的物质和过程的动力学系统，具有动力学的自稳定性，具有自调节能力；系统对于外部条件变化具有反应和适应能力；系统中流逝着的各种过程具有充分的相互联系和相互制约性；等等。他认为在开放的催化系统中，存在着生物有机体大部分基本属性的原型，但是在这类系统中，这些属性尚未充分发达和充分显示出来，而在进化的一定阶段上得到加强和得到充分显示。

鲁金科研究了催化反应，在研究中他认识到，关于催化剂本性和活性在化学反应过程中的变化，对于研究作为催化系统自发展过程的化学进化，具有重大意义。正是基于对对这些问题的研究，他把化学进化看作是按照一定方式组织起来的化学系统的自发展，因此，这种理论称为开放的催化系统的自发展理论。

这种理论把开放的催化系统看作是整体性的、在功能方面不可分割的动力学系统，它是具有非平衡结构以及空时组织特性的化学反应系统。催化化学反应可用下式表示：



A、B 是反应物，C、D 是产物， K_i 为催化作用中心。如 K_i 的性质不发生变化，意味着催化作用能够重复发生。开放的催化系统作为统一的整体与外部环境发生相互作用，在发生相互作用时，可能发生不同的变化，而在一定条件下，系统具有演化性质，即自发展的性质，最简单的形式如下：



系统结构因素的变化是不可逆的，系统结构的变化伴随着系统动力学性质的变化，系统实现进化的变化，也就是从简单到复杂的发展。这种发展被分成两个阶段：最初的化学进化阶段和前生物进化阶段，越过第二阶段以后，开始了生物进化。

第三，超循环理论

艾根 (Eigen) 于 1971 年建立了超循环理论，该理论着重从生物信息起源的角度探讨生物大分子自组织过程和生命起源问题。艾根指出，在逻辑上应该把时间上并非完全割裂的进化划分成三个时期：前生物的“化学”时期，复制“个体”的自组织时期，个体物种的进化时期。如果我们将这三个时期与上面所说的两个阶段相对照，可以看出，鲁金科所说的化学进化的两个阶段大体上相应于这里说的前两个时期。可是，鲁金科和艾根研究的重点不同。鲁金科研究的重点是第一个时期，即前生物的“化学”时期，也就是我们所说的化学进化，艾根研究的重点则是后一个时期，即复制“个体”的自组织时期。艾根指出，对前生物的“化学”时期的任何详细讨论，都会超出他的论文《物质的自组织和生物大分子的进化》的范围，这篇论文主要关心的是第二个时期，而且研究所得结论是：生物大分子的建筑材料，即氨基酸，像

ATP 及其碱基同系物那样的高能核苷磷酸，以及许多其他“生物化学”化合物那样，能够在需要之处形成，并能够在前生物条件下即在涉及到各种能源利用的还原性大气中发生聚合。艾根指出，在这方面依然存在许多问题，可能还要一代化学家继续奔忙。*

超循环论中所说的超循环，就是循环的循环，确切地说，是催化循环的循环，催化循环又是反应循环的循环。因此，理解超循环，还得从反应循环入手。如果在一个反应序列中生成的产物与前一步的一个反应物相同，那么此系统类似一种反应循环，这个循环在整体上相当于一个催化剂。在最简单的情况下， $S \xrightarrow{E} P$ ，E 表示酶，S 代表底物（或一般地说代表反应物），P 代表产物。在反应中，E 与 S 形成 ES（酶—底物）和 EP，生成 P。从 S 到 P 的转变中，酶的催化作用等价于中间物的循环复原，E 又参加下一轮循环。

生物化学中的光合作用循环、三羧酸循环等，都是反应循环，它们在整体上都相当于一个自催化的催化剂。在反应循环中，系统是远离平衡态的、伴随有能量耗散的开放系统。

“如果以反应循环作为亚单元，这些亚单元循环地联系起来，构成了反应循环的循环，这就叫做催化循环。”在反应循环只要有一个中间产物是可以催化自己产生的催化剂，这个反应循环就成了催化循环。催化循环与反应循环相比较，是高一级的循环，它具有自复制能力。

再进一步，“如果以催化循环作为亚单元，这些亚单元通过功能的循环联系而连接起来，于是就构成了超循环。”超循环和催化循环都是循环的循环，催化循环是反应循环的循环，是比反应循环高一级的循环；超循环是催化循环的循环，是比催化循环高一级的循环。超循环组织作为一个整体已经具备了自我选择的能力，并且具有一些特殊性质，例如，超循环使得这个通过循环连接而联系起来的所有物种稳定地、受控地共存；作为一个整体，超循环具有自促进的生长性质，它允许它的所有成员相干地生长；在一定选择条件下，各个独立的超循环将为选择而竞争，非线性的选择结果，类似于“全有或全无”行为，一个超循环的选择，是一种“一旦建立起来则永存下去的结果。”*

超循环论试图将物理学普遍原理推广到生物学，并与生物学研究成果密切结合起来，超循环论利用现代科学成果，对分子自组织进化模型进行分析，试图说明构成生命的物质基础——核酸和蛋白质的关系，从生物信息起源的观点来看，是因果的相互作用的关系，是互为因果的循环。艾根指出：“要解决这种因果相互作用的难题，需要一种自组织理论，这种自组织理论可以应用于分子系统，或更准确地说，可以应用于特定环境条件下的特定分子系统。”这种分子自组织过程，包含了随机事件。问题在于，某些此类随机结果如何能够对其起源产生反馈，从而使它们自身成为某种放大作用的原因。在一定外部条件下，通过因果的多重相互作用包括自我复制和选择，一步步向高度有序的宏观组织进化。在这个意义上说，循环是进化的，从反应循环

M·艾根、P·舒斯特尔：《超循环论》，曾国屏等译，上海译文出版社，1990年版，第222—223页。

魏宏森、宋永华等编著：《开创复杂性研究的新学科》，四川教育出版社，1991年版，第361—362页。

魏宏森、宋永华等编著：《开创复杂性研究的新学科》，四川教育出版社，1991年版，第395页。

艾根，舒斯特尔：《超循环论》，曾国屏等译，上海译文出版社，1990年版。第21页。

到催化循环，进而从催化循环到超循环，构成了一个从低级到高级的循环组织，信息不断积累，功能不断完善，通过循环向高级组织发展。

四、几个哲学问题

关于化学中的变化和进化，在理论上提出了一些问题，下面仅从化学哲学的角度讨论以下三个问题：

1. 化学进化是化学问题吗

照理说，化学进化和生命起源问题，就其实质而论，应当是化学问题。因为，从物质运动形式的关系上看，生命诞生以前的物质运动是化学运动，化学运动形式是从无生命运动形式过渡到生命运动形式的中介和桥梁，因此，生命起源和化学进化，本应属于化学的最迫切、最现实的一个问题。可是，实际情形又是怎样的呢？正如在历史概述中所指出的，实际情形恰恰相反，化学进化和发展的思想不是在化学范围内产生，而是从化学与其他科学形成的边缘学科或交叉学科中逐渐产生和形成的，换句话说，化学进化问题是在化学发展的主流以外产生和形成的。化学进化问题在一个较长时期内没有引起化学家的足够重视，却引起了生物化学家、地球化学家、生物学家、地质学家、天文物理学家、宇宙化学家以及其他领域的科学家的关注。

原因何在？

鲁金科认为，这是因为长期以来在化学研究领域没有发现化学进化的客体，或者说，化学在还不认识自己的化学进化客体的情况下，也就不可能提出研究化学进化的任务。历史实际表明，化学进化是在其他研究领域，首先是生物化学研究领域认真加以研究的，因而逐步形成了关于化学进化的生物化学理论，形成了对于这个问题的现实主义方法。可是，这种理论和方法不适应化学研究的传统。化学作为精确科学，必须依据严格的实验资料和理论论证建立自己的理论，它不满意从现在向过去追溯。因此，鲁金科认为，化学要研究和解决化学进化问题，必须采用自然历史主义的观点和方法，以作用力和被观察到的结果之间的因果联系为基础，而这需要解决一个重要问题，这就是确定化学进化的客体，在此基础上，才能进一步探讨和说明化学进化的原因、动力、规律等一系列的问题，才能形成化学进化理论。

鲁金科还指出，生物进化论赖以建立的基础，是生物进化的客体，即物种和种群。生物学家对生物物种进行了长期的观察和研究，积累了生物物种的形态学的、分类学的有关资料，进而发现了物种的进化，研究了物种进化的原因、动力和机制，形成了生物进化理论。化学进化论的建立，似乎也应当确定化学“物种”，研究它们的形态，进而揭示它们的进化及其规律性。可是，化学“物种”不像生物物种那样易于观察和研究，因而，在一个较长时期内，没有注意对化学物种和化学进化问题的研究。鲁金科的上述观点，是有根据的，也是有启发的，但是，这种解释是不够的。

化学进化问题之所以处于化学发展的主流之外，主要是由化学本身的特点和化学进化问题的特点决定的。化学的特点在于，注重研究个别性，它不满足于研究一般的模型和规律，而要对每一种具体的化合物、具体的化学反应、具体的合成方法进行研究。在这种研究中，某种或几种试剂，单质或化合物，作为原料和反应物，是已知的，研究者的注意力集中在反应物的结构、性质、反应活性，反应物可能发生什么化学反应，生成什么产物等问题上。在化学家看来，产物是从反应物而来的，是由反应物发生的化学反应中产生的。至于反应物从何而来，化学家或者把它们作为既成的东西而不加过问，

或者把它们看作在其他化学反应中生成的。这就是说，化学家在研究具体的物质所发生的具体化学反应的时候，只研究变化，不研究也很难研究起源问题，因而也就不研究也很难研究进化问题。进化和起源是相关联的，有起源、有产生才有进化和发展，进化、发展是起源、产生的继续，它又导致新的起源和产生，没有起源，进化也就无从谈起，起源、产生是在进化、发展中树起的标杆，以标杆作为标准才能讨论进化和发展。生命的起源就是一种标杆、一种标准，或者说是一座碑石，一座里程碑。站在这个碑石上向前看，是生物进化的历史；向后看，是化学进化的过程，化学进化与生命起源相关联。正因如此，首先直接提出和研究化学进化的，是生物学或与生物学密切联系的生物化学，就不足为奇了。而在化学范围内，或者说，单纯在化学范围内，没有这种标杆、这种标准、这种碑石和里程碑，因此也就很难提出和研究进化问题。

化学进化问题的特点与化学研究的特点恰恰相反，它具有综合性。所谓综合性，一方面是指化学变化的总体，化学变化的综合，只有把各种各样的化学变化综合起来，从总体上加以观察，才有可能发现和揭示进化、发展的序列，因而才有可能产生进化、发展的观念，形成进化、发展的理论。如果只限于局部的、个别的、具体的化学变化，那么它可以由此达彼，也可以由彼达此，很难发现进化的线索。另一方面，所谓综合性，是指各个学科的总体，各个学科的综合，只有将各个学科联系起来、综合起来，突破某一门学科的局限，才有利于在现存事物中认识发展，从变化中认识进化。恩格斯从自然科学总体上，从各门科学所反映的物质运动形式的联系和转化上，揭示了化学进化与生命起源的关系，提出了化学进化的观点。生物化学家从化学与生物学相互联系和转化上，关心和研究具有生化功能的大分子，从而产生了化学进化的思想，推进了对化学进化问题的研究。如果只局限于化学这一门学科，映入化学家视野的只是形形色色的化学变化，而不是化学进化。

现代科学（包括化学）的发展，彻底改变了人们的认识方法和科学思想，进化、发展的观念逐渐地渗入了各门科学。由于对化学进化的客体和规律性的研究，在催化、生物无机化学和生物有机化学等领域研究工作的发展，在对生物体进行结构和功能模拟方面研究工作的进步，以及进化催化理论和一般化学进化理论的研究工作的展开，所有这一切，不仅提高了化学家对化学进化和生命起源问题的兴趣，而且在一定意义上可以说，开辟出一个化学的新领域，即进化化学。正如普里戈金把物理学分为存在的物理学和演化的物理学一样，我们同样可以把化学划分为存在的化学和演化的或进化的化学。存在的化学，也就是经典化学，主要研究具有平衡结构的物质的组成、结构、性质及其变化，演化的或进化的化学，主研究化学进化，或者如鲁金科所指出的，研究开放催化化学系统的性质和规律。从这个意义上说，存在的化学，主要研究化学变化，而演化的化学则主要研究进化。这就涉及化学变化和化学进化的关系。接下去我们就讨论这种关系。

2. 化学变化和化学进化的关系

化学变化，一般地说是物质分子转变为其他物质分子的过程。化学变化有三个显著特点：第一，化学变化是反应物的变化，确切地说是反应物分子的变化；第二，这种变化是通过“反应物——产物”的关系体现出来的；第三，反应物和产物的位置可以互换，或者在同一关系中，即同一反应中互换

(如何逆反应),或者在不同关系中,即不同反应中互换,在此反应中A是反应物,B是产物,在另一反应中A是产物,B是反应物。因此化学中研究变化时,仅仅研究“反应物——产物”的现存关系,既不必追溯反应物分子的过去,也不必询问产物分子的未来。

化学进化是在自然条件下所发生的向前发展的变化,是前进的变化,它的显著特点是不可逆性和方向性。化学进化也通过关系表现出来,但是这种关系不是“反应物——产物”的简单关系,而是“过去——现在——未来”的历史关系、发展关系。同时,这种关系应当是在自然条件下形成的关系,模拟是人为的,但模拟是以自然过程为原型的,而且模拟是为了了解自然过程。因此,研究化学进化不能像研究化学变化那样只就现状研究现状,而要从现状出发追溯过去,建立一定的模型探索物质分子在自然条件下的进化和发展。

化学变化和化学进化既有区别又有联系。化学变化是物质分子的质变,化学进化是有方向性的变化,是沿着从低级到高级,从简单到复杂、从无序到有序,从有序程度较低到有序程度较高的方向的变化。化学进化是通过化学变化实现的,离开了化学变化也就不可能实现化学进化。有理由认为,地球上(或宇宙间)的物质,是通过多种多样的化学变化而逐步从简单到复杂、从低级到高级的进化直至生命的产生。化学进化是从总体的、综合的观点观察的化学变化,化学变化则是从局部、分析的观点考察的化学进化。

化学变化的一般方程式所表示的,就每一具体变化过程而言,A B, A和B相比,很难说哪一个简单哪一个复杂,因而很难说A B是进化还是退化,只能说它们是化学变化。然而,通过自然选择的作用,从无机物分子到有机物分子,从有机小分子到有机大分子,进而到生物大分子,则显示出分子的进化序列和化学进化过程,这种进化序列和进化过程又是通过无限多样的化学变化逐步实现的。迄今为止,如何通过化学变化实现化学进化,仍然是个尚待深入研究的问题。

提出化学进化问题,或明或暗地以生命起源为标准。恩格斯在《自然辩证法》等著作中,就是以生命运动形式为标准提出了一个运动形式发展序列:机械运动形式 物理运动形式 化学运动形式 生命运动形式。在这个序列中,化学运动形式的发展方向指向生命的产生。由此可以引伸出一个问题:在化学运动范围内,如何判定简单和复杂、低级和高级,一句话,如何判定进化和发展?

首先讨论简单和复杂问题。从化学哲学文献来看,对于以什么标准判别简单和复杂,大体上有以下几种观点:

第一,组成和结构标准。组成的量和质表现为组成之间的相互作用性质,因此转化为结构要素及其关系,结构的基本要素包括相互作用的强度和数量以及相互作用形式——平面的或立体的。从这种观点看来,在元素(原子)层次上,从氢到铀以及铀后元素,核电荷数增加,电子壳层也逐渐复杂化;在分子层次上,从星际小分子到生物大分子,组成和结构的复杂程度提高。有些化学哲学文献把化学研究的物质分成原子层次、分子层次、超分子层次,大体上就是依据组成和结构标准划分的。

第二,反应能力标准。反应能力即化学活性,可以从质和量两个方面加以描述。质的描述或定性描述,不仅表现为直接获得的产物上,而且还表现为个别的最终产物上。这就是说,评定物质的化学活性,必须考虑它以后的

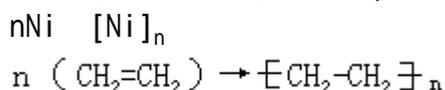
转化能力。从这个意义上说，反应活性表现为化学元素或化合物进一步发生反应的可能性，表现为进一步反应的潜力，甚至可以说表现为进化、发展的潜力。量的描述，表现为形成化学键的难易程度。如果依据这个标准考察化学元素的复杂性问题，就应当考虑两个因素：与其他元素发生相互作用的能力和形成多原子结构特别是形成长链、网状、立体结构的能力。从这个标准看，组成有机化合物的元素，首先是碳的反应能力要大大超过其他元素的反应能力。从物理构成物的观点看，铀原子比氢原子复杂，而从作为化学构成物的化学元素来看，化学元素的复杂性不总是正比于物理复杂性。也可以这样说，元素周期系所表示的元素的顺序，从物理构成物的观点看，复杂性是直线增加的，而从化学构成物的观点看，从氢到碳复杂性增加，而后再减小。许多文献特别关注碳元素，它不仅能够彼此相互连接，而且具有数量惊人的异构体。

第三，功能标准。功能是系统与外界环境相互作用中所表现出来的行为，就化学系统而言，化学功能是化学系统在与其它物质发生作用时表现出来的性质，它与反应能力有密切联系，但又不等同于反应能力。例如，某种物质分子在化学反应中表现为具有一定反应能力的试剂（反应物），当它与另一种物质分子发生反应时表现出特定的性质或功能。从功能标准看，物质分子的功能越多样，在化学反应中能够扮演的角色越多，也就越复杂。而它能够扮演什么角色，一般地说，取决于分子的结构，分子所具有的功能团的数量和性质。许多无机化合物或者是酸，或者是碱，它们具有单一的功能，有些无机化合物虽然具有两性，但在一类反应中主要呈现酸性，在另一类反应中主要呈现碱性。许多有机化合物，如上面所举的丙氨酸分子，具有不同功能的相容性，这是复杂性的重要标志。

第四，信息标准。一个系统的信息量增加表明复杂程度增加。有人提出分子信息量反映分子结构特性和分子的复杂程度。有机化合物产生的新特性是与它们自身存在和保持相对独立的功能团相联系的。

上述四种标准各有自己的优点和缺点，各有自己的适用范围。它们不是彼此孤立的，而是相互联系的，仅仅用某一个标准都很难解释全部化学事实。因此，有没有可能制订出一个综合的统一标准，是一个难题，也是尚待化学哲学研究的一个问题。

现在要问，化学中从简单到复杂，或者说复杂程度的提高，是否意味着从低级到高级的发展呢？例如，



无论从组成、结构方面看，还是从功能方面看，右边（产物）比左边（反应物）要复杂。然而能够由此说左边的物质比右边的物质低级，右边的物质比左边的物质高级吗？显然不能。这就表明，在化学中，简单和复杂的关系不能完全等同于低级和高级的关系。事实上，人们对化合物的分类，很少考虑历史因素，只是把它们按照不同类别并列起来。例如，把化合物分成无机化合物和有机化合物，把无机化合物分成酸、碱、盐，把有机化合物分成烃、醇、酸、醚等。

在化学主要研究化学变化的条件下，是没有也不可能从进化、发展的角度解决分类问题的。长期以来，化学既不了解或不重视地质学中的现实主义的方法论，也不了解或不重视生物学中的进化学说和方法论。正如前面说过

的，只有当化学研究以生命起源作为标准和碑石的时候，才能引入进化、发展的观点，将历史主义作为方法论。现在的问题是，如何以生命起源作为标准，在化学领域具体地贯彻自然历史主义的方法论，其中包括在化学研究的物质对象的分类中体现化学进化的观点，仍然是个悬而未决的问题。

如何对化合物进行分类，实际上存在着两种相互对立的观点。一种观点认为，对于化合物不能采用生物学的分类原则进行分类。从林奈时代开始，在动物和植物物种之间已发现了有序的等级关系，而要在化学研究的客体——化合物——中间发现这种进化顺序的一切尝试都没有获得具体结果。依据这种观点，“发展的原则（发生学的分类方法）在化学中是不适用的，或者说至少是为时尚早的”。另一种观点则认为，发展的原则在化学中同样是适用的，至少在化合物分类中可以体现出发展的系列。例如，黄衡平在《论化学物质的进化和化学物质的层次分类》一文中，根据耗散结构理论，将化学物质的进化分为三个阶段：分子个体，分子简单聚集态，分子复杂聚集态。每个阶段之中又分成若干小层次，如分子个体分成无键分子，共价键分子和配位键分子。从无键分子进化、演变成原子间的相互作用，形成共价键分子。共价键分子是原子与原子的相互作用，由此进化、演变成原子与分子间的相互作用，发展为配位键的组织形式。分子个体从无序向有序进化形成同种分子的简单聚集态。下一个阶段则是复杂聚集态，最后是以 DNA 和 RNA 为代表的大分子胶体，DNA、RNA 是最复杂最高级的化学物质，同时也是最简单、最低级的生命物质，在这里化学物质的性质已升级为生命物质的功能。论文把多种多样的化学物质作了系统的分类，体现了化学物质的进化，具有重要的理论意义。当然，这种分类也仍有一些问题需要进一步探讨，如简单聚集态到复杂聚集态如何过渡，上述物质的进化顺序是否与自然过程相符合等。

3. 方法论问题

关于物质的化学进化问题，看来有两种研究方向：一个方向是从现实已知的化学物质出发，依据一定的理论原理探索它们之间的进化、发展的序列；另一个方向则是借助于现代科学的各种成果（如物理学、天文学、地质学、化学等），尽可能描述自然界物质的演化过程。在这种描述中，现今已知的化学物质至多只能作为参考。因此，有人提出，研究化学进化，在方法论上，存在着两种可能的、相互对立的观点，即所谓现实主义观点和自然历史观点。

所谓现实主义观点，就是从生物学方面已经存在的生物及其已知特性出发，追溯过去某个时候在地球上所发生的化学进化，也就是说，依据“研究现在是认识过去的钥匙”的原则，基于化学进化的具体结果探讨生命起源问题。关于化学进化的实体结构理论和超循环论在方法论上都具有现实主义观点的特征。实体结构理论所赖以建立的基础是分子的进化，或者是团聚体等超分子组织的进化。与这种理论相联系，提出了对生命起源进行模拟实验的课题，如著名的米勒的模拟实验。这类实验表明，具有生物化学功能的一切分子组成物，诸如氨基酸、卟啉等，都很容易从最简单的物质（如甲烷、水、氨等）用非生物方法进行合成。这类实验，就其科学思想而言，是从现在已知的构

彼特连科主编：《自然的辩证法》，东方出版社，1990年版，第62—63页。

见《科学技术与辩证法》，1992年第6期，第10—13页。

索洛波夫等：《化学与世界观》（俄文），科学出版社，1986年第268—275页。

成生物组织的生物大分子的组成和结构，追溯过去，用模拟实验的方法实现在原始地球条件下生物大分子的产生过程。这类实验证明，从无机化合物和简单有机化合物合成生物大分子是可能的，从而说明了在化学规律作用下分子的生物化学进化。可是，这类实验只能从现存的事实向过去追溯这一步，至于在这一步以前和以后的情形，人们仍然难以实际地把握。超循环理论也是从现存中追踪历史的遗迹，逻辑地再现历史。无论是实体结构理论还是超循环信息理论，都涉及分子结构，前者从结构的复杂程度上表现化学进化，后者从结构的信息意义上说明化学进化。应用现实主义观点研究生命起源和化学进化问题，其前提是假定起作用的规律不随时间而发生变化，对物理学和化学规律而言，是正确的，对生命起源和化学进化来说，是尚有疑问的。

所谓自然历史观点，按照鲁金科的意见，是把开放催化系统视为化学进化的客体，把这种客体的自发展、自组织和自复杂化看成从简单形式发展到生命有机体的过程。从研究这种客体的性质、存在和发展条件，物理学和化学规律（包括化学进化）入手，探讨和揭示化学进化的原因、动力和基本规律等等，以揭示生命的起源。自然历史观点，原则上不可能把对化学进化最佳结果的研究、已知生物的分子基础和生物化学功能等等作为理论赖以建立的基础，它本身可以对现代生物有机体的物质组成的特点和生物化学功能以及生命的起源和实质等问题提供论证和说明，自然历史观点似乎开辟了解决化学进化问题的纯化学解释的道路。

现实主义观点着眼于分子的结构和信息，自然历史观点着眼于系统的功能，这两种观点以及现在提出的各种理论，尽管着眼点可能不同，对一些问题的具体解释也不同，但是在内容和实质上具有互相补充的性质。两种方法论观点，一个从现在去追溯过去，一个从过去推演现在。两者不仅互相补充，而且是相互渗透的。从现在追溯过去，同时包含着从过去解释现在的成分，从过去推演现在，也不能不考虑现状、不能脱离现在。三种主要理论，分别从结构、功能和信息的角度探讨生命起源，这些理论研究都对生命起源问题的解决作出了积极贡献，同时也都存在着问题，从综合的观点看，迄今关于生命起源和化学进化，仍有一些谜尚未完全解开，有待人们进一步研究和探索。

第四章 化学中的空间和时间

空间和时间是物质存在的基本形式，空间和本质的本质是物质的运动。列宁曾经指出，世界上除了运动着的物质什么也没有，而物质只有在空间和时间之内才能运动。化学是研究物质分子及其变化的科学，化学所研究的物质分子及其变化与空间、时间有什么关系，化学中的空间和时间概念有什么特点，这些正是本章所要讨论的问题。

一、化学中的空间观念

1. 化学中空间观念的形成和发展

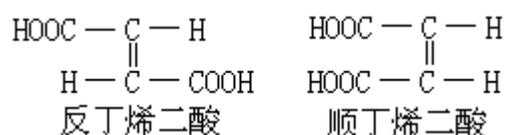
早在近代化学发展的初期，体积就成了化学中的一个重要概念，体积测量在化学研究中起了重要作用。法国人杰奥索瓦于 1729 年用纯碳酸钾测定乙酸的浓度，1786 年，德克劳西 (De-scroizilles) 确立了体积量度原则，在此基础上，逐渐形成和发展了容量分析。在容量分析中，需要测量某种试剂的消耗量，或者是称量重量，或者是量度体积。重量和体积成为定量测定工作的基础。重量测定，推动了对物质组成的认识的发展，逐步总结出关于物质组成方面的定律，如定组成定律、当量定律等。体积测量，推进了对气体物质反应的研究。1808 年，德国化学家盖吕萨克通过对各种气体物质反应中的体积关系的研究得出了气体反应的体积定律：各种气体在彼此起化学作用时常以简单的体积比相结合。体积是空间的一种形式，可以说是空间的外部形式，类似于牛顿的空间。

19 世纪上半期，在继续研究物质组成的同时和认识组成的基础上，化学家们很自然地关注化合物中的各种成分（即组成）之间的关系，由此产生了结构思想，形成了结构理论，进而发展了化学空间观念，使空间因素成为化学理论的不可分离的组成要素。化学中空间观念大体上是沿着三个方向发展的。第一个方向，通过对有机化合物的研究产生了有机化学结构理论，产生了空间化学。杜马 (Dumas) 于 1839 年提出了原子排列的思想，1843 年日拉尔提出了“同系列”的概念。前者，即杜马提出的“原子排列”，实质上是分子的结构问题，分子中原子的排列、次序，是原子之间内部的关系，是原子之间共存的序列、并存的秩序，这已经是空间的一种形式了。不过，在这种观念中，把空间特点抽象掉了，只剩下了平面上的次序、位置关系，实质上是把这种次序和位置看作是质点在平面上的次序和位置。后者，即日拉尔提出的“同系列”，是化学组成式相同分子式不同的化合物系列，实质上是不同化合物所组成的系列，是分子之间的外部关系，并存的序列和秩序，也具有空间的意义。从 1823 年开始，陆续发现了一些组成相同而性质不同的化合物，贝齐里乌斯称之为“相同部分的物质” (Isomerism)，后来，建立了分子结构的概念，“相同部分的物质”被译成“同分异构”现象。化学结构，在一段时间里，虽然都用平面的化学结构式来表示，但是，无论是凯库勒还是布特列洛夫，都把化学结构看成是由原子按一定次序构成的相互作用的整体。不过，凯库勒着重从分子的式样和形状方面去理解，把结构看作一座建筑，布特列洛夫则着重从分子内原子之间相互作用方面去理解，把结构看成原子按一定次序的化学结合。式样、形状、化学结合，都具有空间特性，都是空间的表现形式。

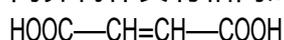
1848 年，巴斯德 (Pasteur) 从研究酒石酸盐的结晶中发现，酒石酸盐都表现出半晶面，而且都向着同一个方向，葡萄酸盐的半晶面有的向右有的向左。他还将这种现象与旋光性联系起来。1873 年，威利森努斯 (Wislicenus) 在研究发酵乳酸和肌肉乳酸中发现，二者的分子在结构上是等同的，可是具有不同的性质，他认为这种差别在于原子在空间有不同的排

布。在这些研究和发现的基础上，范特霍夫 (Van ' t Hoff) 于 1874 年发表研究成果，把化学结构式推广到空间，提出了碳原子四面体构型，使化学结构式从平面的发展为立体的，在化学中第一次确立了真正的立体“空间”观念。与此同时，勒贝尔 (Lebel) 也提出了类似的思想。

范特霍夫推断，如果由双键结合起来的两个碳原子上的取代基互不相同，由于双键不能旋转，这些取代基将有两种空间排布形式。例如，丁烯二酸在由双键联结起来的两个碳原子上，分别各有一个 COOH 和一个 H，它们可有两种排布方式：



这两种不同异构体具有相同的结构式，即



这种异构与旋光性无关，仅仅与碳原子的四面体构型相联系，在化学史上曾被称为几何异构。几何异构也反映了化学结构中的空间特性。

19 世纪末 20 世纪初，化学家们结合碳的四面体构型研究环烷结构时意识到，C—C 之间的价键在不同的环中会发生一定的扭曲，由于单键的扭曲使同一构型分子产生不同的形象。1929 年，英国化学家哈沃斯 (Haworth) 提出了构象概念。所谓构象，从化学的观点看，就是由于单键旋转改变了原子或原子团在空间的相对位置而呈现出不同的立体形象；从空间特性的观点来说，就是可动的构型，或者说是可动的空间形象。

第二个方向，通过对无机化合物的研究，分化出一门独立的研究领域，即配位化学，产生了配位化合物的空间结构理论。早在 18 世纪，人们在研究铁、钴、铬、铂等化合物与氨的作用时，就已经发现了一些复杂的化合物，它们的性质很难用已知的原子价理论作出令人满意的解释。于是，关于这类化合物的结构理论相继问世。1893 年，维尔纳 (Werner) 提出了配位理论。他认为，金属原子有两种化合价，一种是正价，与负离子相结合，另一种是副价，又称配位数，每种金属均有固定数目的副价，由负离子或中性分子来满足。副价有方向性，依据配位数不同，有不同的情况，如副价等于 6 时，指向正八面体的六个角，即为八面体构型；副价等于 4 时，可产生两种构型，一种情况指向正方形的四个角，即形成正方形结构，另一种情况指向四面体的四个角，也就是形成四面体构型。维尔纳的理论实质上也是空间化学理论。如果说前述的范特霍夫和勒贝尔的理论，是有机化合物的空间化学理论，那么维尔纳的理论可以说是无机化合物，确切地说是配位化合物的空间化学理论。

第三个研究方向，通过对晶体的观察和研究，形成了晶体结构理论，建立了晶体空间观念。对晶体研究是与矿物的利用分不开的，对晶体外形的观察，是从晶面开始的。17 世纪，斯登诺 (Steno) 研究了石英晶体的各种断面，发现各种断面的形状、大小尽管不同，但它们对立晶面的夹角是相等的。从外晶体断面研究，逐步发展到对晶体内部结构的探索。17 世纪末，已经有人提出了晶体是由具有一定形状的物质质点堆积而成的思想，后来形成了晶体点阵结构理论。1842 年，德国人弗兰根海姆 (Frankenheim) 提出，晶体是以点为结构单位，在三度空间周期性重复排列而形成的。19 世纪末，费多罗夫、巴洛 (Barlow)、熊夫利斯 (Shoenflies) 等人，各自独立地推进了

晶体结构的几何理论的发展。晶体结构理论表明，晶体具有空间结构，晶体本身与空间是密不可分的。

上述三个研究方向或者说三个研究领域，从认识过程来看，都有一个从平面到立体、从排列次序到空间样式的发展过程。这说明，化学中的空间是客观的真实空间，它是化学所研究的物质结构及其性质的不可分离的因素。正因如此，无论在哪一个研究领域或研究方向，随着研究和认识的深入，都或迟或早地接近和揭示出空间特性。

现代，在量子化学理论中，分子的几何性质也占有重要地位，量子化学计算中不能不考虑分子的空间特征，它涉及分子的几何形状以及与其相关的一系列性质的变化。如果说经典化学中，主要研究了静态空间性质，那么在现代化学中，在这种研究的同时，也注意研究动态的空间性质。

化学中的空间特性与物质分子的结构、性质和化学变化密切相关，研究化学中空间特性不能脱离物质分子的结构、性质和化学反应。下面，分别从空间结构，空间和性质、反应等关系说明化学中的空间特性及其意义

2. 化学中的空间与结构

在化学发展的历史上，正如前面讲过的，首先认识的是物质的化学组成，继之认识物质的化学结构。化学组成，在一种情况下，指的是化合物的组成，也就是化合物的成分，在另一种情况下，指的则是化合物的构成，也就是化合物是怎样组织起来的。在组成和结构关系上说的组成，是指化合物的成分。化学组成是化学结构的基础，化学结构又不等于组成，超出了组成，它以组成为基础进而指出了组成之间的相互作用和相互关系。因此，总起来说，化学结构包含三个基本因素：一是组成，二是组成之间的化学相互作用，三是组成之间的关系。

组成之间的化学相互作用形成化合价和化学键，或简称价键。价键可以从质和量两个方面来描述，或者说，价键具有质的特征和量的特征。质的方面，如价键的性质、类型，现代化学研究了离子键、共价键、金属键、配位键、氢键等，它们形成的原因各不相同，性质也不同，分属于不同的键型。量的方面，表现为数目和能量。数目，即价键数，如元素的原子在化合物中的价数，原子之间形成的单键、双键和三键等；能量，即键能，以形成化学键时释放出的能量或化学键断裂时吸收的能量来表征，键能是化学键强度的表征，也就是化学结合强度的表征，或者说是化合物中各成分之间化学相互作用强度的表征。

化学组成之间的关系，指的是化合物中各组成成分之间的相对位置、排列次序、空间分布，严格地说，相对位置和排列次序，都是在一定空间中形成的。化学组成之间的关系使化合物或物质分子具有一定样式，成为整体性建筑，表现出一定形象。

综合化学组成之间的相互作用和关系这两个方面，应当把化学结构理解为相互作用着的物质粒子（原子、离子、原子团等）按一定规律构成的具有一定稳定性的空间组织。

刚刚说过，结构以组成为基础，结构又超出了组成，在组成基础上增加了新的内容，这就是组成之间的相互作用和相互关系。因此，对于化学结构，一方面可以着重从化学相互作用方面去探索，由此形成化学键理论或化合价理论。有些化学著作，如墨雷尔等人写的《原子价理论》，特迈尔、富勒斯

合著的《原子价与分子结构》，杜瓦著的《有机化学分子轨道理论》等等，都主要是从化学键（即化学相互作用）的角度去阐明分子的结构及其性质；另一方面，也可以着重从分子空间形式方面（即组成之间的相互关系所形成的样式、形象）去研究，由此形成了立体化学理论、结晶化学理论等。有些化学著作，如林斯顿的《立体化学入门》，中国科技大学高分子物理教研室编著的《高聚物的结构与性能》等，主要是从物质分子的空间形象方面阐述分子的结构。应当指出，上述两个方面是紧密联系在一起，是同一个问题（化学结构）的两个不同侧面（化学相互作用和空间样式）。正因如此，着重从化学相互作用方面研究化学结构的时候，必然要涉及化学结构的空间形象，着重从分子的空间形象去探索分子的化学结构的时候，必然要涉及分子中原子之间的化学相互作用，涉及化学键问题。

基于这种分析可以进一步指出，分子的式样、形象，或者说物质分子中各种成分之间的相互关系，表现为空间形式。因此，化学结构中包含着空间因素，化学结构总要以一定的、具体的空间形式而存在、而表现，离开了空间形式，也就没有形象、样式可言，也就谈不到化学结构，换句话说，脱离开一定空间形式的化学结构，是抽象的化学结构，在现实中是不存在的，也不可能存在的。因此，我们有根据说，化学中的空间，首先表现为与分子的化学结构结合在一起的空间，是化学结构的存在形式。

化学结构的两个方面，我们现在可以称之为化学组成之间的相互作用和空间形式，是紧密结合在一起的，谁也离不开谁。前一个方面即组成之间的相互作用是化学结构的本质，是化学结构的内在因素，是形成化学结构的内在根据，是化学结构的实质性内容；后一个方面即空间形式，是组成之间相互作用的存在形式和表现形式。内容决定形式，形式表现内容。具体地说，化学键决定结构的空間形式，结构的空間形式表现化学键的性质。同时，形式又具有相对独立性，形式可以反作用于内容、影响内容。让我们进一步讨论这两个方面的关系及其辩证性质。

我们知道，由组成分子的原子粒子（原子、离子及原子团等）形成的分子的化学结构，表现为空间结构，这种结构由原子核的相互配置、核间距和键角等来决定。在绝对零度以上，分子中存在着原子核的振动和分子组成部分围绕键（单键）的转动，从而应当具有无限多样的几何结构。例如，在乙烷分子或二氯乙烷分子中， CH_3 或 CH_2Cl 可围绕 $\text{C}-\text{C}$ 键旋转，1938年皮兹（Pitzer）通过计算发现，在这类分子中也存在一定的能垒，对 $\text{C}-\text{C}$ 键的旋转产生一定的阻力，由于能垒不高，常温下旋转可形成许多构象，只有偏离正常键角的张力最低因而能量也最低的构象是稳定的。相反，偏离正常键角的张力最高的构象，是能量最高的构象，它是不稳定的。乙烷或二氯乙烷有两种极限构象：全交叉型构象和全重叠型构象。前者，两个碳原子上的氢原子之间的距离最近，后者，两个碳原子上的氢原子之间的距离最远。这两种构象是同一种分子的空间形式，它们的稳定性受 $\text{C}-\text{C}$ 之间键的能量和键角所制约。这个例子说明，分子的空间形式决定于化学键的能量和键角，决定于原子之间的相互作用，归根到底决定于电子结构。反过来说，分子的电子结构，分子中的化学相互作用的情形，只有通过它们的空间形式（在这个例子上就是不同的构象）才得以表现出来。

按照现代理论，分子的电子结构取决于分子中相互成键和不成键的电子云分布的对称性。对于分子的电子结构可分别用价键理论和分子轨道理论来讨论。在价键理论中，运用轨道杂化概念可以很好地描述分子的几何形象，例如， sp 杂化形成线型分子，如 C_2H_2 , $HgCl_2$ 等； sp_2 杂化形成三角形分子（如 $SnCl_2$ ）和平面形分子（如 C_2H_4 , BF_3 ）， sp^3 杂化形成四面体形（如 CH_4 , $TiCl_4$ ）、八面体形（如 NH_3 ）和三角形分子（ H_2O ）。分子轨道理论同样也可以很好地说明分子结构的几何形象。这些都表明，分子的几何结构和电子结构彼此是紧密联系的。

在配位化合物的结构中，在中心离子周围有一定数目的配体，配体的数目即配位数取决于两个因素：一个是成键分子因素，另一个是几何因素。例如，在 $[AlF_6]^{3-}$ 中，中心离子取 sp^3d^2 杂化轨道，配位数等于 6，形成八面体构型，而 $[AlCl_4]^-$ 和 $[AlBr_4]^-$ 中，中心离子为 sp^3 杂化轨道，配位数等于 4，形成四面体构型。以 $[AlCl_4]^-$ 为例，中心离子与配体之间发生相互作用，形成化学键，这是电子因素，或者确切地说是配位化合物的电子结构，它决定着配位化合物的结构和形象，即决定了它的几何结构，同时，该化合物的几何结构又反映了它的成键情况。还应指出，同一中心离子（如 Al^{3+} ）与结构相似、电荷也相等的卤族元素的离子 F^- 、 Cl^- 、 Br^- 之间，都具有不同的配位数，这是由配体 F^- 、 Cl^- 、 Br^- 半径不同所决定的， F^- 的半径为 1.36 \AA ， Cl^- 半径为 1.81 \AA ， Br^- 半径为 1.91 \AA ，在中心离子 Al^{3+} 周围能够容纳 6 个 F^- 或 4 个 Cl^- 或 4 个 Br^- ，若要在 Al^{3+} 周围放上 6 个 Cl^- 或 Br^- ，就不能形成最紧密的堆积。在这里，中心离子和配体的尺寸（实质上是空间尺寸）对成键状况和配位数产生了影响，也就是说，空间因素对电子相互作用以及结构产生了影响。

固体物质，按照原子排列的有序程度可分为晶态固体和非晶态固体。晶态固体又可按照化学键的类型分为离子晶体、共价晶体、金属晶体、分子晶体等。离子晶体是由正、负离子构成的，它们之间的化学键是离子键，实质上是正、负离子之间的静电作用。共价晶体是由原子构成的，它们之间的化学键是共价键，实质上是由相邻原子电子云的重叠而形成的，或者通过共用电子对而形成的，共价键有方向性和饱和性，决定了原子之间结合的方位和配位数。金属晶体是由金属原子构成的，金属原子部分地失去的电子形成的电子云或电子气，形成金属键。分子晶体是由分子构成的，它们之间的作用力是分子力，即范德华力，实质上是分子偶极之间的作用力。这些晶体构成的基本要素包括：晶体的基本结构单元（离子、原子、分子）；结构单元之间的相互作用（离子键、共价键、金属键、分子力）；结构单元通过相互作用紧密堆积地排列成点阵结构。基本结构单元是晶体的基本组成，除此之外，所谓晶体结构，正如一般所说的化学结构一样，主要有两种含义，一是指基本结构单元之间的相互作用，二是指密堆积的点阵结构。在研究晶体点阵结构时，一般把离子或原子想像成硬圆球，它们之间的相互作用迫使离子或原子尽可能地相互靠近，尽可能地占有最小空间，也就是说成为密堆积或最紧密排列。密堆积是因为存在相互作用而产生的，密堆积的具体形式则取决于空间几何因素，也就是离子或原子大小以及它们的半径比。在这个意义上可以说，空间因素（几何因素）是决定晶体结构的主要因素。这说明，在晶体结构中，相互作用和几何因素之间存在着密切关系，相互作用引起密堆积，

几何因素决定密堆积的形式，从而决定晶体具体形象。如果没有相互作用，晶体结构单元之间不会相互靠近，形成密堆积，如果不考虑几何因素（离子或原子的空间尺寸和半径比）也就不能说明形成怎样的密堆积形状，因而也就不能说明晶体的结构形式或晶体形象。

应当指出，基本结构单元按照一定点阵结构形成的完整的理想化的晶体，在自然界中是不存在的，人工也是无法制取的，而实际存在和人工获得的晶体都是偏离理想晶体的。因此，晶体的缺陷成为固体化学的中心问题。晶体缺陷，可分为点缺陷、线缺陷、面缺陷、体缺陷。现代固体化学主要研究点缺陷。点缺陷是由于晶体点阵结构中发生位置上空位和杂原子的掺入、位错等造成的。在一定条件下（如晶体中组成元素电负性彼此相差不大或杂原子的电负性介于它们之间），决定杂原子进入晶体的主要因素是原子的大小和几何因素，即体积效应。这说明，对实际晶体结构的研究，不能不考虑空间因素。

总结上述可以得出结论，化学中的结构被看成是有一定样式和形象的，是在空间中存在的，化学的空间是沿着结构的基本单元之间相互作用（化学键）而展开的，是有指向性的，是与化学结构结合在一起的。化学中的空间首先是一种结构性空间，它是化学结构的存在和表现形式。化学中的空间和相互作用一起，决定了结构的存在和结构的具体形象。从这个观点来看，化学中的空间是和物质（基本结构单元）及其相互作用密切结合在一起的空间，脱离物质基本结构单元及其相互作用，就没有化学中空间。换句话说，化学中的空间是物质及其相互作用的存在形式。化学结构中的空间是静态的空间，是静态立体化学中研究的空间，同时，这种空间又具有可动性（如构象）。因此，化学结构空间具有稳定性，又具有可动性，是稳定性和可动性的统一。

我们反复讨论了化学结构的两个方面的关系。化学结构中包含的两个方面，即化学相互作用和空间形式，可以分别归结为化学键和空间效应。所谓空间效应，就是原子或原子团的几何大小对化学现象产生的影响。长期以来，对这两个方面的研究，发展是不平衡的。对化学键的研究已经达到了定量水平，已经形成了系统性理论；对空间效应的研究，长期处于定性阶段，没有形成系统性理论。20世纪80年以后，才获得了比较迅速的发展，取得了一定的成果。我国科学家对空间效应研究的发展作出了重要的贡献，处于国际上的领先地位。我国科学家提出了“堆积模型”，发现了“堆积饱和规律”和“堆积均匀规律”，从静态堆积发展到动态堆积。

“堆积模型的基本思想是在化学键作用下把成键的原子或原子团等效为圆锥形、球形或者形状更复杂的积木，再用积木的排列、组合、变形等运动来解释各种结构和化学现象。”应用堆积模型的方法，对大量已知的结构进行统计，揭示了配合物空间堆积的“堆积饱和规律”和“堆积均匀规律”。这两条规律的意义是：稳定配合物中与中心离子成键的配位体立体角系数之和恒定在一个区域内，误差小于一个配位体的立体角系数；这些配位体立体角系数的矢量和总是趋近于零。利用这两条规律，可以解释许多化学现象。例如，根据配位体的几何大小，利用堆积模型按照堆积规律对稀土和铜系元素 MA_3B 型分子结构的键角进行计算，误差很小，这说明几何大小是决定分子

构型的主要原因，至少对于弱配位场分子来说是这样。依据堆积饱和规律和堆积均匀规律还可以对异常结构进行解释，这里说的异常结构，指的是不符合正常价键规律的分子结构，如有些配位化合物中心离子与配体成键，其键长远远大于两者离子半径之和。对这类结构应当如何解释？比较合理的解释是由于周围环境所形成的空缺小于配位原子，使金属离子与配位原子或离子之间造成非接触型堆积，不能生成正常化学键。这里说的正常化学键，应当是阳离子与阴离子之间的键长等于两个离子半径之和。

对结构的空位效应的研究，尽管仍处于基础研究阶段，但是，这种研究及其已经取得的成果表明，空间不仅是结构的具体存在形式，而且是结构的一个基本因素。研究物质的结构不能不研究与它密切联系或者说紧密结合的空间因素。正如已经指出过的，任何物质的分子，都是由化学键将组成分子的成分结合在一起而组成的，这一点无可置疑；在此基础上还应当强调，任何物质的分子，作为一种有结构的整体，都是一个复杂体系，是一座建筑物。仅仅从化学键的角度研究分子，实质上只能解决比较简单的体系，只能提供一种比较抽象化的图景，只有将化学键和空间因素结合起来，才有利于解决比较复杂的体系，提供一种比较具体的、更与实际符合的图景。因此，现代化学在进一步深入地研究化学键理论的同时，越来越重视对空位效应的研究。

3. 化学中的空间与性质和反应

性质是具有特定组成和结构的物体所具有的特性，这种特性要在与他物体相互关系中才能显现出来。性质具有多样性，在化学范围内研究的性质，有物理性质和化学性质。物理性质如质量、能量、颜色、熔点、沸点、溶解度、旋光性质，物态及其随温度和压力的变化等，是物质本身所固有的一般性质。化学性质，包括化学活性或反应性能，反应过程，等等，是在化学变化或化学反应中表现出来的性质。

立体化学研究表明，物质的物理性质与空间有着密切的联系。例如，两个或两个以上的化合物，当它们的结构的区别仅仅在于原子的空间配置不同时，它们就互为立体异构体。立体异构体分为对映体（即对映异构体）和非对映体。对映体是两个互为镜像但不能重合的化合物，它们的旋光能力相同，方向相反，在手性溶剂中溶解度有差异。这与立体异构中所表现出来的空间形象密切相关。

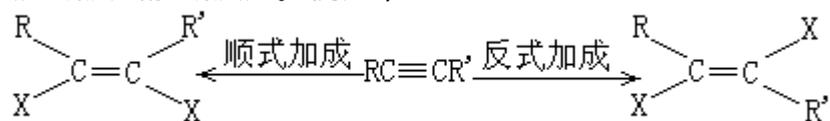
物质的化学结构的变化必然引起物质的化学性质的改变，物质的化学结构和性质的变化，就是化学反应，对化学反应机理和化学反应原因的研究，涉及与空间的关系，在化学文献中，被称为反应过程中的立体化学。

立体化学研究发现，“当反应物或反应产物存在立体异构现象时，反应过程的立体化学性质表现出特殊的重要性”。反应过程的立体化学，涉及动态的化学空间，而前面论述的化学结构中的立体化学，主要涉及静态的化学空间。反应过程的立体化学，实质上是研究空间因素对化学反应所产生的影响。

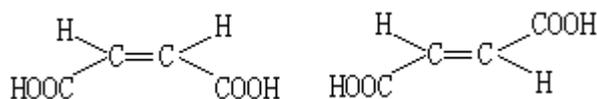
烯、炔烃的许多重要加成反应具体历程不同，从空间特性方面看，只有

F.D.甘斯顿：《立体化学入门》，陈良译，梁木熏校，化学工业出版社，1982年版，第86页。这一节的叙述主要参考本书反应过程中的化学部分。

两种可能的途径：两个基团加成在不饱和键的同侧或者是异侧，由此形成顺式加成反应或反式加成反应。例如，



这个式子表明了反应物和产物之间的关系，左边，顺式加成得到顺式异构体；右边，反式加成得到反式异构体。顺、反异构体是两种不同的化合物。如果 R 与 R₁ 均为 H，X 为 HO₂C，那么，就得到如下两个化合物：



左边是马来酸的结构式，右边是富马酸的结构式。马来酸易失水生成酸酐，富马酸则不易失水生成酸酐，而且它所生成的酸酐不是富马酸的酸酐而是马来酸的酸酐，也就是说，当它发生水合作用时，得到的不再是富马酸而是马来酸了。反式加成和顺式加成，在空间特性上是两种互相对立的加成方式，但它们之间在一定条件下可以互相转化。例如，溴化反应通常是反式加成，而羟基化反应，依据选择的试剂不同，可能是顺式加成，也可能是反式加成，如用过氧酸羟基化是反式加成，用高锰酸钾或四氧化锇羟基化是顺式加成。反应后，经过构型转化，反式加成可转化为顺式加成，顺式加成也可以转化为反式加成，现在已经知道，构型转化是个规律。

对有机化学反应的研究发现，链型共轭体系（如丁二烯），当它的两个尾端碳原子之间电子发生环化，形成单键的单分子反应及其逆反应即电环化反应，在加热或光照的作用下，得到不同的立体异构物。理论研究表明，这种反应有对旋和顺旋两种情况。对旋，即一个尾端原子按顺时针方向旋转，另一个尾端原子按逆时针方向旋转；顺旋，则是两尾端原子都按同一方向旋转，或都按顺时针方向旋转，或都按逆时针方向旋转。分子轨道对称守恒原理指出，反应物和产物的分子轨道对称性相合反应易于发生，不相合时难于发生。对环加成反应来说，在对旋过程中，基态分子轨道对称性不相合。因而加热时反应难于发生，光照时发生电子激发，使分子轨道对称性相合，反应容易进行，因而得到对旋产物；在顺旋过程中，反应物和产物的分子轨道对称性相合，因而加热时反应易于发生，得到顺旋产物。

两个共轭体系分子的端基碳原子彼此头尾相接形成两个键而发生环化，这是一个双分子反应，也叫环加成反应。环加成反应也涉及分子轨道对称性。环加成反应有同面、异面两种过程。同面过程，生成键或断裂键位于反应体系同一面；异面过程，生成键或断裂键位于反应体系不同面。分子轨道对称守恒原理指出，两个反应分子中共轭碳原子数之和为 4 的整倍数时，在加热条件下，反应按异面过程进行；在光照下，反应按同面过程发生。当共轭碳原子数之和为非 4 整倍数的偶数时，在加热条件下；反应按同面过程发生；在光照条件下反应按异面过程进行。

上述种种，都这样或那样地涉及对称和非对称问题。特别是电环化反应和环加成反应以及作为它们的理论总结的分子轨道对称守恒原理，直接与对称和非对称问题关联着，分子轨道对称守恒原理指出的分子轨道对称性相合，也就是在反应过程中保持轨道的对称性，按照肯定否定的辩证法，在肯

定对称性的同时，也就意味着它的反面，即对非对称性的否定。换句话说，保持轨道对称性反应易于发生，那么不保持轨道对称性，也就是轨道不对称、非对称，反应则难于发生。对称，一般地说，指“事物或运动以一定的中介进行某种变换时所保持的不变性；非对称则是指事物或运动以一定的中介变换时出现的变化性”。最直观最普遍的对称和非对称形式是形象对称和非对称，较之形象对称和非对称更深一层的形式是结构的对称和非对称，前面讨论过的有机化合物及其反应过程中的对称和非对称，就是结构上的对称和非对称。形象的和结构的对称和非对称，总起来称为空间对称和非对称。如结构中的镜象异构，顺反异构，操作中的对称和非对称，反应中的轨道对称和非对称等，都属于空间对称和非对称。由此可见，不仅化学结构与空间有着紧密的联系，而且化学反应也与空间密切相关。

化学反应和化学空间之间的关系，简要地说主要表现在：第一，化学反应是化学组成、结构和性质的变化，在化学结构变化的意义上可以说，化学反应是化学结构中空间因素的改变，化学反应中就包含着空间因素的变化，如配合物反应中的反位效应，有机化合物反应中的空间效应和构型转化等；第二，化学反应总要按照一定的空间样式，沿着一定的空间过程而发生，如前面所说的，顺式加成或反式加成，分子轨道对称性允许或对称性禁阻，从非手性的潜手性化合物合成具有手征性的化合物等，都离不开一定的空间样式和空间过程；因此，第三，化学中的空间是化学反应（或一般地说化学运动）赖以进行和实现的形式。总之，化学反应是在空间中发生的，化学反应具有空间特性，化学中的空间在化学反应中发生变化，从化学反应观点看，化学中的空间是变化的空间，或者说是化学反应空间，它是动态立体化学所研究的空间，是化学空间在化学反应中的变化及其表现。

可以看出，化学中的空间是与物质的相互作用紧密结合的空间，因而是充实的空间。我们知道，从古代到近代，人们对空间问题一直争论不休。直到近代科学建立，仍然存在三种不同的观点，或者说存在着三种空间观念，这三种观点提供三种空间模型：第一种是虚空模型，以牛顿为代表，把空间（即绝对空间）看成是与外界任何事物无关而永远是相同的和不动的，实质上是把空间看成是虚空或容器；第二种是充实模型，近代科学和哲学中以笛卡尔为代表，把空间看成是物体的广袤；第三种是关系模型，以莱布尼兹为代表，把空间理解为整体的序列。这三种模型都涉及空间与物质（或实体）的关系。现代化学中体现出来的空间观念是充实的空间观念。这是因为：第一，现代化学把化学个体（分子、实物等）看成是有广延性的，而这种广延性绝非现成容器，而是组成化学个体的各个粒子之间发生相互作用所形成的广延性，这种相互作用包括直接的，即由化学键表示的相互作用，也包括间接的，即不直接相连的物质粒子（原子、离子等）之间的相互作用，正是这种相互作用支撑着化学个体的建筑物；第二，化学个体是序列性的整体，是关系的整体，这就是说，是由组成化学个体的成分按一定次序和分布而形成的整体，没有这种组成成分的次序和分布，也就没有化学个体，也就没有化学个体的广延性；第三，正如前面的讨论所表明的，化学个体的整个形象，也就是它们的化学结构，是相互作用和具体样式、形象的统一，从这个意义上说，化学中的空间是物质（如原子、离子、原子团等）的广延性和序列性

的统一。因此，化学中的空间不是什么脱离物质的虚空，而是化学个体的存在形式和内在因素。这里所说的存在形式，意思是说，化学个体只有通过空间样式才能存在和表现出来；而内在因素是指化学中的空间与化学中的物质和结构的不可分性。

化学中的空间观念不像物理学、宇宙学及其他一些科学中的空间观念那样，涉及有限和无限等问题，从这个方面看，化学中的空间观念似乎涉及的哲学争论不像上述那些科学中哲学争论那么尖锐、那么激烈；但是，另一方面，化学中的空间观念有其自身的特点，这就是它已经渗入到具体化学理论和观念之中了，与化学理论密切结合在一起了。正如上面指出的，化学研究中，空间因素或空间效应已经成为化学家们研究具体化学问题的时候不能不予关注的因素，而且，正是这个空间因素或空间效应，有可能成为化学中新的突破口。从这个方面来看，一些化学理论，特别是化学结构理论和化学反应理论，与物理学及其他一些科学理论一样，在某种意义上可以说是一种空间理论。如果承认空间效应有可能成为化学发展的新的突破口，那么人们有理由期待空间效应理论将会有进一步发展，空间效应理论将会成为化学理论的一个极其重要的组成部分。

化学中的空间观念和时间观念是各自相对独立地发展的。我们已经说过，化学反应是一个过程，作为一个过程，它不能脱离空间，也不能脱离时间。化学中的空间和时间，实际上是不能割裂的，但是，在化学发展中，首先引入了空间因素，继之才逐步引入了时间因素。在化学史上，化学结构理论先于化学反应理论，对化学反应理论而言，化学动力学理论又比化学热力学理论发展得晚，而时间因素是随着化学动力学的建立和发展才被引入化学中来的。我们循着历史顺序，在简要地讨论了化学中的空间的问题以后，进一步讨论时间问题。

二、化学中的时间观念

1. 消除时间的观念

列宁曾经指出，时间和空间一样，是存在的客观实在形式，世界上除了运动着的物质，什么也没有，而运动着的物质只有在时间和空间之内才能运动。化学研究的物质也只有在时间和空间之内才能运动。化学同样离不开时间，正如化学离不开空间一样。

事实上，从古代炼金术时期即化学形成科学以前的时期开始，时间问题就已经提出来了，而且，在化学的发展中，时间问题进一步引起了化学家们的注意。但是，在与古代炼金术时期以萌芽的形式提出时间问题的同时，也就产生了消除时间、取消时间的倾向。

在炼金术时期，时间是以元素性质转化的形式显示出来的。在炼金术士的观念中，元素是由性质产生的，改变性质也就意味着改变元素本身，只要设法改变元素颜色、光泽等性质，就可以使一种元素转化成另一种元素，由此形成元素的演化和元素的历史，演化和历史是在时间中进行的。在这个意义上，炼金术以潜在的形式提出了化学变化中的时间问题；另一方面，炼金术的目的，除了使普通金属转化成黄金，以聚敛财富以外，还要发现某种药剂，以使人长生不死、永远年青，这就意味着保持永恒。在这个意义上，炼金术试图应用化学以消除或取消时间。

“消除时间”(time—elimination)，逐渐成了化学科学中的一种观念、一种传统、一种方法论思想，以致在化学理论中尽可能避免公开使用时间概念。无论在化学的历史上还是在现代化学中，情况都是如此。当然，“消除时间”不是说在化学中不存在时间，化学中根本用不着时间概念，而是说，在一定研究范围内或从某种角度研究问题时，可以暂时撇开时间，用哲学的语言来表述，就是通过舍象或抽象去掉时间因素。

众所周知，在关于化学组成和结构的理论中，化学家们主要研究物质的组成、结构和性质，并把化合物看成相对稳定的不变的体系。稳定和不变，不考虑过程，也就不考虑时间。从这个角度研究化学问题，舍去了时间因素，也即消除了时间。例如，薛定谔方程有时也可看作与时间 t 无关，这时方程的解就没有时间参量，只有空间参量。

按理说，研究化学变化（即化学反应），涉及过程，也就应当涉及时间。可是，在化学反应计量方程式中，我们通常看到的只是反应物、产物和反应条件，而没有时间。在化学平衡的热力学方程式中，我们看到的只是表示物质的参数，自由能等函数以及温度、压力、体积等参量，不存在时间参量。化学热力学主要从能量变化的角度研究化学反应的方向和进行的程度，它不研究化学反应的快慢，因而也就可以不考虑时间。化学热力学的核心问题之一就是化学平衡，而所谓化学平衡，就意味着系统内各物质的量将不随时间而改变，在讨论平衡的性质和有关问题时，时间失去了实际意义，可以被舍去。于是，我们在热力学函数基本关系及其各种导出式中，看不到时间的影子了。

在现代化学中，我们同样可以看到尽可能避免公开使用时间概念的情况。化学反应过程是物质随时间而发生的过程，可是在化学中，常常用相对稳定的状态的总和代替在时间中的运动。例如，把化学转化随时间而展开的

过程，看成由许多中间产物组成的彼此相继的序列，或者看成若干共振形式叠加。这种情况很象摄影家摄制的电影胶片，活动的人物和景象是由不动的、静止的画面构成的。在这种情况下，实际上是把运动化为静止，通过静止认识运动、表现运动。化学反应中的初始态、过渡态、终止态等，都是相对静止状态，化学平衡则是动态中的静态，通过静态可以显示动态和过程，而不必使用时间概念，从而把时间因素舍弃了。

2. 变化的时间观念

尽管人们力图消除时间，但时间毕竟是客观的，是消除不了的。因此，化学家们研究化学转化的过程中，很早就接触了时间问题。1540年，毕林古齐(Biringuccio)在《烟火术》一书中已经指出了时间在化学转化中的作用。后来，在18世纪，洪贝格(Humbert)、路易斯(W. Lewis)和文策尔(Wenel)等人，在化学研究中也涉及了时间问题。1700年，洪贝格在研究酸碱作用“力”的量度时指出，必须考虑到酸吸收碱所需要的时间。1759年，路易斯提出，酸的活性用酸作用于物体的速度来衡量。1777年，文策尔指出，不同物质对同一种溶剂的亲合力的大小顺序与它们在该溶剂中溶解所需要的时间的长短相反。应当指出，时间概念是与过程概念相联系的。在18世纪，就化学的发展水平而言，尚未达到深入认识化学反应过程的阶段。化学的发展，如同整个科学的发展一样，有其自身的内在逻辑。一般地说，人们的认识事物首先需要从现实出发，认识它是什么，而后才能认识它的历史，追溯它的过去，深入认识现状，进而推断未来。19世纪前半期，化学所面临的主要任务在于弄清楚化学变化的物质载体本身的情况，研究它们的组成、结构及其与性质的关系。在此过程中或者说在此基础上，化学逐步转向对化学过程的研究。

从19世纪中叶开始，通过对化学反应过程的研究，建立了动态平衡概念。所谓动态平衡包含的主要思想有三点：第一，平衡意味着任何化学过程的完成；第二，平衡态不是静止态，不是过程的停止，而是正反应逆反应速度相等；第三，反应过程的平衡依赖于反应物的浓度之间的比例和反应条件。化学平衡概念中包含着反应速度概念，而且在建立化学平衡概念和理论的同时，紧跟着自然要提出反应速度问题，也就是要求研究和解决化学平衡是以怎样的反应速度达成的。化学反应速度问题，是化学动力学发展初期的中心问题。如果说，在化学平衡的基础上建立起来的化学反应理论，是化学静力学理论，那么我们可以说，基于化学反应速度而建立起来的化学反应理论则是化学动力学理论。化学动力学理论是在化学静力学理论基础上发展起来的，是化学静力学理论的合乎规律的发展，是化学反应理论发展的必然结果。

1850年，威廉米指出，从化学静力学观点向化学动力学观点的转变，主要表现在用时间测量补充空间测量，他将化学反应的时间概念与他所提出的动力学模型联系在一起进行研究，并依据对蔗糖转化的研究建立了一个方程：

$$\frac{dz}{dt} = MZS$$

式中的 dz/dt 表示在时间 dt 内蔗糖量的改变， M 表示在酸作用下无限小

时间间隔内所转化的蔗糖量的平均值，Z 表示尚存的（即未转化的）蔗糖量，S 为酸的量。这个方程式表明，反应速度与蔗糖量和作为催化剂酸的量成正比。

1862—1863 年，贝特罗和圣·吉尔研究了下述可逆反应：



R 代表 CH_3 , C_3H_7 , C_4H_9 , C_6H_5 ；R' 代表 CH_3 , C_2H_5 , C_5H_{11} 。他们已经发现，在任一瞬间，形成酯的量与反应物质量的乘积成正比例，与反应溶液体积成反比，实际上是基于这个具体反应提出了质量作用定律的特殊形式。此后，本生、罗斯科、哈库特和艾逊等人，进一步推进了这方面的研究。1864—1879 年，古德贝格和瓦格确立了质量作用定律。他们指出，反应物 A、B 之间的反应速度与 A、B 的有效质量 p、q 的乘积成正比：

$$v = k \cdot p \cdot q$$

对于加成反应： $\text{A} + \text{B} + \text{C} + \dots$ ，

$$v = k p \cdot q \cdot r \dots$$

1884 年，范特霍夫提出了一个反应速度方程式：

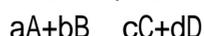
$$-\frac{dc}{dt} = kc^n$$

式中 k 为反应速度常数，n 为参加反应的分子数（通常 n 等于 1 或 2），c 为反应物浓度， $-\frac{dc}{dt}$ 为反应速度。

进入 20 世纪，化学动力学研究深入到反应机理，建立了反应速率过渡态理论、链反应理论以及分子反应动态理论等。

化学动力学研究化学反应进行的速率、化学反应机理和催化作用等，它所研究的是体系随时间而变化的过程。在化学动力学中，时间成了一个重要变量。现在要问：化学动力学中的时间，是怎样的时间呢？

化学动力学研究化学反应速率所遵循的规律，化学反应速率是化学反应过程快慢的度量，可以用浓度随时间的改变率来表示。对于下列的计量反应：



$$\text{反应速率 } r = -\frac{1}{a} \frac{d[\text{A}]}{dt} = -\frac{1}{b} \frac{d[\text{B}]}{dt} = \frac{1}{c} \frac{d[\text{C}]}{dt} = \frac{1}{d} \frac{d[\text{D}]}{dt} \dots$$

式中 [A]、[B]、[C]、[D] 分别为 A、B、C、D 的浓度，t 为时间，a、b、c、d 为 A、B、C、D 的计量系数。

反应速率的定义式中的 dt，实质上是时间间隔。化学反应的实际情况表明，化学反应速率的差别是非常大的。有的反应速率很大，采用的时间间隔很短，如以秒、毫秒或更短的时间间隔来计量；有的反应速率很小，采用时间间隔长，以时、日、月、年计。化学反应速率是化学反应进行快慢程度的量度，而化学反应速率又可以用反应时间来表示，从采用的时间间隔的长短可以反映出化学反应进行的快慢程度。

对于一级反应，速率方程通式为：

$$-\frac{dc}{dt} = kc \quad \dots (2)$$

其积分式为 $-\ln C = kt + B$

t=0 时， $c=c_0$ ，则 $B = -\ln c_0$ 。

所以，速率方程的积分式即动力学方程式为：

$$\ln \frac{c_0}{c} = kt \quad \dots\dots (3)$$

该式表示浓度随时间递变的情况，也就是反应物浓度降低到某值需要多长时间，或者反应进行了一定时间之后剩余反应物浓度是多少。

反应速率、反应速率方程和动力学方程都表示化学反应的快慢，或者说表示化学变化中的时间长短。变化的反面则是存在、生存，如果用时间来表示，则是不变的时间、存在的时间、生存的时间，或者用化学中常用的术语来表示，则是寿命时间。对于一级反应，常用“反应物的平均寿命”来标度反应进行的快慢程度。反应物的平均寿命表示，在 A → P 反应中，分子 A 由反应初始通过反应而消耗所经历时间的平均值。在这段时间内，分子 A 从反应开始到被消耗为止走完了它的生命行程。换句话说，在这段时间内，它仍存在着、生存着，超过了这个时间范围，它就不再存在，已经消耗完了。

反应速率中的时间，是从某物变化的观点描述的时间，而寿命时间，则是从某物生存的观点描述的时间。从观察的角度上说，二者是相反的，同时二者又是统一的，统一在半衰期之中。半衰期是反应物消耗了一半所对应的

时间。反应物消耗了一半，或 $c = \frac{1}{2}C_0$ 意思是说，有一半已经发生了变化、被消耗掉了，另一半尚存在着、生存着，保持着自己的寿命。因此，半衰期又可以称为半寿期。根据上面的分析可知，从变化了的物质的角度，可以称为半衰期；从尚存在的物质的角度可以称之为半寿期，半寿期应当定义为反应物起始浓度 C_0 保持一半所对应的的时间。

无论是反应速率中的时间还是半衰期中的时间，其实质是相同的，都是指时间间隔。作为物质运动的存在形式的时间在不停地流逝，人们为了计量，将时间分成均匀的等份，即把时间分割成时间间隔。速率方程中的 t ，可以是年、月、日、时、分、秒、毫秒……，都是时间间隔，在科学中把这种时间间隔叫做时间单位或单位时间。单位时间内反应物浓度的减少或产物的增加（即反应速率），其中的“单位时间”就是这样划分出来的时间间隔。有了时间间隔可以计量反应物或产物的浓度的变化，因而可以比较化学反应的快慢。半衰期（即完成一半化学反应所需要的时间）直接用时间间隔度量化学反应的快慢。

在上述情况下，时间间隔实际上成为一种量度单位，而用量度单位进行度量的基本原则之一是：量度单位小于或等于被度量的对象。用时间间隔度量化学反应过程，采用的时间间隔应小于化学反应过程的实际时间。在这个意义上，时间间隔的缩小意味着对化学反应过程认识的深化。本世纪 70 年代以前，人们还只能研究寿命为 10^{-6} 秒以上的化学反应过程，70 年代以后，由于技术的进步，缩短了时间间隔，为人们研究快速反应机理提供了有效手段。目前，依靠最尖端的技术，已经能使脉冲短到 10^{-14} 秒，使化学家能在比任何瞬态分子寿命还要短的时间内弄清反应混合物的情况。

反应速率是个标量，没有方向，时间是均匀、对称、可逆的。变化中的时间就是这样的时间，它只能提供快慢的信息，而不能提示方向。

3. 演化的时间观念

演化是有方向性的变化，演化是随时间而变化的过程，演化过程与时间是一致的。

人类实践经验表明，自然界中发生的过程都有一定的方向性。自然界中发生的过程自动地、自然而然地向一个方向进行，其反方向是不会自动地、自然而然地进行的。例如，铁器暴露于潮湿空气经过一段时间会慢慢锈蚀，铁器锈蚀过程与时间的方向是一致的，时间的方向就是过程的方向。相反的过程，即生锈的铁器自动地变成无锈的铁的过程不会自动发生。这种有方向性的过程，即只能朝一个方向演进的过程就是不可逆过程，不可逆过程中的时间与过程的方向是一致的。

热力学第二定律表明，在一个与外界环境没有物质和能量交换的孤立系统中发生的不可逆过程，它的状态函数熵随时间的流逝单调地增加，直至达到热力学平衡态为止。该定律用熵增加原理第一次把演化的观念引入了物理学，说明了不可逆过程中的时间的方向是指向熵增加的方向。

吉布斯在熵函数基础上引出了平衡的判据，指出判断化学反应自发性的标准是做有用功的本领。“功是从量方面看出来的运动形式的变换”。用物理学和化学的术语来表述，就是能量形式的变换，燃油在内燃机中燃烧可以推动活塞运动，锌放入铜盐溶液组成的电池可产生电能用来做功。这类可做有用功的能叫做自由能。化学热力学指出，自由能变 $G < 0$ ，在恒压下反应能做有用功，反应自发发生，直至 $G=0$ ，反应体系达到平衡态。在这里，化学反应过程从 $G < 0$ 向 $G=0$ 方向进行， $G < 0$ ，即 $G_{\text{产物}} < G_{\text{反应物}}$ ，它表示化学反应向产物方向进行。这个方向也就是化学反应过程中的时间的方向。

吉布斯—赫姆霍兹公式，即 $G=H-TS$ ，进一步说明了自由能变 G 与焓变和熵变之间的关系，公式表示 H 和 S 对化学反应进行的方向都产生影响，只不过在不同条件下它们所产生的影响大小不同而已。

当 $H < 0$ ，反应是放热的， $S > 0$ ，反应产物的混乱度增加，反应结果使熵增加，这两项的共同结果使 G 在任何温度下都是负值，反应自发发生。这个公式说明，反应自发地向放热（使体系能量降低）和熵增加（使混乱度增加）方向进行。熵增加原理指出的演化方向，是混乱度增加的方向，是从有序到无序的方向，应当说是退化方向。它恰好与生物的进化方向相反。热力学的退化方向和生物学的进化方向是矛盾的。普里戈金研究了远离平衡态的不可逆过程，他指出一个非平衡系统由线性近平衡区经过分支点后进入非线性区，通过涨落发生突变，形成一个新的稳定的有序结构，即耗散结构。这种演进是从无序到有序的过程，与这个过程相联系的时间，是与事物发展由简单到复杂的发展方向相联系的时间。化学进化的时间就是发展的时间，包含“历史”因素的时间。

总结上述，化学中的时间观念可分成几种情况：第一种情况，被消除了的时间；第二种情况，化学变化中的时间，这种情况下的时间是可逆的，或者说没有固定方向，时间仅仅是一种参量，仅仅是过程快慢的量度单位，本质上是一种时间间隔；第三种情况，演化的时间。演化的时间可分为退化的时间和进化的时间，它们都是演化的时间，也就是与不可逆过程相联系的时间。

第五章 化学中的认识

什么是认识？这个问题看似简单、实际上并不简单，它成为各派哲学家研究的一个主要问题，甚至成为某些哲学家研究的唯一问题。各派哲学家由于对哲学基本问题作出的回答不同，对什么是认识的问题的回答也不同。马克思主义哲学以承认不依赖于人们的意识而存在的外部客观世界为基础，认为认识是主体对客体的能动的反映，认识是外部客观事物的主观映象。这两种说法稍有不同，前一句话包含了人的认识活动和认识的结果，后一句话仅仅指出了人的认识结果。哲学上以认识为对象形成了关于认识的理论，叫做认识论。

各门科学归根结底都是对客观世界的认识，或者确切地说，是对客观世界某一方面的认识，化学也是如此。这里所说的化学中的认识，就是化学家对物质分子的组成、结构、性质及其变化的认识。化学哲学以化学中的认识为研究对象，探讨化学认识的本质、规律、发展形式和特点等，由此形成的理论可以称之为化学认识论。

一、化学中的实践和认识

1. 历史的概述

炼金术是化学的原始形式，在中国是炼丹术。中国的炼丹术很早就产生了，其历史渊源可追逆到战国末期，从那时开始，虽然不断受到无神论者的批判，但长期流传，延续不绝。究其原因，最主要的是社会的原因。中国是世界上最早从奴隶制向封建制转变的国家，也是世界上第一个建立中央集权的封建大帝国。皇帝及皇亲国戚掌握巨大权力和财富，他们妄想长生不死永享天年，这就刺激了炼丹术的发展，并使之长久不衰。在这种背景下，也有些人在炼丹实践中发现了一些化学现象，积累了一些化学知识。中国的炼丹术主要原料之所以是丹砂，这是因为：一方面，在当时社会条件下容易得到，因为早在战国时期，丹砂就已成为南北交流的重要物资，另一方面，丹砂比较容易发生分解和化合作用以及升华等，使人感到变换莫测。由此决定了中国炼丹术时期的化学知识，大都与丹砂有关，炼丹术时期的化学知识是围绕丹砂及其性质而获取的知识。

中国炼丹术于公元7—9世纪传到阿拉伯，与希腊炼金术相融合，使炼金术在阿拉伯世界获得了发展。12世纪，阿拉伯的炼金术著作开始被译成拉丁文，又陆续传入欧洲。在基督教统治下的欧洲，由于长生不死与基督教教义格格不入，炼丹术不可能生存和发展；相反，由于炼金术传入欧洲不久，在封建社会内部产生了资本主义的萌芽，封建统治者的奢侈生活和资本原始积累时期资产阶级对黄金的渴求，使得炼金术一经传入，变普通金属为黄金的思想立即被接受，炼金术很快就发展起来。

炼丹和炼金，在一定历史条件下产生；炼丹和炼金作为一种活动，是在当时历史条件下人们的一种社会实践活动，它的直接目的是炼出仙丹或黄金，以满足社会的需要。同时，炼丹和炼金又是一种原始的实验活动。因为它不同于生产，它所获取的产品不是按照已有经验能够得到的，带有探索性、未知性，或者不如说具有盲目性。总之，要炼出金丹和黄金不是“照方抓药”所能成事的，需要试，需要摸索，在这个意义上，我们有理由认为炼丹和炼金是一种实验的原始形式，“是由非科学的观念出发的实验，是形式上类似于实验的活动”，在试和摸索的意义上，炼丹和炼金不仅在形式上类似于实验，而且在内容上也类似于实验，但是又不同于近代的科学实验活动。在炼丹和炼金活动中，虽然未能实现“长生不死”和聚敛财富的美梦，却积累了化学知识，掌握了一些化学操作，为后来的化工生产和化学的产生做了准备。

15、16世纪，在欧洲兴起了化学研究的新方向：一个是冶金化学，毕林古乔和阿格里柯拉代表了这个方向。毕林古乔（Biringuccio）是意大利的一位实践化学家，著有《烟火术》一书（1540年出版），主要内容是用火的各种生产技术和经验的记述，其中包括各种金属的冶炼、铸造、加工和分离的技术。阿格里柯拉（Agricola）是德国的一位医生，他生活在采矿和冶炼中心，基于实际调查和文献研究，写了一些与采矿和冶金有关的著作，完成了《论金属》一书（1556年出版）。冶金与炼金术有关，但他们两人的著作

已开始摆脱炼金术的束缚，从在神秘主义笼罩下的炼金术转向了冶炼技术等实际过程；另一个方向是医药化学，以帕拉塞尔斯（Paracelsus）为代表，倡导将化学知识应用于医疗实践，使化学从炼金转向制药。

冶金和制药（或医疗）成为化学研究的目的，形成了实用化学。为什么在 15、16 世纪，化学从炼金术的原始形式向以冶金和医疗为主要内容的实用化学转变？凯德洛夫在《恩格斯论化学的发展》一书中专门讨论了这个问题。他指出，对医疗化学的产生和发展有一种不正确的解释，似乎由于炼金术士长期达不到目的感到失望而转向了制药。他认为，这中间有着深刻的社会原因，他进而详细分析了这个问题。在他看来，主要原因在于，在文艺复兴时期，由于手工生产的发展，城市迅速扩大，居民密集、生活条件差，瘟疫易于流行，社会实践提出了需要，正是在社会需要推动下，医疗化学应运而生；至于认识方面也是原因之一，但不是决定性的原因。这种解释是有根据的，因为科学的产生和发展，归要到底是由社会需要决定的。医药化学是由社会对防病治病的药物的渴求决定的，冶金化学是社会生产的需要决定的；诚然，在社会需要作为基本动因之下，认识的发展，观念的影响，也起着一定作用。

毕林古乔和阿格里柯拉为代表的冶金化学研究，主要基于冶金生产实践，总结经验，记述经验。他们的著作属于实用性科学著作，实用性是指其内容主要是实际生产和生活经验的记录和描述，它贴近生产和生活实际。这种著作已具有科学的性质，因为它以记述的方式反映了客观实际，反映了实践经验。帕拉塞尔斯为得到药物，一是从自然物质取得，二是通过化学手段提纯和制造，为此自然需要做化学实验，从而又在实验中积累了化学经验知识。他的一些有关化学的著作，基本上也是实际经验的描述，药物制备过程的叙述。

从炼金术开始，化学的基本问题表现为通过变化制备所需要的物质——丹药（或长生不死之仙丹）、黄金、医疗药品和金属及其制品。这个问题在历史发展中被分成既相对独立又相互联系的两个方面：一方面，在实践中制备具有一定性质的物质，这个方面与作为直接生产力的化学相联系；另一方面，为了能够在实践中达到制备所需要的物质的目的，需要研究具有一定性质的物质的形成方式，这个方面则与作为特殊的社会意识形式之一的化学紧密联系在一起。前一方面表现为化学实践即生产实践，后来演变为化工生产，后一方面导致了作为科学的化学的形成和发展。

化学生产的发展，特别是建立在冶金及其加工生产基础上的化学生产的发展，要求从实际经验、生产技术和工艺的简单描述向科学证明和科学理论转变，也就是将表现为手工艺的化学转化为化学知识，将实用性的化学转变为理论性化学，17 世纪开始了这种转变。波义耳将化学分析和物质组成联系起来，为化学的一个基本概念——元素——下了定义，确定了化学的基本任务，即研究各种物质的化学组成和变化。施塔尔继承前人关于燃烧的各种观点，总结了各种燃烧现象，提出了第一个化学理论。与对燃烧现象和呼吸作用的研究相联系，人们对空气的组成的认识逐步深入，揭示了空气的复杂性；在此过程中，陆续通过化学实验发现了许多新的气体，逐步认识了气体的多样性，发现了一些气体（如碳酸气）的组成。在此基础上，特别是与氧的发现密切相关，拉瓦锡推翻了燃素说，建立了第一个科学的化学理论——燃烧的氧学说。

在燃烧理论建立的时候，正值英国工业革命爆发的时期，英国的工业革

命波及到欧洲其他国家。从 18 世纪中叶到 19 世纪，工业革命深入发展，法国爆发了资产阶级民主革命，其他一些国家也先后发生了革命。在工业革命和政治革命推动下，在欧洲许多工业部门获得了迅速发展。工业的发展进一步推动了化学的进步，化学的进步也促进了工业特别是化学工业的发展。

工业的发展，如纺织、漂洗和肥皂业的发展，对碱的需求量与日俱增。正是在这种工业生产需求的刺激下，法国科学院于 1775 年悬赏 12000 法朗征求利用食盐制取碳酸钠的方法，一些人应征研究制碱法，1787 年，法国的路布兰发明了可以工业规模生产碳酸钠的方法。又如，冶金业的发展，对焦炭的需求量大增，原来利用木材干馏方法获得焦炭，需要大量木材；后来利用干馏木材的技术发展成了用煤炼焦的技术，建立了炼焦工业。炼焦工业的副产物——煤焦油，直到 19 世纪中叶以前，虽然也有些实际应用，但总的来说被视为难以处理的废物。19 世纪初，加登在煤焦油中发现萘，接着法拉第于 1825 年发现了苯。此后，又陆续发现了苯酚、喹啉、吡咯等有机化合物。1856 年，英国化学家帕金将苯硝化和还原得到苯胺，再用重铬酸钾氧化得到一种染料即苯胺紫，为合成染料、医药和其他有机化工产品开辟了道路。

化学工业的发展，一方面有其相对独立性，如煤炼焦技术来源于木材干馏技术，并进一步发展了这种技术；另一方面，化学工业的发展为化学提出了研究课题，也为化学积累了经验资料。煤化工的发展促进了有机化学的进步，不仅发现了以前不了解的许多新的有机化合物，而且这些化合物的组成和结构，急待化学家们去研究。自 19 世纪初化学原子论建立以后，化学结构理论逐步建立和发展起来；有机化合物的结构，特别是芳香性有机化合物的结构的揭示，应当说是与煤化工、尤其是煤焦油工业的发展分不开的。凯库勒提出的苯的环状结构模型，是在煤焦油的利用和染料的人工合成基础上进行理论思考获得的结果。有机化学结构理论的发展，苯的环状结构模型的提出，反过来又为化学工业的发展建立了坚实的理论基础，对化学工业的发展具有巨大的指导作用。这充分体现出物质的东西和精神的東西的相互转化，化工生产和化学的相互促进。

作为这种转化的联系环节或中介的，是化学实验。化学实验在炼金术中萌芽，在实用化学中成长，在近代化学中分化成一种相对独立的实践形式。化工生产中提出的技术问题，需要通过实验去改进、去解决，化工生产中提出的理论问题同样需要通过实验去解决。前一种实验是与化工生产密切联系的实验，是连接化工生产的中间环节，可以表示成：生产——实验——生产。这种实验是生产中的实验，可以称之为生产性实验。后一种实验是与化学理论密切相关的实验，是连接假说和理论的中间环节，可以表示成：假说——实验——理论。这种实验是科学研究中的实验，是为建立和检验理论而进行的实验，可以称之为理论研究性实验。生产性实验和研究性实验都是实验，生产性实验一方面为了解决生产中提出的技术问题，另一方面也为理论研究提供经验资料；理论研究性实验一方面为理论提供经验资料并对理论进行实验验证，另一方面也为发展化工生产开辟道路。同时，化学研究的成果（包括实验和理论）转化为化工生产时，也要经过生产性实验，在这时，生产性实验表现为中间性试验，它是化学转化为直接生产力的必要的环节。诚然，在化工生产和化学科学中都离不开理论。化学科学固然不能没有理论，没有理论的科学不能成为真正的科学；化工生产也同样不能没有理论，没有理论的指导，要解决化工生产中的问题也是不可能的。上面的区分只具有相

对意义，只是就化工生产和化学科学的关系意义上说的。

19、20 世纪，特别是进入 20 世纪以后，社会的需要，化工生产的发展，极大地推动了化学科学的发展，这是一个方面；另一方面，化学科学研究也越来越成为化工生产发展的有力杠杆，化学理论研究和实验研究走在了化工生产的前面，对化工生产表现出越来越大的指导作用。在现代化工生产中，如果不能从理论和实验中搞清楚物质的结构，很难在生产中把它们合成出来，现在通常的程序是：社会和生产提出要求，进行实验的和理论的研究，在实验室中合成一种产品，或确立一种工艺，或两者相结合，进而拿到工厂中进行中间试验，最后定型投入工业化生产。无论在实验室中进行研究还是在工厂中扩大试验，都离不开现代结构理论、化学热力学理论、化学动力学理论以及其他化学理论的指导。

从以上简要的历史概述中可以知道，化学与生产的关系是随着历史的发展而不断变化的。古代的实用化学知识，即在炼金术产生以前，体现在早期的制陶、酿造、染色和金属冶炼、加工等实际技术中的化学知识，是与生产技术密切结合在一起的知识元素，是尚未从生产中分化出来的知识元素。从炼金术开始，正如前面指出的，生产活动中孕育着实验的萌芽，化学也开始作为原始形式出现。显然，在早期，生产决定化学的产生和发展，而化学对生产的作用还非常有限。在近代，化工生产的发展促进了化学的发展，它为化学科学积累了经验资料，提出了研究课题，也提供了应用场所。化学的发展反过来也对化工生产起着指导作用，而且这种指导作用越来越大、越来越显著，以至于化学作为一门基础性科学，走在了化工生产的前面，指导化工生产的发展，为化工生产不断开辟新的领域。这种状况是怎样形成的呢？原因是什么呢？主要原因在于，化学实验从生产实践中分化出来，并逐步成熟起来，成为化学科学的重要实践基础。化学理论和化学实验相互矛盾、相互作用、相互促进，推动化学不断发展。在化学实验中的新发现，化学理论中的新创造，对化工生产起指导作用，为化工生产开辟新的领域。当然，这只是问题的一个方面，即化学科学对化工生产的作用方面；问题还有另一个方面，即化工生产和社会经济发展的需要对化学科学的推动作用，化学实验和化学理论的矛盾运动固然有其相对独立性，但是，归根到底是受社会经济发展和化工生产的发展制约的。

上述分析说明，化学实验在化学发展中具有重要的作用和意义，因此有必要对化学实验的特点和作用作一些说明。

2. 化学实验的特点和作用。

化学实验的特点，正象一切事物的特点一样，总是在同其他事物的比较中显示出来的。要说明化学实验的特点，必须将它与生产实践进行比较，与其他科学实验进行比较，与观察进行比较。

化学实验作为科学实验的一种形式，具有一般科学实验的特点，而科学实验的特点，是就其与科学观察和生产实践相比较而存在的。关于科学实验的特点，应该说的和能够说的，陈昌曙在《自然科学的发展与认识论》一书中几乎都说了。

什么是科学实验呢？在各种认识论和方法论著作中提出了各式各样的定义，陈昌曙从认识论的角度，着眼于科学实验的本质特征，提出科学实验是以认识世界为目标（使命）的实践。我们认为，更准确地说，科学实验是人

以认识世界为主要目标和使命的变革现实的活动。这个定义指出：第一，科学实验是变革现实的活动，从而将科学实验与科学观察区别开来；第二，科学实验的主要目标和使命是认识世界，从而又与生产实践区别开来。

科学观察和科学实验都是认识的来源，其主要目标和使命都是认识世界，在这一点上二者是相同的。但是，科学观察是在人们对认识对象不进行变革（如生物学中观察动、植物形态）或不能进行变革（如天文过程）的情况下搜集自然界所提供的信息，而科学实验则是人们对认识对象进行变革的情况下提取自然界的信息。诚然，科学实验中包含着观察，科学实验离不开观察。但是，作为两种认识世界的方式，二者是有区别的，是不能混为一谈的。从认识发展上看，先有观察后有实验，从观察到观测是一个发展阶段，从观测到实验又是一个阶段。从搜集信息的方式上看，刚刚说了，一个不是变革现实的活动，另一个是变革现实的活动。

生产实践和科学实验都是变革现实的活动，在这一点上二者是相同的。但是，生产实践通常不是为了或主要不是为了“认识、探索、研究而进行的”，“只有科学实验才是为了认识世界而进行的活动”，“正是因为科学实验是以认识世界为目标的实践形式，它才与科学的发展有特别密切的关系”。生产实践受其直接目标所决定，较多的是重复性劳动；科学实验受其主要目标所决定，是探索性、创造性活动。这就是说，科学实验既具有实践的直接现实性，又具有认识的主动性、探索性和创造性。就对自然界的认识而言，这是科学实验的特点，也是它的优点，人们在科学实验中可以充分发挥主动性、创造性，采用各种方法以达到认识的目的。许多文献指出了具体的实验方法，如简化、强化、模拟、对照、重复等，所有这些都是从科学实验的特点衍生出来的，都是为了达到科学实验认识目的而采取的。

简化，就是在实验中设法排除对认识对象的干扰，让被研究的对象在尽可能纯粹的状态下表现其现象或过程。化学实验中采用高纯试剂，减少或排除杂质所引起的副反应，使所要研究的化学反应尽可能充分地表现出来，这就是简化作用。

对照就是对照实验，也可以叫双重实验。一般地说，实验的直接目的是验证某种假说，为此，为了同一目的，在同一个实验中使其在相反条件下进行，从正反两个方面进行验证。

模拟则是用模型模仿自然过程。重复就是可以反复进行。可重复性是实验成功的重要标志。此外，实验中还可以强化自然过程，使实验在极端条件下进行，如此等等。

上述内容仅仅将科学实验同观察和生产相比较，说明了科学实验的特点；在同观察和生产比较中所显示出来的科学实验的特点，也就是化学实验的特点，因为科学实验中包括化学实验。然而，在这种情况下，化学实验的特点的表现是不充分的，要充分反映化学实验的特点，还必须将化学实验与其他科学实验进行比较。

众所周知，天文学以天文观测为搜集感性资料的主要手段。观测就是观察和测量，在观察中进行测量，这是天文学的主要方法。天文学运用各种形式的望远镜，搜集天体表面传来的信息，加以记录和整理，作为研究基础。天文学中也有实验，或者说也有类似于实验的思想设计和样本选择，不同的

是,天文学中变革研究对象的手段完全是被动的,只能根据大自然自己的“表演”来铺排,王绶琯将这种“实验”方法或获取感性资料的方法概括为“在不能布置实验的情况下进行‘实验’”,显然,这里所说的“实验”不同于通常说的科学实验。

地质学和生物学获取感性材料的主要方法是考察。考察与天文观测不同,考察是现场的实地观察,在实地观察中也包含变革现实的因素,如采集样品,打碎岩石等,但是,考察中基本上保持了研究对象的自然形态。生物学中的解剖实验,严格地说不是实验,而是考察,把动物、植物剖开进行观察。诚然,地质学和生物学中也有实验,例如,达尔文研究物种起源主要依靠实地考察,也辅以动物饲养和植物培育的实验,还有孟德尔和摩尔根著名实验等,这类实验具有典型性,并依赖动、植物生长发育机制。地质学中的实验除了化学成分分析具有化学实验的特点外,其他实验如同位素断代实验,古地磁测量实验等,基本上不改变实验对象的组成、结构和状态,与考察非常相似,或者说是介于考察和实验之间的一种形式。

最后说说物理学实验和化学实验。物理学实验和化学实验具有很多共同点,特别是在实验的基本要素和实验设计等方面没有什么区别,如果说有区别的话,物理学实验典型性突出,化学实验个别性见长。在物理学中,常常用精心设计的典型实验来验证某种假说,这类实验对物理学的发展往往具有里程碑的意义。在化学中,由于研究的对象是由近百种元素组成的各式各样的化合物,每种元素在不同化合物中具有不同的存在形式,因此,化学实验具有个别性的特征。所谓个别性,就是对每种元素、每种化合物进行实验研究,对每种化学产品的生产条件、流程进行试验,一句话,就是个别性,而非典型性。正因如此,长期以来,化学被视为不进行实验就不知道什么的一门科学,化学被看成实验科学。

还有,物理学中的实验,大多数是对某种运动的速度、效应的测定,或对某种关系的测量,如迈克尔逊——莫雷实验,氢原子光谱精细结构的探测实验,电子的荷质比的测定实验,这些实验基本上不改变物质本身。化学实验基本的或主要的是要对物质分子本身进行改造,进行变革;也就是说,化学实验大多是基于分子的转化而进行的实验。

基于物质分子的转化而进行的化学实验,有些具有重大的认识意义,例如,1965年9月17日,中国科学家在世界上第一次成功地用化学方法合成了结晶牛胰岛素,这标志着人类在探索生命奥秘的征途中向前跨进了重要一步,开始了用人工合成方法来研究蛋白质结构与功能的新阶段;有些化学实验具有实践意义,如合成某种新的物质,进而经过中间试验,投入规模生产,推动生产的发展,满足社会生产和人们生活的需要;或者,如一般所说,化学实验既具有理论意义又具有实践意义。

如果问,化学家为什么要进行化学实验?换句话说,化学实验的目的是什么呢?人们会说:科学实验的目的是为了认识世界,或解决某个问题。可是,应当知道,科学实验都不是盲目进行的,在进行实验之前,人们总是先有了某种看法,某种设想,也就是某种假设,因此,进行科学实验的直接的目的之一,往往是为了检验对所研究问题的某种看法、设想或假说。我们以

王绶琯:《天文学方法与有关的方法论问题》,见《自然辩证法研究(京)》,1987年第1期,第48页。

拉瓦锡关于氧气的实验为例来说明。在拉瓦锡以前，化学家们对燃烧和呼吸进行了长期研究，从中发现了空气的混合性质，拉瓦锡产生了一种看法，他认为普通空气经燃烧后的剩余物是有毒部分，占空气的四分之三，是或多或少丧失了可供呼吸的部分。正是为检验这种看法，拉瓦锡进行了精确的定量实验。他的方法在今天看来很简单：先通过燃烧来摄取和固定可供燃烧和呼吸的部分，而后把它从燃烧时形成的化合物中提取出来，归还到燃烧后剩余下来那一部分气体中，如果这样能还原到原来的空气，问题就得到了证明。

这个例子说明，化学实验如同其他科学实验一样，往往也是为了检验或验证某种假说。验证就意味着存在两种可能性：证实和证伪（或称否定）。实验结果与预先设想的结果一致或大体一致，一般地说，假说得到了证实；反之，一般地说，则认为假说被证伪了。从认识论上说，证实和证伪都使认识前进了一步，而证伪具有更深刻的意义，它迫使人们进一步研究和探索。如果将证实和证伪结合起来，转化为实验验证的方法，那么就形成了双重验证的方法。

双重验证实验的思想是恩格斯提出来的。在《自然辩证法》一书中，恩格斯谈到实验对因果性作出验证的时候指出，“如果我们把引信、炸药和弹丸放进枪膛里面，然后发射，那么我们可以期待事先从经验已经知道的效果”，“事实上有时候并不发生正好同样的情形，引信或火药失效，……但是这正好证明了、而不是推翻了因果性，因为我们对每件这种与常规相偏离的事情加以适当的研究之后，都能找出它的原因：引信的化学分解，火药的潮湿等等……因此在这里可以说是对因果性作了双重的验证”。*

双重验证，一般地说，就是在同一目的实验中的相反的处理，或者说是相反条件下进行的实验。这种实验具有确证和去伪存真的作用，并有利于通过反证发现矛盾，使认识不断深化。双重验证，实质上是在做了一个方面的实验检验以后，再做一个相反条件下的实验，从反面去进行验证。在认识上和思想方法上体现了辩证法，从正面思考，再从反面思考。这是一种重要的实验方法，也是一种重要的认识方法和思维方法。

从实验中获得的认识是经验认识，它是实验者在直接观察（包括人的感觉器官的观察、接触和借助于探测工具的观察和接触）实验中发生的现象过程中获得的认识。化学实验为化学家提供经验认识，它成为进一步认识即从经验认识达到理论认识的基础。

3. 理论认识在化学实验中的作用

理论认识是对实验中观察到的现象的本质的认识，它以经验认识为基础又高于经验认识。毛泽东在《实践论》中把认识划分为感性认识和理性认识，从广义上来理解，与这里说的经验认识和理论认识是一致的。毛泽东指出，感性认识是人在实践过程中获得的关于事物现象方面，事物的片面，事物之间的外部联系的认识；理性认识是反映了事物的本质、全体和内部联系的认识。

理论认识（或理性认识）在化学实验中起什么作用呢？

首先应当指出，化学实验如同其他科学实验一样，一般地说，都可以表示成“假说——实验”的形式。“假说——实验”意味着在实验之前先有了

恩格斯：《自然辩证法》，于光远等译编，人民出版社，1984年版，第98—99页。

某种假说，而假说是理论认识的形式；为了验证假说而设计某种具体的实验。假说的具体形式很多，可以是一种猜测或推测，也可以是通过理论推理得到的推论。有时表面看来似乎只是一种目的，如制备某种化合物，分离某种物质，研究某种化合物的组成和结构等，但是，从实质上看，实验的目的具有验证假说的性质，或与假说对实验的关系是相同的。让我们举一个具体例子来说明。1898年，居里夫人在研究天然放射性现象过程中发现，含铀的矿石的放射性比纯铀还强，她由此推测含铀矿石中除了铀元素以外可能还含有一种尚未发现的放射性元素，它的放射性比铀的放射性强。这种认识实际上是一种推测或假设，是通过推理得出的认识，是推测性假说，居里夫人根据这种推测确定了实验目的：从含铀矿石中寻找并分离出可能存在的另一种放射性元素。很明显，实现这个目的也就验证了推测，验证了推测也就实现了实验目的；反之，如果实验目的未能达到，推测也就未得到验证或证明。“假说——实验”的关系表现了理论认识或理论性认识对实验的指导作用，先有某种理论性认识而后做实验，实验是在理论性认识（假说）指导下进行的。

其次，任何实验都不是盲目进行的，都是先想后做，想好了再做。想是什么呢？想是理论思维的通俗说法，理论思维本身及其内容都与理论性认识有密切的联系。想什么呢？想实验该怎样做，也就是进行实验设计，制订实验方案。在此过程中，已有的理论认识无疑也起着重要作用。

第三，在实验过程中，对实验现象的观察、检测，同样离不开理论性认识。人们在观察实验现象过程中，理论性认识起着重要作用，没有理论性认识指导的所谓纯粹的观察是没有的。理论性认识可以帮助观察者捕捉现象、更深刻地感觉呈现在人们感观面前的现象。正如毛泽东指出的，感觉到了的东西不能立刻理解它，只有理解了的东西才能更深刻地感觉它。从这点上看，理论认识是有益于观察的。

在这里提出了一个实验观察中的认识论问题：在观察中，理论认识的指导作用和从实际出发是个什么关系？

西方科学哲学有一种观点，认为观察依赖于理论认识，并以此作为否定科学始于观察的论据。持这种观点的哲学家在具体论述上不尽相同，但有一点是相同的，就是强调没有纯粹的观察，观察依赖于理论认识，或者说理论认识先于观察。有些学者由此得出结论，观察是靠不住的，易谬的。一些著作以观察X照片为例，指出具有医学知识和经验的人和没有医学知识或初次观察的人，同时看同一张X照片，他们所看到的现象是不同的，即使是同一个人在不同时期看X照片，由于知识和经验不同，他的感觉也是不同的。应当承认，这都是事实。

这种观点和论证，有合理的、正确的思想。的确，正如已经指出过的，世间没有纯粹的观察，观察中总要受观察前的设想、理论认识的影响，这是事实。正由于这个原因，对实验现象的观察，不同的人有所不同，有深浅之分，有多少之别。也正是由于这个原因，要求从事实验的人必须具备一定的理论知识，经过一定的准备和训练，须知，不是任何人都能做科学实验，都能承担观察实验中发生的现象的任务的。这是问题的一个方面。

问题还有另一个方面。对实验现象的观察，只要采取科学的、客观的态度，毕竟是对客观现象的观察，观察中尽管深度和广度可以依观察者而有所不同，但观察到的现象总是实验中发生的现象，它是客观的现象在人们感观中的反映，它可以做为进一步认识的基础。

应当指出，由于观察离不开理论，理论总要发挥作用，它既可以指导观察，也可以干扰观察，影响客观地进行观察，即如通常所说的，影响客观地看问题。于是，如何发挥理论认识的指导作用，同时又防止理论认识的不利干扰，就成了一个重要问题。

从理论上讲，重要的是划清理论的指导和先验论的界限，并在对实验现象的观察中贯彻实施。

恩格斯在《反杜林论》中批判杜林的先验论时说了一段很重要的话，他说：“原则不是研究的出发点，而是它的最终结果；这些原则不是被应用于自然界和人类历史，而是从它们中抽象出来的；不是自然界和人类去适应原则，而是原则只有在适合于自然界和历史的情况下才是正确的。”恩格斯说，这是对事物的唯一唯物主义的观点。杜林所持的观点恰恰相反，杜林认为，原则是从思维中得来的而不是从外部世界中得来的，从思维中得来的原则被运用于自然界和人类，因而自然界和人类应当适应这些原则。杜林的观点是唯心主义观点，也是先验主义观点，因为他认为原则先于经验而存在。

理论认识不是研究的出发点，而是它的最终结果；理论认识的内容是客观的，是对客观对象的本质和内部联系的反映，它的形式是主观的，表现为概念、原理、定律、推论等，这些都是从客观对象中抽象出来的。我们说理论认识指导观察，意思是主观上的东西（理论、假说、设想）仅仅作为实验中观察的线索，对实验中产生的现象提出预测，这种预测是否正确最终还要由实验来决定。换句话说，在观察现象时，必须从实际出发，实验中产生了什么现象就是什么现象，即使与预测的现象大相径庭也要尊重事实。科学史上的偶然发现，都是与预测的不一致的，都是非所预料的。对于科学史上的偶然发现，许多文献比较强调发现者有准备的头脑所起的作用。如果“有准备的头脑”指的是实验者的科学素质、学识和经验，无疑是正确的。但是，也不能忽视实验者的求实精神所起的作用。反之，不是把预测、假设作指导线索，而是作为出发点，硬要实验符合理论预测，或者先入为主，凡符合预测的则取之，不符合的则舍之，或者用猜测、推论去填补实际观察中的空白，或者为了让观察与预测符合，自觉或不自觉地歪曲地看待实验中产生的现象。所有这些，如果拿到理论上进行考察，都是试图让客观事物适应理论原则，因而都是先验论在科学观察中的不同表现形式。在理论认识和对实验现象的观察二者的关系上，应当发挥理论的指导作用，警惕和防止先入为主的先验论，警惕和防止理论认识对观察的干扰作用。这是科学实验中的重要认识和方法论问题。在科学实验和观察中，有一条基本要求或基本原则，就是客观性和全面性。

客观性，指的是客观地观察、记录和描述实验中产生的现象，不附加主观上的推理成分；全面性，指的是系统地反映客观事实，注意细节。客观性和全面性是密切联系的。列宁在《哲学笔记》中讲到辩证法的要素时，第一条提出的就是观察的客观性，而且对观察的客观性作了注解，说明所谓观察的客观性，指的不是实例，不是枝节之论，而是自在之物本身。如果我们不去细究列宁所用的概念和名词，仅取其含义，列宁要说的是主观辩证法应该正确地反映客观辩证法，要做到这一点，就不能抓住枝节、抓住个别实例代替全体、代替本质，而应当从事物的全部总和、从事物的联系中去把握事物

本身。应用到实验中，不能用个别现象代替实验本身，不能只抓住个别的、与预测相符的现象，而不顾现象的全部，特别是那些与预测不一致的现象。如果仅仅抓住了个别现象而不顾其全部，尽管这个个别现象也确实是实验中产生的现象，也不能说坚持了客观性，客观性应当是与全面性联系在一起的，应当以全面性原则作为补充。

4. 认识发展的基本规律

“假说——实验”表明，实验之前先有了思想，是思想先行的。一般地说，人们在从事某种实践以前，已经在自己头脑中有了设想，劳动过程结束时得到的结果，在这个过程开始时就已经在劳动者的表象中存在着，即已经观念地存在着。但是，另一方面，毛泽东在《实践论》中指出，实践、认识、再实践、再认识，这种形式，循环往复以至无穷，而实践和认识之每一循环的内容，都比较地进到了高一级的程度，这就是辩证唯物主义的全部认识论，这就是辩证唯物主义的知行统一观。那么，实践和实验前的思想是怎样产生的？认识发展的基本规律是实践、认识、再实践、再认识，还是认识、实践、再认识、再实践？人们认识的发展表明，认识发展的规律是前者而不是后者，是《实践论》中揭示的真理。至于说实践前的思想是怎样产生的，这个问题实质上是从人类认识发展过程中截取一段而提出来的。如果从认识发展总体上看，人从猿转化而来，人的思维和认识都是在同自然界斗争中，也就是在生产劳动过程中逐步发展的，就连人类本身也是在使用工具和制造工具以及劳动中产生的。没有实践，不用说人的认识，就是人本身也不会产生。至于说，实践和实验前的思想是怎样产生的，陈昌曙提出了这个问题，并对这个问题作了一些分析。他认为，从科学史来看，科学的发展有多种多样情形，大体上可以用如下一些公式来表示：实验——假说——实验，观察——设想——实验，被动观察（或感性直观）——思想——实验，机遇观察（即偶然发现）——设想——实验，如此等等。为了避免实验前先有思想而思想又在实践中产生的悖论，他主张把“变革现实的实践”与“非变革性实践”、“被动实践”、“意外的实践”等区分开来，对一个具体过程来说，变革现实的实践之前的思想可以来自被动的感受、感性直观、意外的发现、非变革性实践等。

奥地利科学哲学家波普尔认为，科学认识是按照下述公式表示的线索发展的：

问题 1 (P_1) 试探性理论 (TT) 批判性检验 (EE) 问题 2 (P_2)

按照这个公式，认识的发展似乎是问题 认识 问题，或者说，问题、认识、再提出问题、再认识。

什么是问题？毛泽东指出，问题就是事物的矛盾。如何提出问题？他又指出，提出问题首先就要对问题即矛盾的两个基本方面加以大略的调查研究，才能懂得矛盾的性质是什么，这是发现问题的过程，大略的调查研究可以发现问题，提出问题，但还不能解决问题。调查研究，包括实验和实践。例如，卢瑟福及其合作者基于 粒子散射实验，发现绝大多数 粒子通过金属箔，少量粒子发生偏转，个别粒子似乎遇到阻碍反弹回来，依据汤姆逊提出的原子模型，电子嵌在均匀分布的正电荷中，不应该发生这种现象。这就

发现了矛盾，可以提出一个问题：如何解释 粒子散射实验中的现象？卢瑟福及其合作者之所以能够提出这个问题，一方面由于他们做了 粒子散射实验，另一方面由于他们了解汤姆逊的原子模型。

当人们提出某个问题时，表明提出问题的人对问题所包含的矛盾有了一定了解，有了一定认识，否则就不可能提出问题；但是，问题之所以成为问题，它本身一定还包含着提问题的人所不了解、尚未认识的内容，否则也就没有必要提出问题进行了。因此，问题是知与不知的统一，是研究的结果又是研究的起点。

就一个具体研究过程而言，确定研究的问题（即科研课题），是一项研究工作的开始，从这个意义上说，提出和确定问题，是认识的开始，是“这一个”研究、认识过程的开始。但是，不应忘记，问题的提出，课题的确定，是大略调查研究的结果。所以，“问题、认识”的次序只能表示一项具体研究课题的研究程序，而且提出问题离不开实验、实践，认识问题、研究问题，最终解决问题，同样离不开实验、实践。

综上所述，就一个具体认识过程来看，把先前研究的结果作为起点，即把问题看成是认识的起点，可以表示成问题、认识、问题；就人类认识的过程来说，实践是认识的基础和源泉，认识的发展规律是实践、认识、实践。

二、化学认识中的个别、特殊和普遍

1. 化学研究对象的特点

正如前面所述，特点是在比较中存在，通过比较而获得表现的。化学研究对象的特点，也是在与其它科学研究对象的比较中存在和表现出来的。在这里，主要就化学研究对象和物理学研究对象作一简要的比较和说明。

从本体论观点来看，化学和物理学的研究对象有共同点，化学研究的物质客体主要是分子，涉及原子、原子核和电子，物理学也研究分子、原子、原子核和电子。但是，物理学所研究的范围要比化学广泛得多，它不仅研究从分子到原子核的各个层次，还研究原子核以下的各个物质层次。化学和物理学都研究分子的聚集体——实物、物体，物理学除此之外还研究场，研究更大的物质对象。

化学和物理学所研究的相互作用也有共同点和不同点。依据现代科学理论，自然界的相互作用分为四种：引力相互作用，电磁相互作用，弱相互作用（弱力）和强相互作用（强力）。这四种相互作用都是物理学研究的内容。化学研究的相互作用主要涉及电磁相互作用。现代科学的发展，主要是现代物理学的发展，否定了特殊的“化学亲和力”的存在，原子之间没有不同于物理相互作用的特殊的化学相互作用，化学行为本质上是电磁相互作用的表现。

从认识论观点来看，化学研究的对象又有其特点，也就是有其不同于物理学的特殊性。物理学，无论是力学、电动力学、统计力学、热力学，还是量子力学，都力求高度的抽象和一般化。力学研究质点，电动力学研究电磁场，统计力学研究系综，热力学研究系统，量子力学研究微观粒子，如此等等。在这点上，化学不同于物理学，化学研究物质客体，要研究每一个具体的、个别的对象。无机化学研究的是各种化学元素及其性质，以及由元素组成的各种化合物及其性质，有机化学研究各种碳氢化合物及其衍生物，高分子化学研究各种各样的高分子化合物，如此等等。

个别性是化学研究对象的特点，个别性在实物层次上表现为化学个体。所谓化学个体，在经典化学中，被理解为由同种元素组成的单质和由不同种元素组成的化合物。这里说的单质和化合物，不是单质分子和化合物分子，而是单质或化合物分子形成的实物。诚然，化学个体的概念随着化学的发展而不断变化，在纯粹或绝对定组成的意义上的化学个体是不存在的，因为现代科学已经表明，化学上绝对纯的物质是不可能得到的，因此化学中的任何个体都不是完全的个体性的化合物。但是，如果把化学个体看成是某种化学实物的质的确定性，将它与混合物或与其他化合物区别开来，自然是有意义的。况且，人们可以将化学个体看作是化合物的一种极限状态，一种理想化，在这个意义上，可以把它视为化学上绝对纯的。

个别性在分子层次上表现为多种多样的具体的分子。从结构观点上说，分子应当是指个别性分子，一个个分子，可以称之为分子个体。但是，在实际研究中，或者说从化学反应的观点来看，人们所说的分子，实质上是指大量分子的总和。单个分子，一个分子，是不能发生化学反应的，也无从谈论其性质，但是，人们知道，气态（宏观系统）和凝聚态物质，都可以看作同类分子的总和，其宏观性质的物质载体是相应的分子。在这个意义上，分子

的结构指的是个体性分子的内部结构，因为把分子看成是同类的，因此，某个分子的结构也就代表了同类分子的结构，通过一个分子的结构也就认识了同类分子的结构。这样，一个分子与一类分子发生了联系。一个分子表现出个别性，一类分子则表现出特殊性。由此继进，研究了各类分子的结构，可以认识分子结构的普遍性规律。在结构上，使各种各样的分子联系起来。从个别到特殊，又从特殊到普遍，是化学认识发展的重要形式。在具体分析化学认识的这种发展形式之前，首先应当说明什么是个别、特殊和普遍，也就是说，首先应当对这三个范畴略作一些分析。

2. 个别、特殊和普遍

个别、特殊和普遍三个范畴是相对而言的。个别指的是个体性事物，单一的事物，如化学元素中的氢、氦、锂、铍、硼等，其中每一种元素都表现为单一的元素，表现为个别元素，或者说，每一种元素就是指这种元素本身。特殊是由个别组成的类，如化学元素周期表中的元素族，是由几种元素组成的，它不再是个别或单一，而是一类或一组，类或组相对于个别或单一就是特殊。普遍则更进了一步，它已经不再是一类或一组，而是由所有个体或各类形成的全体，如元素周期表是由所有个别元素或各个元素族组成的，表现了所有元素之间的联系，即普遍性联系。

我们已经说过，化学研究对象的特点是个体性或个体性，但是化学又不能停留在对个别性对象的认识上，化学从个别的、单一的对象开始，进而要认识个别、单一对象之间的联系，揭示它们之间的共同本质，从而使认识从个别上升到特殊；依此递进，还要认识各个特殊之间的联系，揭示它们之间的共同本质，从而使认识又从特殊上升到普遍。与此同时，认识还有逆向过程，也就是从特殊到个别，或从普遍到特殊或个别。人们的认识过程，实际上是很复杂的，是在个别、特殊和普遍的交互作用中发展的。然而，一般来说，正如毛泽东在《矛盾论》中所指出的，人类认识运动的秩序总是由认识个别的和特殊的事物，逐步扩大到认识一般的事物；人们总是首先认识了许多不同事物的特殊的本质，然后才有可能更进一步地进行概括工作，认识诸种事物的共同本质。当着人们已经认识了这种共同的本质以后，就以这种共同的本质认识为指导，继续地向着尚未研究过的事物或者尚未深入地研究过的各种具体事物进行研究，找出其特殊的本质。因此，人的认识从特殊到一般，由一般到特殊循环往复地进行下去。

化学研究的对象，无论是元素、原子还是分子、实物，都具有大量的个体，而且个体之间又不是孤立的、互不相关的，因此，个别、特殊和普遍之间的关系，对化学认识显得特别重要。下面，让我们从历史的角度作一简要分析和说明。

先说人类对化学元素的认识。早在新石器时代晚期，人类就已开始使用和加工一些金属，从而也就开始接触和认识了一些个别金属元素，如铜、锡、铅、金等，此后又学会使用铁。在生产和生活实践中，获得了一些金属元素和非金属元素，具有了一些感性知识。

近代化学，通过化学实验又陆续发现和认识了一些元素，如氢、氮、氧、氯、锌、镍、磷、钨、钼、铬、铂、碲等。这时，对这些元素的认识，还处于个别性认识阶段，也就是分别对每种元素进行实验研究，还没有对它们之间的关系进行考察，因而也就还没有达到对已知元素之间联系的认识。随着

一系列新的元素的发现，一方面在理论上逐步形成和发展了科学的元素概念，另一方面在实践上对已知的元素开始进行分类研究。1789年，拉瓦锡在《化学基础》一书中，把已知的33种元素分成金属、非金属、气体和土质四类，每一类都包含几种元素，其中非金属和土质包含的不完全是元素或完全不是元素。拉瓦锡的分类，是对元素的认识从个别进到特殊的开始，到19世纪，人们不再限于从性质上进行分类，开始将原子量和性质联系起来对元素进行分类，发现了相似的元素组。1829年德贝莱纳发现了三元素组：锂、钠、钾；钙、锶、钡；氯、溴、碘；硫、硒、碲；锰、铬、铁。19世纪中叶，又扩大为四元素组、五元素组等。

在元素组认识的基础上，19世纪60年代，门捷列夫和迈尔发现了周期律，特别是门捷列夫依据周期律组成了元素周期表，包括了当时已知的化学元素，并预言了（也就是包括了）尚未发现的新元素。元素周期系揭示了化学元素之间的普遍联系，意味着对化学元素的认识从特殊达到了普遍。

对化学元素的认识是这样，对化合物的认识也是这样。早在古代，人类就开始和化合物打交道，并逐步认识了一些化合物。在此基础上，试图对化合物进行分类。在近代化学建立以前，主要是依据化合物的外部特征或物理性质对它们进行分类。例如，把橄榄油及其他脂肪油与矾油和酒石油（熔融的苛性钾）列为同一类，把溶在水中并有特殊味道的无色固体称为盐。到17世纪，勒梅里（N·Lemery）在《化学教程》中，把天然产物分为三类：矿物、植物和动物。贝歇尔提出，在这三类天然产物中存在的元素是相同的，但矿物中的元素化合时要简单些，植物和动物中的元素化合时要复杂些。拉瓦锡把化合物看作氧和基（或根）的结合，并区分了有机物和无机物，他认为，在矿物界中，几乎一切可氧化的和成酸的根都是单质，在植物界中，尤其在动物中，没有一种根不是至少由两种物质即氢和碳所组成。1817年，葛梅林（L·Gmelin）提出，无机化合物具有二元结构，有机化合物最简单的似乎也是三元结构。贝采里乌斯进一步提出，能够人工制备的化合物是无机物，有机物是不能用人工制备的。从此，在无机物和有机物之间作了严格的区分，它们分别成为无机化学和有机化学的研究对象，各自独立地向前发展着。从认识的次序看，上述分类表示人们对化合物的认识，已从个别发展到特殊，从分别认识每一种化合物发展到认识一类化合物，尽管对类的分法各不相同。

从韦勒于1828年用无机化合物氰酸铵转化为尿素开始，打破了无机物和有机物之间的绝对界限。1845年，柯尔柏（H·Kolbe）用木炭、硫磺、氯和水为原料，合成了醋酸；随后，化学家们又相继人工合成了葡萄糖、柠檬酸、琥珀酸、苹果酸等一系列有机酸，还合成了油脂类物质，糖类物质，等等，这些有机化合物的人工合成使人们确信，人工既可以合成无机物质，也可以合成有机化合物，从而揭示了化合物之间的普遍联系。在这个意义上可以说，对化合物的认识，已经从认识特殊的类（无机物或有机物）发展到认识各种化合物，也就是认识了所有化合物都是由元素组成的，都是可以人工合成的。

对有机化合物认识，开始只认识少数个别物质，如乙醇、乙醚、成油气（乙烯）、苦杏仁油、安息香酸，等等。1843年，日拉尔（C·F·Gerhardt）把有机化合物归并成多个系列，提出了同系列概念，每一个系列可用一个代数组成式来表示。日拉尔指出，同系列中各种化合物的化学性质相似，它们按照同一化学方程式进行化学变化，只要知道一个化合物的反应就可以推断

其他化合物的反应；同样，同系列中各种化合物的物理性质的变化也有其规律。这就是说，同系列中各化合物，组成成分相同，分子量不同，物理和化学性质相似。有机化学中的同系列，好像无机化学中元素族，它们表示的不再是个别性，即不再是个别的化合物和个别的元素，而是化合物的类和元素的族，认识了有机化合物的同系列，如同认识了元素族一样，标志着认识从个别上升到特殊。随着对有机化合物研究的进展，人们发现，同系列中的化合物不仅彼此之间联系在一起，而且还同其他与之邻近的同系列（如碳氢化合物系列与醇、酸系列相对应）中类似的化合物存在平行重复现象。由此可以说，一切有机化合物的各个同系列形成了相互交错的体系，形成了网状图形。如果与元素周期表作类比，同系列之间的联系和关联所形成的体系，宛如元素族之间的联系和关联所形成的元素周期系一样，区别在于，各同系列所形成的体系没有显示出周期性规律。1938年，西尼奥（Senior）提出了广义同系列概念，“在同系列的第一个化合物XY的结构中，按照一定规律插入一种原子集团或其倍数，就构成一个同系列”。从认识同系列发展到认识同系列之间的关系，对有机化合物的认识从特殊达到了普遍。

上述实例表明，对于个体性或个别性对象的认识，一般说来，都有一个从个别到特殊，从特殊到普遍的过程。化学研究的对象，具有个体性，如同前述，一个个的元素，一个个的化合物，不仅要分别地一种种地研究它们的性质，还要把化合物分别地一种种地合成出来。另一方面，认识又不能停留在这种个别性上，认识要通过个别上升到特殊，又从特殊上升到普遍。正如恩格斯所说的：“一切真实的、详尽的认识，都只在于我们在思维中把个别的东西从个别性提高到特殊性，然后再从特殊性提高到普遍性，在于从有限的东西中找到无限的东西，从暂时的东西中找到永久的东西，并且使之确立起来。”

3. 特殊在化学认识中的意义

从个别、特殊到普遍，普遍性的形式是无限性的形式，它把许许多多有限的东西综合为无限的东西。恩格斯曾举过一个例子，氯和氢在一定的压力和温度的界限内受到光的作用会通过爆炸化合生成氯化氢，只要知道这一点也就知道，只要具备上述条件这件事情随时随地都会发生，至于这种事情是否只发生过一次或者重复了100万次，在多少天体上发生过，那是无关紧要的。就每一次具体的实验而言，“这一次”氢和氯的化合是个别性事件，或者说是个别性反应；但是，化学家们做这种实验的目的，决不仅仅限于“这一次”实验，在这一次实验中力求找出氢和氯发生反应的条件。通过每一次个别性实验发现了这种条件，并验证了这种条件，那就意味着在思维中已经把个别实验从个别性提高到特殊性和普遍性；这时，当我们说氢和氯在什么什么条件下化合生成氯化氢的时候，所指的已经不是某一次实验，而是一种普遍性认识了。因而也就是带有规律性的认识了。

然而，在科学认识中，从个别中认识的结果，虽然从表面上看具有普遍性的形式，但实质上常常带有特殊的性质，也就是一种特殊性的认识。黑格尔曾经讨论过认识中个别、特殊和普遍三者之间的关系，他用A、B、E分别

蒋明谦：《有机化合物的同系列线性规律》，科学出版社，1980年版，第2页。

恩格斯：《自然辩证法》，于光远等译编，人民出版社，1984年版，第106—107页。

表示普遍、特殊和个别，指出有一种推论可以表示成 A—E—B。意思是说，这种推论以全部个体（个别）作为它的中项，首先假定，在某种范围内观察和实验是完备无遗的，但这里所处理的对象是个体事物，于是我们又陷入无穷的进展（E、E、E……），因为在归纳过程中是无法穷尽所有个体事物的，因此，当我们从普遍性出发，处理许许多多个体事物（如做了许多次实验），得出结论说“所有的氢和氯……”时，只是表明迄今为止我们所知道的“所有的……”。这就是说，这种结论中虽然有“所有”二字，实际上指的是迄今为止的“所有”。从“所有”来看，是普遍性结论，而“迄今为止”所标明的仅仅是特殊性结论。

事实上，在化学中，除少数带有极其普遍性的规律的认识，如元素周期系，大多数的认识结果都具有特殊性，即是说，从个别中得出的普遍性认识，实质上是一种特殊性认识。

特殊是从个别到普遍的中介，从个别经过特殊而达到普遍。以周期系为例，在门捷列夫发现元素周期律以前，已有许多化学家对元素之间的关系进行了研究和探索，只要看看有关化学史的著作，就会了解哪位化学家在何年何月提出了什么思想，做出了什么贡献。在这里，我们不打算重复化学史的内容，只想从认识论方面对这段化学史作一些分析。

从认识论方面看，门捷列夫以前的化学家关于化学元素的分类工作，大体上可分为两种情况：一种情况，从个别到特殊，也就是从认识个别元素提高到了认识由若干元素组成的族或类。如前已述及的，拉瓦锡将元素分成四大类，德贝莱纳确定三元素组，培顿科弗（M·J·Von PettenKofer）扩大了三元素组，有的组成四元素组，如此等等。这些化学家关于元素的分类工作的特点在于，把个体的元素依据一定性质（如化学性质、原子量等）组成特殊的组并与其他组区别开来、并列起来；从认识过程看，就是在思维中把个别的元素从个别性（个别元素如锂的性质）提高到特殊性（它们形成相似组，具有相似的性质）。另一种情况，从个别到普遍，其具体表现，是从个别元素着手一个一个地排列起来，试图把全部已知元素都排列在一个体系中。例如，尚古多（B·de chancourtois）将已知的 62 种元素按原子量大小顺序标记在绕着圆柱体上升的螺旋线上，他虽然发现了元素的性质有周期性重复出现的规律，但是没有能够准确地揭示元素周期律，将元素合理地组成周期系；此外，欧德林组成了一张元素表，也是将所有已知元素按原子量顺序进行排列。这些研究工作，从认识论上分析，是试图从个体的元素一下子达到普遍性形式。

化学史业已表明，前两种尝试都提出了一些重要思想，作出了一些发现，并为最终发现元素周期律奠定了基础，或者向这个方向迈出了重要一步；但是，这两种尝试仅仅是尝试，没有结出成熟的果实。除了其他原因外，重要原因之一在于，这两种尝试没有体现特殊在认识过程中的中介作用，一个从个别到特殊，没有继续前进（这是受历史条件限制，有历史原因的），另一个从个别到普遍，越过了特殊。

门捷列夫关于化学元素的分类工作，从认识论上看又是怎样的呢？一些科学史家的深入研究已经表明，门捷列夫先研究了已知的元素组内各元素之间关系，进而研究了已知元素组之间的关系。例如，他先对碱金属（锂、钠、

钾等)和另一些金属(如镁、锌、镉等)进行了比较,进而又对卤族元素和其他非金属元素族进行了比较,最后又对非金属卤族元素和金属中的碱金属族进行了比较,正是在这种比较中,特别是在碱金属和卤素的比较中,门捷列夫发现两种元素原子量接近而性质相反(一个为金属,另一个为非金属),从而发现了转折性,意识到了周期性。基于这个发现,通过反复试验,将全部已知元素排进表中,同时留出了空位,修订了一些元素的原子量,有些元素没有机械地按照原子量增加顺序排列。这里简要叙述的过程说明了什么呢?

这个过程说明,门捷列夫发现元素周期律组成周期表的思维进程,不是从个别元素一下子达到普遍,而是通过元素的组、类,也就是通过特殊达到普遍的。确切地说,门捷列夫不是从个别出发的,而是从特殊开始的,从元素组开始的,使认识从特殊上升到普遍,也就是通过比较不同的元素组揭示了元素之间的普遍联系。

门捷列夫发现周期律的过程说明,从个别到普遍要经过特殊,特殊是沟通个别性认识和普遍性认识的中介,是由此达彼的桥梁。从个别经过特殊达到普遍,是认识发展的重要途径,也是认识发展规律性的一种表现。

这种认识发展的途径和规律具有重要的启示意义和方法论意义。它启发人们,在科学研究中,应当注意分析自己所研究的问题和获得的结果,在认识过程中处于何种阶段,是个别性阶段还是特殊性阶段,抑或是普遍性阶段。一般地说,属于个别性认识的研究,最实际、最切近的目标,应当是向特殊性认识进军,也就是说,当研究了和解决了属于个体的对象之后,应当提出特殊性认识的课题;同样,在研究了具有特殊性的认识的项目的基础上,应当提出更高的目标。考虑认识上升的过程和规律,对于确定主攻方向无疑是有意义的。

从上述认识发展的途径和规律,我们可以分析一些实际问题。例如,自1927年海特勒和伦敦运用量子力学理论和方法处理氢分子以来,量子化学获得了长足的进步。海特勒和伦敦研究氢分子的价键,从上述原理来看,属于对个别分子(氢分子)的认识。通过对个别氢分子的研究,化学家们获得了启发和经验,进而又对其他分子进行了研究和处理,如对较复杂的甲烷分子的研究,这时仍然处于个别性认识阶段。正是在这种个别性认识的基础上,量子化学方法逐步被扩展到共轭烃、芳烃等化合物,共轭烃、芳烃,已经不是个体化合物,而是一组化合物;与此同时,价键理论、分子轨道理论和配位场理论各自都获得了发展。可以认为,量子化学理论,已经从个别上升到特殊;进一步发展,可以预计,在进一步扩大特殊性认识的同时,并在特殊性认识的基础上,将会向普遍性认识过渡。量子化学理论,从包括的对象方面说,如何扩大它的范围;从各种化学键理论之间的关系方面看,如何向综合、统一方向发展。这些应当成为摆在量子化学家面前的战略任务。从这点上看,量子化学家不断开拓新的具体方法和理论固然是重要的,考虑和研究更为普遍的方法和理论恐怕也是重要的,甚至可以说是更为重要的。

迄今为止,化学家们有了元素周期律和元素周期系;有些化学家由此联想到,在分子层次上是否也应当进行分类研究呢?元素的分类研究,如前所述,从个别元素到特殊的元素组,又从特殊的元素组上升到元素的周期系。分子的分类应该如何实现呢?迄今为止,这个问题既是一个诱人的问题又是一个有待解决的问题,人们有理由期待历史作出回答。

三、化学认识中的继承、积累、突破和革命

1. 继承、积累、突破和革命

继承、积累、突破和革命，是科学认识发展的形式，也是化学认识发展的形式。继承是指后人承袭前人留下的实验资料，实验和研究方法，思想、理论和观念。在继承的基础上又加上自己的创造，留给后人，如此一代一代传递下去，知识日益丰富，认识不断发展。继承加创造，一代一代传下去，这就是积累。只有继承没有创造，认识只能停留在原有基础上，知识没有增加，认识没有发展，也就没有积累。同样，没有继承也不可能有创造，即使有创造而不能继承，创造的东西失去了，也不可能有积累。总之，继承和创造，继承基础上的创造，创造后的继承，这是科学认识发展中积累的基本因素。

就以化学元素来说，它包含着两个基本方面：一方面，客观存在的元素，它的种类及其性质；另一方面，作为客观存在的元素的反映，即元素概念。这两个方面的发展，都离不开继承和创造，这两个方面的发展都有一个积累过程。

从元素概念方面来看，从古代哲人到化学医疗派人士，都把元素看成组成万物的根本要素，是不能分解为其他物体的东西，而其他物体则可以分解为它、归结为它。近代化学肇始，波义耳继承了这个基本思想，同时又有新的创见。他所说的元素已经不是性质或性质的载体，而是简单的物质或物体；同时，他所说的元素不限于一种、两种、三种或四种，在他看来，凡不能分解，组成其他物体而不由其他物体组成的就是元素，包含了以此判别哪些物质是元素的思想。拉瓦锡又继承了波义耳的元素概念，同时又增加了新内容，他认为用任何方法都未能分解的物质就是元素，并以此为判断标准，具体指出了在当时认识水平上哪些是元素，元素有多少种。道尔顿建立化学原子论以后，一方面继承了元素是不能分解的物质的思想，另一方面把不能分解的这种特性转移到原子上，或者说与原子结合起来，指出了元素和原子的关系，元素是同类原子的总称。如此等等。从元素概念的演化中可以清楚地看到，在继承前人思想的基础上加以发展，而留给后人又为后人所继承，使人们对化学元素的认识不断向前发展，使关于元素的知识不断得到积累。

从元素的实际资料方面来看，人类学会用火以后，在一个漫长的历史过程中，逐步发现了金、银、铜、铁、锡、铅、锌、汞、碳、硫等几种元素，炼金术时期又发现了砷、锑、铋和磷。这样，从古代到 1669 年，总共发现 14 种元素。每发现一种元素就意味着在原有元素基础上增加了一种新元素，关于元素及其性质的资料，就是在继承和发现中不断积累起来的。

近代化学时期，随着化学分析仪器和天平的使用，使化学家们能够把过去难以分解的化合物加以分解，能够把过去不易识别的元素识别出来，从而增加了认识元素的新的方法和手段，发现了新的元素，如钴、镍、锰等。18 世纪初，由于发明了伏打电堆，得到了电流，创造了电解方法，在几十年间发现 30 余种新元素。19 世纪中叶，德国化学家本生和物理学家基尔霍夫合作制成了第一台光谱分析仪，开创了光谱分析方法，随之用这种方法发现了新元素，从 19 世纪 60 年代到 20 世纪初，发现了 24 种化学元素。进入 20 世纪以后，发明了质谱仪，建造了反应堆和加速器，不仅使分离同位素成为

可能，而且还实现了化学元素的人工合成。

关于化学元素及其性质资料的积累，既包含了化学元素及其性质方面的资料的继承和发现，也包含了发现和研究化学元素的方法、手段的继承和创新，这两者是密切联系在一起的，没有方法和手段的创新，也就没有新的元素的不断发现，因而也就没有元素及其性质方面的资料的不断积累。

化学知识的积累达到一定程度，在一定条件下，认识会发生突变或飞跃，这就是人们通常所说的突破。当化学元素的资料有了相当积累的基础上，在客观上就提出了分类要求，经过许多化学家的努力，最后由门捷列夫完成了化学元素的自然分类工作，发现了元素周期律，组成了元素周期系。这使人们对化学元素的认知从经验阶段上升到理论阶段，从现象的认知发展到规律性的认知。元素周期律的发现，是人们对化学元素的认知过程中的突破。

化学认知，如同其他科学认知一样，有积累也有突破。积累是知识的渐进过程，突破是知识的突变和飞跃性发展。但是，积累和突破又不是绝对对立，二者相互联系，相互渗透和相互转化。例如，元素及其性质方面的资料的积累过程中，就包含方法和手段的突破；元素概念演化过程中，在化学原子论建立以后，化学元素概念也发生了飞跃性变化，从一般的不可分解或未能分解转变为实体内容——同类原子的总和。积累，从知识发展的总体上看，也包含突破，因为突破是一种重大创造的形式。

突破的特点是创新。如化学发展中，一个重要概念的提出、确立或重大变化，一种新的有重大影响的方法的采用（如前所述的光谱分析方法的采用），一种重要物质的结构的发现和确立，一种有重大影响的新现象、新规律的发现，等等。这些都是创新，都是化学发展中的突破。

在创新的同时还有破旧，即破除旧的理论和观念，这种形式的突破称为革命。化学发展中的革命，如同科学革命一样，是一种创新，又不限于创新，这种创新是针对旧有理论的创新；同样，化学革命也是一种突破，又不限于突破，它是突破中的一种特殊形式，这种突破是突破旧有理论的界限。在化学发展中，门捷列夫发现元素周期律，是一种创新，因而是化学中的突破；而拉瓦锡建立的氧学说虽说也是一种创新，但它是针对燃素说的创新，在创立新的学说的同时破除了旧燃素说，因而，拉瓦锡实现了化学史上的一次革命。

2. 突破一点，广泛发展

化学中的突破，有一种重要的或基本的形式，就是从最简单、最典型的对象开始突破，在突破之后迅速向其他对象扩张，形成一个范围广泛的研究领域。我们把这种形式称为突破一点，广泛发展。对这种认知的发展形式进行分析，具有重要的认识论和方法论意义。

还是让我们从具体问题的分析入手来进行讨论。

众所周知，自从人们将有机化合物与无机化合物区分开来开始，化学家们逐渐发现有机化合物的多样性和同一性。多样性指的是有机化合物千差万别；同一性指的是，虽然有机化合物看起来多种多样，异常复杂，但分析其组成，大多含有碳和氢。因此，有机化学曾被看作研究碳氢化合物及其衍生物的化学。这就意味着，碳氢化合物是有机化合物的基本形式，而碳氢化合物中最简单的是饱和烃，它们构成有机化合物中第一个同系列。凯库勒正是从这个最简单的同系列出发，提出了结构理论的两个基本原理，即碳是四价

元素，碳原子具有能相互结合的性质。这样一来，碳氢化合物的组成和结构就得到了简单的说明。正如 L·迈尔 (L·Meyer) 所指出的：“由于确立这两个原理，一切可能的碳化合物的式子的排列也就确定下来了。至于这些式子的书写方式，只是组合、排列和变化的计算问题，而这个问题是早已解决了的，把这种方式应用到具体场合，并不需要特别的敏感或很大的发明才能。”这就是说，一旦得出了碳氢化合物中原子的结合规律，那么，其他碳氢化合物及其衍生物中原子的结合方式，也就能够得到说明了。

在凯库勒从事科学活动的时代，有机化合物被称为碳的化合物，而碳的化合物被分成两大族：石蜡烃及其衍生物形成很大一族化合物，名为脂肪族化合物，这是由于这一族中最初受到仔细研究过的第一批成员是一些脂肪酸。由脱去石蜡烃的氢而衍生出来的化合物，有时被称为不饱和化合物，凯库勒称其为乏碳化合物；碳化合物中的另一族化合物称为芳香族化合物，因为这类化合物在自然界大多数存在于挥发性的香精油、树香脂及其他具有香味的物质中。后一类化合物与前一类不同，它们含有比较多的碳，凯库勒将它们称为多碳化合物。

1865 年，凯库勒在《关于芳香族化合物的结构》一文中提出，在所有芳香族化合物中有一个相同的原子团，或者说，有一个含有六个碳原子的共同的核，在这个核内，碳原子结合得更为紧密，它们被安排得更为紧凑，这也就是芳香性化合物含碳较多的原因。1866 年，他在《化学和药学年鉴》上发表文章，指出 C_6H_6 中的六个碳原子结合成一个完全对称的形式。

从芳香性概念和芳香族化合物化学的发展的观点来看，苯（即凯库勒所说的由六个碳原子组成的核）是芳香族化合物中最简单的成员，又是这类化合物的母体。按照肖莱马的说法，“苯可称为芳香族中的沼气，因为当其中的氢原子被其他元素或基团所取代时，就会从苯衍生出这个族的所有其他化合物”。凯库勒抓住了这个族中最简单、最有代表性、因而也就是最典型的一个化合物——苯，研究了它的组成，构想出了它的结构，并写出了它的可能的结构式，实现了突破，使得即使是简单的苯的衍生物的化学也成为一块未开垦的处女地，而且使他提出的苯的结构理论转变成一个丰盛的田园，它的发展前途是不可限量的。这段历史充分表明，抓住关键问题实现突破，可收到突破一点开发一片的效果。

如果说苯是芳香性化合物中的最简单的成员和母体，甲烷则是脂肪族化合物最简单的成员，也可以说是这类化合物的母体。范特霍夫正是以这个最简单的有机化合物建立起空间结构理论的。他设想，甲烷分子中两个氢原子被 R_1 基团取代，按照当时已知的平面结构概念应当存在两种异构体，这与事实不符；如果把碳原子的四个价键看作直接指向一个四面体的四个角，碳原子处于四面体的中心，由此推出的结论与事实相符。从这点出发，可以推及其他，使分子的化学结构从平面发展为立体，开辟了空间化学研究领域。

就一般分子而言，除单原子分子以外，氢分子是最简单的分子，它只有两个原子核和核外的两个电子。分子的共价键理论，或者准确地说，分子的价键理论就是用量子力学的薛定谔波动方程处理氢分子开始的。1927 年，海特勒和伦敦建立了氢分子的薛定谔方程，并用变分法求出近似解，从此开

转引自肖莱马：《有机化学的产生和发展》，潘吉星译，科学出版社，1978 年版，第 83 页。

肖莱马：《有机化学的产生和发展》，潘吉星译，科学出版社，1978 年版，第 113 页。

始了量子力学在化学键理论研究中应用。他们处理氢分子的方法基本正确，但是，定量结果与实验数值相差较大，王守竞、罗逊及其他一些化学家改进了处理方法，使定量结果与实验值步步逼近。1933年，詹姆士和库立奇发表的结果为4.70eV，能量曲线最低坐标R为0.740Å，实验值分别为4.72eV和0.742Å，较之海特勒和伦敦求得的数值(3.14eV, 0.87Å)有了较明显的改进。海特勒和伦敦提出了氢分子成键理论之后，这种处理方法很快被推广到其他双原子分子和多原子分子，形成了价键理论。30年代初，在价键理论发展的同时，又建立了分子轨道理论。由此递进，开辟了量子化学的广泛研究领域。

类似于上面列举的事实，在化学发展中还有很多，如元素概念的确立，分子概念的提出，电解方法、光谱分析方法等的发明，放射性元素的发现，等等。仅从上面简要叙述的事实，就足以说明突破和发展的关系了。

上面叙述的事实，都具有关键性发现的特征。这里所说的关键性发现，带有突破性质，是化学发展中的创新。这种关键性发现往往导致一个新的研究领域开拓，一个新学科的建立，一种新的基础的奠定。

这种关键性发现或突破，常常是从对最简单或最典型的对象进行研究开始的，一旦从这种研究中取得成果，实现突破，就会向广度扩张，形成广泛发展的态势。在广泛发展中，从最简单或最典型的对象研究中所取得的成果，就起着示范作用，并结合新的比较复杂的对象使认识获得发展，使之继续深化和具体化。突破一点，广泛发展，是认识从简单到复杂发展的一种表现形式。一般地说，认识总是从简单到复杂发展的。简单的事物比较容易认识，只有先认识了简单的事物才有可能进一步认识比较复杂的事物。简单和复杂是相对的，是相比较而存在的，是针对具体研究背景而划分的。如前所述，CH₄比C₆H₆（苯分子）简单，C₆H₆（苯分子）在芳香性化合物中是最简单的，如果就量子力学研究化学键这种场合来说，H₂是简单的，苯分子和甲烷分子都是复杂的。先认识简单事物或对象后认识复杂的事物或对象，也是针对具体认识场合而说的。在研究芳香性化合物结构的场合，苯是最简单的，而应用量子力学理论和方法研究分子中的化学键的场合，H₂（氢分子）则是最简单的。显然，在构思芳香性化合物的结构时，如果不先研究苯，而是先研究其他复杂的芳香性化合物，将会遇到许多取代基、支链或环的干扰，同样，在应用薛定谔方程处理分子时，如果不从H₂入手而是从比较复杂的分子入手，将会遇到许多难以想象的困难，很可能使研究工作难以进行下去。在特定的研究范围内或特定的研究场合，最简单的对象往往也是最典型的对象。在有机化学范围内，CH₄是最简单的，也是具有代表性的，弄清了它的立体构型就具有示范作用；在研究芳香性化合物的结构范围内，C₆H₆（苯分子）是最简单的，也是最典型的；同样，在化学键的量子化学范围内，H₂是最简单的，也是最典型的。如果只从简单性上考虑，H要比H₂简单，用量子力学理论处理起来要比H₂容易些，但是H中没有化学键，它对研究化学键不具有典型性；相反，H₂虽然比H复杂，但在研究化学键的范围内，它既是简单的又是典型的对象。正是由于简单的对象具有典型性、代表性，因而常常成为突破口，从这种对象的研究中获得的成果，包括研究思路、研究方法和得到的具体结果，都具有示范作用，具有启发意义。

这就给人们一种方法论启示：既然认识的发展，常常先在一点上突破，

而后扩大战果，即形成广泛发展的态势。那么，反转过来，作为研究方法，一方面应当善于选择突破口，善于选择典型的对象，实现突破，另一方面，在突破之后，应当以突破口为立脚点，向比较复杂的研究对象扩张。前者固然是科学的重要生长点，可以形成有意义的研究课题，后者同样也是科学发展的重要途径，也可以形成有意义的研究课题。这就是说，作为一位化学家，应当站在化学发展的前沿，审时度势，力求有所突破；当看到其他化学家取得了突破性研究成果时，又应当表现出应有的敏锐，及时地理解新成果的意义，接过突破性研究成果，设立新的研究课题，把研究继续下去。化学的历史表明，突破性的成果不是人人都能取得，而在突破以后的工作，却是许多人可以做的；常常是少数杰出人物实现重大突破，众多化学家接过接力棒传递下去，使突破性成果结出更多的果实，形成一个内容丰富的研究领域，使点连成线，连成面，形成体系。

3. 化学中理论和观念的变革

理论和观念的变革，也具有突破性质，但又不完全等同于突破。理论和观念的变革，实质上是科学发展中的革命。因为理论和观念的变革，意味着从旧理论、旧观念转变为新理论和新观念。变革表示破旧立新、推陈出新。科学史中讲的科学革命，也是理论、观念的变革，是科学中的破旧立新。在这里，我们没有采用革命概念，而采用变革概念。革命应当是科学发展中重大的、影响深远的变革，而变革则可以有大的变革，影响深远的变革，也可以有小的变革、只在一个较小的研究领域中有影响的变革。

在化学史上发生过多次变革。第一次变革当属关于燃烧理论的变革。人类自学会用火就开始接触了燃烧现象，人们对燃烧现象提出的第一种系统的理论是燃素说。众所周知，18世纪初，施塔尔接受前人的思想提出了燃素说。按照这个学说，一切可燃物中都含有燃素，可燃物燃烧时，从中释放出燃素，因此，可燃物的燃烧过程，被看作是可燃物分解的过程。依据这种学说，不仅能够解释物质的燃烧、金属的煅烧及它们的逆过程，而且能够解释许多其他化学现象，如酸的生成，金属在酸中的溶解，金属在酸溶液中的置换等。这个学说使化学从炼金术中解放出来，并统治化学近百年之久。在燃素说统治下通过化学实验逐渐积累起日益丰富的资料，又为推翻燃素说准备了条件。

其实，在燃素说建立时，已经存在反常事件，也就是与燃素说不相符合的事实，这就是金属在空气中焙烧时重量增加，而按照燃素说应当是重量减小。然而，这个事实对燃素说的创立者施塔尔来说是无关紧要的，而且，燃素说的拥护者还可以用燃素具有负重量进行解释。可是，这个事实却引起了拉瓦锡的深思，促使他对燃烧和煅烧过程进行研究，在发现和确认氧的基础上，建立了燃烧的氧化理论。

从燃素说到氧化理论，在燃烧问题上实现了理论变革。这种变革，从认识论观点来看，是从认识外观到认识现实的变革。从直接的外观来看，燃烧过程中烟火升腾，似乎有什么东西分解出来，燃素论者正是把这种外观或外部现象上升为原则，把对外观或外部现象的观察作为建立燃烧理论的基础，从而建立了燃素说。拉瓦锡由于对燃素说产生了怀疑，对燃烧现象进行了重新研究，在实验研究中发现了燃素的对立物——氧元素，揭示了燃烧的本质。从认识论观点来看，拉瓦锡透过可见的外观认识了人们不能直接看到的东

西，使人们的认识离开了直接的外观，从而更接近于现实，使认识不再停留在依据对现实的外观的观察来理解和解释现象，而是依据对外观的透视，抓住了外观下隐藏的实质，反过来解释外观现象。这种变革的结果，使在燃素说形式上倒立着的全部化学正立过来了。外观没有被抛弃，外观得到了科学解释，对外观的观察取得的事实资料不仅没有失去意义，而且成为正确的燃烧理论赖以建立的事实的一部分，被抛弃或被推翻的仅仅是不正确的概念——燃素和不正确的观念，如把燃烧过程视为可燃物分解释放燃素的过程，即使在不正确的概念和观念中，也包含有合理的因素。所有这些都以这样或那样的形式为氧化理论继承下来了。正是在这个意义上，理论、观念的变革，也包含着继承性。诚然，首先应当强调变革，从燃素说到氧化理论，是化学中的第一次革命，是理论上的根本性变革，破除了旧的，创立了新的，在创新中破旧，在破旧中创新。正像恩格斯所说的：“在化学中，燃素说经过百年的实验工作提供了这样一些材料，借助于这些材料，拉瓦锡才能在普里斯特利制造出来的氧中发现了虚幻的燃素之真实的对立面，因而抛弃了全部的燃素说。但是燃素说者的实验结果完全不因此而被排除。相反地，这些实验结果仍然存在，只是它们的表述形式被倒过来了，从燃素说的语言翻译成了现今通用的化学的语言，并且至今它们还一直保持着自己的有效性。”

其次，谈谈生命力观念的变革。生命力观念源于生物学中的活力论（Vitalism）。活力论的思想渊源久远，早在原始时代就产生了“万物有灵”的观念，亚里士多德提出的“隐德来希”，原意为在目的中，它意味着某种内在的目的，后来成了活力论的理论基础。活力论认为生命物质和非生命物质有着本质区别，生命现象不能还原为物理、化学规律，生物体中起支配作用的是活力（Vis）。16世纪以后，化学家海尔孟特（Helmont）和施塔尔都提倡活力论。例如，海尔孟特特别重视酵素的作用，他认为酵素是一种潜在的形成能力，它能够配置水的物质使种子和生命得以产生。近代化学家们在从事化学研究中看到了无机物和有机物之间的区别，在暂时还不能用人工方法制备出有机物的情况下，倾向于活力论的解释，这是不可避免的。对于无机物和有机物之间的区别，拉瓦锡已经作了规定，他说：“我已经观察到，在矿物界中，几乎一切可氧化的和成酸的根都是单质；反之，在植物界中，尤其在动物界中，没有一种根不是至少由两种物质——氢和碳——所组成，这些根常有氮和磷与之结合，结果形成四元根。”到19世纪初，贝采里乌斯强调指出了无机物和有机物之间的区别，并且提出能够人工制备的是无机物而不是有机物。据此，他认为，在生物界领域内元素服从的定律，与非生物界中起支配作用的定律完全不同。

1828年维勒虽然作出了一项重要发现，被认为是无机化合物的氰酸铵能很容易地转变成尿素，而尿素一直被认为是动物新陈代谢的一种产物，然而，这种合成毕竟是不完全的合成，而且这个发现在一段时间内还是孤立的事实，因而没有动摇对生命力的信仰。可是，有机合成没有停住前进的脚步，在维勒之后，德国化学家柯尔伯（Kolbe）于1845年首次用木炭、硫磺、氯和水这些单质合成了有机化合物醋酸，法国化学家贝特罗于1854年成功地合

恩格斯：《自然辩证法》，于光远等译编，人民出版社，1984年，第51页。

柏廷顿：《化学简史》，胡作玄译，商务印书馆，1979年版，第61页。

肖莱马：《有机化学的产生和发展》，潘吉星译，科学出版社，1978年版，第16页。

成了属于油脂类的物质，俄国化学家布特列洛夫于 1861 年合成了糖类的物质，有机合成获得了迅速发展。在有机合成实践取得进步的同时，有机化合物结构理论也逐步确立并不断发展，使化学家们树立起一种新的观念：只要弄清了有机界中形成的化合物的结构，就能在实验室中人工合成它。这就表明，一些化学定律既支配生物界，也支配非生物界。由此破除了生命力观念，建立了有机化合物和无机化合物具有统一性的新观念，实现了观念上的变革。

从认识论观点来分析，生命力观念赖以存在的基础，是认为在无机物和有机物之间存在着严格的界限和不可逾越的鸿沟：无机化合物可以人工制备，有机化合物只能由生物体生产出来。生物体为什么能生产有机物质，又是怎样生产的？在科学的幼年时期，对这些问题还很难做出令人满意的回答。于是，人们只好借助于某种特殊作用，把生命现象归结为活力或生命力。“活力”、“生命力”不过是表示人们对生命运动形式还没有研究，还缺乏了解。还是恩格斯说的深刻，他指出，力在许多地方成了一个纯粹的空话，在这些地方，“人们不去研究没有研究过的运动形式，而发明某种所谓力来解释这些运动形式……于是人们有多少种不能说明的现象，便有多少种力，而人们把恰好仅仅是外部的现象翻译成一种最纯粹的空话”；他还特别指出，在有机的自然界中，力这一范畴是完全不充分的，可是人们却不断地使用它，“这种用语的不当引起了生命力的说法。如果这是想说，有机的物体中的运动形式不同于机械的、物理的和化学的运动形式，它扬弃后几种运动形式而把它们包括在自身中，那么这种表达方式是不适当的，特别是因为力它以运动的转移为前提——在这里显现为某种从外部加到生命体里去的東西，而不是生命体内在固有的、和生命体分不开的东西，因此，生命力就成了一切超自然主义者的最后避难所”。

与生命力观念相对立的新化学观念，与生命力赖以存在的基础也相反，新的化学观认为在无机物和有机物之间没有不可逾越的鸿沟，对无机物适用的化学定律对有机物是同样适用的。从认识论观点来看，新的化学观破除了形而上学的僵硬的和固定的“非此即彼”的观念和思维方法，在承认无机界和有机界之间存在区别的同时，也承认它们之间的联系和统一，承认化学规律在有机化合物中的完全适用性，也承认化学规律在生物中的可适用性。因此，这种观念的变革，是从形而上学的思维方式到辩证思维方式的变革，或者说，是思维方式变革在观念上的表现。

应当指出，非生命运动形式和生命运动形式是有区别的，生命运动形式有其自身的质的特点。在这个意义上说，活力论所提出的问题并没有完全失去意义。当代科学对生命本质的认识已获得了突飞猛进的发展，在生物学领域以分子生物学的建立为标志实现了重大突破，人们从构成生命的基本物质——核酸和蛋白质——的结构和功能等方面已经能够对生命现象做出科学的解释。尽管如此，当人们试图用因果律去解释生命自组织系统时，仍然面临许多难题，还原论和整体论之间存在着分歧，这些都与生命运动形式的特点有联系。详细讨论这些问题已经超出了本书的范围，我们在此只能提及这个问题而不能详细说明这个问题了。

恩格斯：《自然辩证法》，于光远等译编，人民出版社，1984年版，第263页。

恩格斯：《自然辩证法》，于光远等译编，人民出版社，1984年版，第263—264页。

第三，关于二元观念。二元观念也与贝采里乌斯的名字相联系。贝采里乌斯是瑞典著名化学家，生于 1779 年死于 1848 年，他一生中，对化学的所有分支都几乎留有自己的印迹，他的实验工作还跨越了许多领域，而他的伟大目标是确立原子学说和二元体系。

贝采里乌斯注意到，自 19 世纪初以来，由于电化学方面的研究进展，金属的氧化物可以被电流分解成金属和氧，溶液中的盐在通电流的情况下，能够分解成为碱和酸，碱被视为电正性的物质，酸被认为是电负性的物质；在此基础上，他进而将这种电性推广到元素上去，因为碱和酸都被看作是氧的化合物，因而他认为氧总是电负性的，是电负性最大的元素，其他元素可以依次排列，最后一个元素是钾，在氢以前的元素为电负性元素，氢以后的元素为电正性元素。这个序列如下：

O, S, N, F, Cl, Br, I, Se, P, As, Cr, Mo, W, B, C, Sb, Te, Ta, Ti, Si, H; Au, Os, Ir, Pt, Rh, Pd, Hg, Ag, Cu, U, Bi, Sn, Pb, Cd, Co, Ni, Fe, Zn, Mn, Ce, Th, Zr, Al, Y, Be, Mg, Ca, Sr, Ba, Li, Na, K.

贝采里乌斯认为，元素的原子都是一个电偶极，同一个原子既含正电荷又含负电荷，然而有一种电荷占优势。不同元素的原子之间互相以电性吸引结合成化合物，而电荷并未完全抵消，有的化合物仍显电正性另一些化合物显电负性，它们彼此之间还能结合。这样，贝采里乌斯以二元学说为基础，建立了电化结合理论。换句话说，贝采里乌斯提出的二元论或称作二元观念，是他的结合理论的基础。

这里所说的二元论，不同于哲学中的二元论。哲学中的二元论，指的是在解决哲学基本问题上的折衷主义观点，例如，17 世纪法国哲学家和数学家笛卡尔提出存在两个彼此独立的实体，一个是灵魂，它的属性是思想，另一个是形体，形体的属性是广延，这是哲学上的二元论。贝采里乌斯的二元论，是对具体化学问题的看法，是从研究化合物是怎样形成的问题过程中形成的观念。这种观点的实质是认为元素的原子都是电极化的，而化合物是由电性相反的元素组成的，复杂的化合物又是由电性相反的简单化合物组成的。所以，这种二元论是与电化学研究成果密切相关的，被称为二元论电化学说。这种学说和观念在 19 世纪前二三十年曾经成为占统治地位的化学观念，对分子概念的确立产生了消极影响，起了阻碍作用。

众所周知，随着化学研究的进展，这种观念越来越站不住脚了，特别是有机化合物的卤代反应的发现，对这种二元学说提出了严重挑战。1839 年，杜马由醋酸制得三氯醋酸，经研究发现，三氯醋酸与普通醋酸十分相象，氯取代氢后，醋酸变为氯代醋酸，后者与前者相比较，物理性质发生一些变化，一切根本性质仍然不变。杜马直接了当地指出，他所发现的事实与贝采里乌斯的学说相矛盾。在有机化学理论的进一步发展，一元论的思想，即把化合物看成一个整体的思想，逐步成长起来，一元论观念取代了二元论观念，为分子概念的确立开辟了道路，从而引起了物质结构观念的重大变革。

在道尔顿创立化学原子论以后，形成了原子——实物的物质结构图景，在化学家及其他领域的科学家的思想观念上，认为自然界中的种种实物形式都是由原子组成的，原子本身是最基本的物质单位，原子之上也不再形成什么微粒。道尔顿之后，阿佛加德罗提出了分子概念和分子理论，在原子和实物之间增加了一个物质层次。其实，道尔顿提出的“复杂原子”实质上是化

合物的分子，然而，道尔顿及与其同时代的一些化学家却不能接受分子概念，除了实验资料积累不够等原因外，还有一个重要原因，这就是电化二元论观念起着阻碍作用。持有这种观念的化学家，包括道尔顿在内，无论如何也不能理解同种元素的原子何以能够结合成分子。分子概念提出以后，经历近半个世纪的坎坷道路，到 1860 年，经过坎尼查罗的理论论证才最终得到化学家们理解和承认。分子概念的确立不仅具有重要的化学意义，使化学中的一些矛盾得以解决，一些混乱得以澄清；而且具有重要的哲学意义，分子概念的确立形成了原子——分子——实物的新的物质结构图景。有些化学哲学文献提出，分子概念的确立是化学中理论观念上的第二次革命。

19 世纪下半期，在电化学和溶液理论研究中，也发生了理论观念上的重大变革。19 世纪 80 年代以前，基于对溶液和电解的研究，在化学家们的头脑中形成了一种基本观念：电解质在溶液中只有在外界电流作用下才能离解成为带电的离子。

阿伦尼乌斯于 1882 年至 1883 年为了改进测定物质分子量的方法开始研究电解质稀溶液的导电性。他在研究中发现，有些物质本身不导电，它们的水溶液却导电，而且溶液越稀导电性越强。为了解释这些现象，他于 1883 年提出了一种设想：电解质在溶液中无需电流的作用就能以两种状态存在，一种是分子的非活性态，另一种是离子的活性态，当溶液被稀释时，非活性态分子更多地转化为活性态离子，使溶液的导电性增强。这就是说，电解质在溶液中，尤其是在稀溶液中，无需外界电流的作用就能自动地离解成带电离子。阿伦尼乌斯提出的电离理论，实质上是自动离解的理论，在他之前的理论是被动离解的理论，是被电离解的理论。自动离解的理论一提出，就受到了传统的被动离解观念的责难和攻击，同时也得到一些化学家的强有力的支持。反对者是多数，支持者是少数，但是事实证明，真理在少数人手里，阿伦尼乌斯电离学说逐渐赢得了越来越多的科学家的承认，而且在离子水化理论中获得了进一步发展。

电化学和溶液理论的发展，以潜在的形式预示了原子的复杂性，到 19 世纪末，以电子和天然放射性等重大发现为突破口，逐渐形成了原子可分性和可变性观念，破除了原子不可分性和固定不变的旧观念，在物质结构观念上发生了一次真正的革命。

与原子概念的变迁相并行，在分子观念上也发生了变革。阿佛加德罗分子假说得到论证、公认和证实，在化学家们的思想上建立起一种基本看法，形成了一种基本观念：分子由原子组成，具有独立性和稳定性。随着现代科学的发展，逐渐发现了分子的质的多样性的形式，正如在第二章曾经简单描述过的那样，分子的独立性壁垒渐渐被冲破了，如“无限体型”晶体，高分子，各式各样的分子化合物（包含物等），都已超出了阿佛加德罗所提出的分子概念了；分子的稳定性也只具有相对性质；至于说分子由原子组成，一方面现在已知存在着单原子分子，另一方面，如果把分子视为一种体系，应当是由原子核和电子形成的体系，在分子轨道理论中，已经将核外电子的运动视为在分子轨道中的运动了。

总之，随着化学的发展，理论和观念不断发生变革，从理论和观念的变革这点上说，化学的历史是理论和观念不断变革的历史。纵观化学理论和观念变革的历史，可以看出有如下几个特点：

第一，化学理论和观念的变革，是破旧和创新的统一。旧和新的矛盾，

首先表现为旧观念、旧理论与新事实的矛盾，但是，应当指出，不是所有的新事实与旧观念、旧理论的矛盾都能引起或都能立即引起理论和观念的变革。有些新事实虽然与原有理论、观念相冲突，但是可以采取特设性修改的方式使新事实与原有理论相协调，从而不引起原有理论、观念的被破坏。所谓特设性修改，就是为克服某种理论困难，对某种事实作出一种特殊的假定性解释，如认为燃素有负重量，就是一种特设性修改。有些新事实虽然与原有理论、观念相冲突，但是，坚持原有理论和观念的人，可以置新事实于不顾，如施塔尔在建立燃素说的时候，对金属煅烧后重量增加的事实不闻不问，阿伦尼乌斯建立电离学说的时候，反对者对于电解质稀溶液导电性增强等事实不予理会，却反对电离学说。有些新事实，既难以做出特设性修改，又难以不闻不问，这样的事实对破除旧理论、旧观念起着直接的作用，这样的事实一出现，就意味着旧理论、旧观念被证伪。例如有机化合物的卤代反应，直接破坏了电化二元学说的基础，有机合成的发展破坏了生命力观念等。

第二，旧和新的矛盾，或新与旧的矛盾，又表现为旧理论、旧观念与新理论、新观念的矛盾。这里所说的旧与新，系指原有的和新提出来的。化学理论和观念的变革，固然是基于原有理论、观念与新事实的矛盾，但是在一些情况下，理论和观念的变革不是直接由新事实、新发现引起的，而是由于有人对新事实、新发现作出的理论解释与原有理论和观念相矛盾引起的。如前所述，阿伦尼乌斯对电解质溶液导电性等进行研究，提出了电解质在溶液中自动离解的理论，与先前人们认为只有在外界电流作用下才能电离的看法发现了冲突。在这种情况下，对于同一研究对象提出不同的相互竞争的理论或假说，它们彼此之间相互竞争、相互比较、相互斗争，逐渐地一个代替了一个，实现了理论、观念的变革。

第三，因此，化学中理论、观念的变革，有不同的表现形式。有的理论或观念，在新事实面前，失去了解释能力，逐步为化学家所放弃，从形式上看，破旧，即破除旧的理论和观念表现得特别突出，前面讲过的生命力观念、电化二元论的变革即属此例，虽然从实质上看，破旧就意味着立新，但立新表现得不突出，给人们的印象不那么深刻，而破旧，原来有那么一种理论，后来失效了，没有人再理会它了，这方面很突出，给人们的印象深刻。有的理论和观念的变革，从形式上看，立新表现得特别突出，如氧化理论取代燃素说，是在建立了氧化理论中破除了燃素说的，没有新理论的建立也就没有旧理论的破除，是在创新中破旧的。理论和观念的变革的第三种形式，破旧和创新都很突出，如电离学说建立以后，两种理论和观念发生冲突，进行争论，在破旧中立新，在立新中破旧。最后还有一种形式，像分子观的变革那样的变革，是逐步发生的，原有的认识仍保持着它的意义，如果不深入研究，似乎原来的认识没有发生什么大的变化，但在实际上，经过逐渐的积累，也就是随着化学和其他科学的发展，原有的认识、原来的观念已经发生了深刻的变革，如分子概念的基本内容，如组成性、独立性、稳定性等，都发生了认识上的深化和改变。

从正确还是错误的关系看，上述几种形式可以分成两类：第一类，理论、观念的变革是从相对错误到相对真理的转化过程，从燃素说到氧化说，从只看到有机物和无机物之间的区别而没有看到它们之间的联系的生命力观念，到既看到二者的区别又看到它们联系的非生命力观念，从二元观念到一元观念，等等，都是从相对错误到相对真理的发展过程，前者是相对错误的认识，

因为“它们是错误的，但不是绝对的、完全的错误，它们之中还包含着一些相对正确的、合理的东西”[1]；第二类，理论、观念的变革表现为相对真理的发展过程，从被动电离的观念到自动离解的观念的变革，从原子的不变性到可变性的观念的变革，从阿佛加德罗的分子概念到现代分子概念的变革，都是相对真理的认识的发展过程，无论前者还是后者，都属于相对真理的认识，它们在一定条件和一定范围来说是正确的，但它们本身又需要进一步深化和发展。其中，分子观念的变革尤其值得注意，这是因为这种形式的变革不容易为人们所注意，另一方面还因为这种变革具有更重要的意义，它提示人们对习以为常的概念、理论和观念，应当结合化学的发展进行批判性思考，以使认识不断深化。

[1] 龚育之：《关于自然科学发展规律的几个问题》，上海人民出版社1978年第2版，第156页。

第六章 化学中的方法

化学中的方法，是化学中的研究方法或认识方法的简称。化学中的研究方法或认识方法，可从两个方面去理解：一方面，从化学方法的特殊性去理解，在这个意义上，化学中的方法是相对于其他科学中的方法而言的；另一方面，从化学中应用的方法的总体去理解，在这个意义上，化学中的方法就不单指化学特有的研究方法，而是指化学中应用的方法，既包括化学特有的方法，也包括适合于化学的其他科学方法，也就是化学和其他科学通用的方法。

在这一章中，我们讨论的化学中的方法，是在一般科学方法和化学方法的结合意义上的方法，这就是说，下面将要讨论的方法在其他科学中也有应用，同时又突出在化学中应用的特点。因此，我们的讨论首先从一些带有普遍性的问题着手，先简略地说明方法、方法论及其与认识的关系。

一、方法和方法论

1. 方法和认识

方法一词来源于希腊（沿着）和（道路），即沿着道路运动之意。后来，人们对方法提出过许多定义。例如，有人提出，方法是实践上或理论上把握现实、为解决具体课题而采用的手段和程序的总和；还有人提出，方法是被移植和被转换成人类意识中的客观规律性；也有人认为，方法是对待现实的方式；如此等等。

这些定义都指出了方法和认识的关系。事实上，方法，或确切地说科学方法，是为认识现实服务的。科学方法和科学认识与科学对象是密切相关的。科学认识作为一种活动和过程，必须依据客观对象的特点进行，科学认识作为一种结果，也就是科学理论，必须反映对象的内容。同样，方法也与对象的内容相联系。黑格尔曾经指出，方法不是某种跟自己的对象和内容不同的东西，因为把自己推向前进的，是自己内部的内容，是内容自身具有的辩证法。

就一定对象而言，理论反映对象的规律性，方法则说明如何依据对象的内容和规律进行认识。这就提出了理论和方法的关系问题。

一般地说，方法和理论有着密切的联系。建立理论离不开方法。门捷列夫创造性地应用比较方法和其他方法，发现了周期律，建立了周期性理论。鲍林在探讨分子结构问题时，善于应用假说归纳方法，即依据量子力学原理提出简单假设，进而通过与已有的化学事实进行对比来验证假设，然后预测新的现象。伍德沃德在对有机化合物结构进行测定过程中，突破了传统的元素分析、化合物反应、相应的衍生物的生成和颜色反应等方法，倡导物理测定方法，他认为“化学家应该经常愿意而且热望尽量利用所有那些会给他们带来更大和更准确的洞察力的实验方法或工具来进行工作”。大凡在化学和其他科学中有重大成就的人，在研究方法上必然也有所创建，而他们在科学上的成就和他们在研究方法上的创造是密切联系在一起的。

科学规律一经发现，科学理论一旦建立，就可以转化为进一步认识的方法。任何一种科学规律和科学理论，首先是认识的结果，是已经获得的知识；其次它又是进一步认识的指南。在后一种意义上，科学规律和理论就表现为认识方法，或者说，它们转化成了科学方法。从这点来看，科学研究方法的一个重要内容是科学理论，或科学理论中包含的规律性认识。应当说明，科学规律和理论本身还不是方法，只有将科学规律和理论作为进一步认识的指南和向导时，才成为研究方法。这一点在化学中表现得尤其明显。就以分析化学中所应用的化学分析方法来说，只要深入加以研究就不难发现，化学分析方法实质上是依据化学研究所获得的规律性认识，主要是依据化学反应的理论而制订的，化学分析方法大都是从化学反应规律转化而来的。由此可以得出进一步认识，科学方法包含着相互联系着的两个方面，我们暂且称之为客观方面和主观方面。所谓客观方面，就是对象的客观规律性，或者确切地说，是已经认识了规律性，是科学理论所反映的对象的规律性；所谓主观方面，则是指在这种认识了规律性的基础上，为实现特定研究目的对这种

规律性的具体的、灵活的应用。

科学方法与科学规律和理论的辩证关系告诉我们，作为一位科学家，不仅要及时了解有关科学中的最新成果，包括最新理论成果，而且还要善于将这些成果转化为进一步研究和探索问题的方法。科学规律和理论与方法的辩证关系还告诉我们，科学规律和理论固然可以转化为方法，但是，这种转化依赖于人的主观能动性，或者说，这种转化突出地表现出了人的认识的目的性、创造性，表现出了人的自觉能动性。我们说人们进行探索时要遵循对象自身的规律性，这是完全正确的，把方法看成纯粹主观的东西，看作是随心所欲的手段，想怎样干就怎样干，这不是唯物主义观点。同时我们也必须承认，人们在研究某个问题时，为了实现研究的目的，在选择具体的途径、方法、手段等方面，又有很大的活动余地，科学方法的创造性常常在这里表现出来。这好比证明一个几何定理或解一个数学问题，数学家首先要运用已知定理，但在已知定理范围内，在哪一步应用哪一条定理，却大有学问；而且，在应用已知定理基础上证明了新定理，同时也创造出了新的证明方法。分析化学中的分析方法，也是在化学研究中创造的，在化学研究中积累了许多引起物质变化的知识，掌握很多化学反应，在应用这些知识和化学反应作为分析方法时，又依靠分析化学家的选择，在什么情况下应用什么手段和方法，这中间也大有学问。合成化学家应用的合成方法，基本的内容是已知的化学反应，就以有机合成来说，化学家们为了有效地合成一种有机化合物，必须依据目标分子并考虑到各种实际要求，选择适当的有机化学反应，然而在哪一步应用哪种化学反应，这中间需要选择，有很大的灵活性和创造性，这中间大有学问。

上述分析说明，方法是要人们去选择、去创造的，方法本身包含着主观能动性，突出地表现出了人的创造性。一切科学方法的背后都充满着积极的创新精神，充满着对知识的渴求和不达目的誓不罢休的劲头。正如爱因斯坦所指出的那样，如果科学家们渴望达到某种特定目标的念头强烈地活跃在人们的心中，那么就不会缺乏干劲去寻找达到目标的方法。相反，如果人们没有这种念头，没有追求清晰理解和达到目标的热忱，甚至根本就不会产生科学方法，即使有现成的方法，到头来也不过是一些笨拙的工具。

说到这里，人们会提出置疑：先获得了认识呢还是先有了方法？这个问题实际上是个蛋和鸡的问题，是先有蛋还是先有鸡的问题。生物进化论对这个问题作出了科学的回答。关于先有认识还是先有方法的问题，科学的认识论也作出了回答。认识和方法是在实践中产生的，是在相互作用中发展的，人们的认识离不开方法，认识过程中既获得了知识也获得了方法，方法是与认识相伴生的。我们前面讲的认识和方法的关系，强调了认识的结果转化为方法，是就现代人的角度而讲的，现代人有幸接受或继承了人类认识的遗产，应当善于运用这份可贵的遗产。即使我们强调要善于将已获得的规律和理论转化为方法，我们也同时指出，在这种转化中也就创造了新的方法。换句话说，科学家们在科学研究中仍在不断的创造科学方法。这就涉及科学方法的来源问题了。从根本上说，科学方法来源于科学研究的实际过程中。人们在科学研究活动中，除了获得一定科学认识成果以外，还积累了如何进行科学研究的经验，总结这种经验，是科学方法产生和发展的基础和条件。

总结是什么意思？就其实质而言，总结就是研究，总结如何进行科学研究的经验，也就是对如何进行科学研究的经验进行分析、概括，从中得出—

些带有规律性的东西。把方法作为研究对象进行专门的研究，建立关于方法的理论或学问，这就是方法论或方法学。

2. 方法论和认识论

方法论，希腊字为 $\mu\epsilon\theta\omicron\delta\omicron\varsigma$ ，河流、学说，因此，方法论意思是关于方法的学说。但是，在有关文献中，方法论这个术语常常有多种含义，或者说是多种意义上被使用着。例如，有时把方法论看作关于方法的理论，也就是把方法作为研究对象而建立起来的理论；有时又把方法论视为指导原则，人们有时说某种理论或某种观点具有方法论意义，意思就是说，这种理论或观点具有指导意义，可以作为观察问题和分析问题的指导原则；还有第三种用法，把方法论理解为具体方法的总和；当然，还能举出在其他意义上的用法。一般地说，方法论主要或常常是在上述三种含义上使用。这一章讨论的化学中的方法，实质上提出了化学中的方法论问题，也就是将化学中的方法作为研究对象进行理论研究，讨论它的特点、辩证关系、表现形式等，是就第一种含义理解方法论的。

化学中的方法论，或简称为化学方法论，它的对象自然是化学中应用的方法，化学方法论就是关于化学中应用的方法的理论。化学中应用的方法，在方法的分类中，属于各门学科所特有的方法。谈到方法的分类，由于分类所依据的原则不同，分类也就不同；若按普遍性或适用性程度来划分，可以将方法分成四类：个别学科中应用的方法，自然科学通用的方法，自然科学和社会科学通用的方法，哲学方法。化学方法属于个别学科中应用的方法，但是，如前所述，实际上不完全限于化学方法，其中有些方法实际上具有一定程度的普遍性，如化学中的实验方法，不限于化学，其他自然科学学科也应用，诚然，化学中的实验方法有其特殊性。又例如，化学中的数学方法，形象思维方法，等等，恐怕不仅不限于化学，而且也不限于自然科学了。因此，上述划分只具有相对意义。

方法论或化学方法论，本质上是关于认识方法的理论，因而与认识论有着密切的联系。从这方面来说，化学方法论要研究与化学认识有关的方法；另一方面，化学方法论中的“论”是什么意思呢，从认识上来看，这个论是理论，是认识论，是马克思主义的认识论。事实上，研究化学中的方法，离不开一些基本关系或范畴，如客体和主体，经验和理论，相对和绝对，抽象和具体等，这些都是认识论范畴。由此可见，讨论化学方法论问题，不能脱离化学和哲学的关系。化学方法论，作为化学方法的理论，从本质上说，就是应用马克思主义认识论总结化学研究的经验而得到的理论。

说到这里应当讲讲应当如何对待总结研究经验的问题。在我国，一些科学家，尤其是一些老科学家，结合自己的研究工作学习马克思主义哲学，有收获有体会，写出总结性文章，以提高认识、深化认识，同时也与其他科学家进行交流。这件事是一件好事、有益的事。可是，对这种总结个人研究体会的文章，有些人或不以为然，或有微词，认为是“马后炮”，是在科学上取得了成果以后再与哲学原理对号。对此，本书作者有些不同看法。首先应当指出，科学家们在科学研究过程中，思想是很活跃的，应用的方法也是多种多样的，无论成功或失败，科学家本人经过艰苦的研究过程，在思想方法上和研究方法上有些体会，有所顿悟，这是非常珍贵的、非常有价值的经验，在研究工作告一段落以后，回顾一下，并尽可能从理论上总结一下，将会使

经验、体会得到升华，有利于进一步的研究工作。从认识过程来看，总结总是“马后炮”，总是先有了实践经验，有了体会，才好进行总结，这是合乎认识规律的，要求总结经验“马前炮”是不适当的，是违背认识发展规律的。对研究方法的认识，如同对其他事物的认识一样，只能在实践的基础上提高，在提高的指导下进一步实践，也就是毛泽东所论述的，实践、认识、再实践、再认识，通过实践和认识的循环往复，认识获得深化、发展和提高，舍此没有其他路可走。即使是学习现成的方法，也需要结合自己的实践，这是很容易理解的。其次，总结有深浅之分，有高低之别，这也是事实。人们希望总结得深入一些，水平高一些，这也在情理之中。然而，如何才能总结得深入些、水平高些呢？这取决于三个条件：第一，体会得深才能总结得深；第二，理论水平高些，总结得水平才能高一些，理论水平主要指哲学水平，要总结研究方法的经验，掌握一些有关认识论的原理是必要的，而且认识论学习得越深入，对自己的经验和体会认识的可能也越深刻；第三，总结经验也是一个过程，是个学习过程和研究过程。从这三方面来看，对于总结经验者应当呐喊助威，并向他们学习，而不应当泼冷水，即使由于缺乏练习，总结文章写得不那么深入，也应认为这是一个过程，不应采取简单否定态度。

二、战略和战术

1. 战略问题和战术问题

什么是战略问题，什么是战术问题？毛泽东说：“战略问题是研究战争全局的规律的东西。”他又说：“只要有战争，就有战争的全局”，“凡属带有要照顾各方面和各阶段的性质的，都是战争的全局”。

战略问题是全局性问题，全局是相对的，有大有小，无论大小，凡属全局，都要照顾各方面和各阶段的关系。通俗地说，所谓战略问题，就是全局性问题、总体性问题。相对于战略问题，战术问题则是涉及局部性的问题。

战略问题和战术问题是密切相关的。局部性的东西是隶属于全局性的东西，从这个观点来看，战略问题决定着战术问题。另一方面，全局性的东西又不能脱离局部性的东西而存在，全局是由局部构成的，战略问题要通过战术问题来体现来实现。这个关系说明，着眼于全局问题的人，首先应当研究战略问题，但也不能忽视战术问题；反之，着眼于局部事物的人，研究战术问题固然重要，但也不能忽视研究战略性问题。这不仅是因为全局性本身具有相对性，而且还因为只有了解了全局才能更深刻地认识局部，恰当地处理局部。科学研究工作，国家的科学事业是一全局，一些研究院所是局部，而对院所而言，它又是一全局，内部的研究室是一局部。在下面，着重讨论战略问题。

有人可能会产生疑问：化学研究又不是打仗，为什么要提出和讨论战略问题？

其实，化学研究，或者一般地说，科学研究，在许多方面很像打仗。众所周知，科学研究是探索性活动，是获取新知识的认识过程。从认识论上看，作为探索性活动的主体具有两重性：一方面，表现为科学家个人或集体；另一方面，这个科学家个人或集体又具有了人类的资格，或者说，个人或集体代表了人类在一定时期的认识水平。当人们说牛顿发现了万有引力定律，凯库勒发现了苯的结构，门捷列夫发现了元素周期律，伍德沃德和霍夫曼发现了对称性守恒原理等等的时候，一方面指的是这些科学家的发现和成就；同时，另一方面则是指在他们之前没有任何人发现相应的定律，在人类认识史上，他们中的每一个人都是开天辟地第一个做出了发现，因此，他们每个人的发现都代表了人类的第一次发现，代表了人类认识所达到的水平，他们中的每个人都以人类的代表充任科学认识活动的主体。

既然如此，科学家个人之间，科学家集体之间自然存在着竞争，看谁能够最先达到人类认识的最高水平，谁能够取得代表人类认识最高水平的资格。除此之外，在应用研究和开发研究中，与经济效益和社会效益联系密切，这种竞争表现得更为激烈。在当代，不仅在个人之间，集体之间存在着这种竞争，在国家之间同样存在着这种竞争。为了能够在竞争中取胜，如同在战争中一样，必须有正确的战略，必须研究战略问题。

事实上，一个国家有个发展科学事业的战略问题，一个研究集体，如研究所、研究室也有个发展战略问题，一个人即个别科学家，同样也有个如何进行课题研究的战略问题。

一个国家、一个集体的科学发展战略，是科学组织工作者必须研究的，通常的科学发展规划就能体现出规划制订者的战略指导思想。例如，1982年，美国全国研究委员会的化学科技部筹组的规划委员会提出建议，对化学进行一次新的调研，并获得批准。经过广泛、深入的调研，完成了一个报告，于1985年发表，题为《化学中的机会》。这个报告就是美国化学发展的宏伟规划，它体现了报告制订者的战略思想。如关于个人创造和规划的关系，该报告称，美国科学的实力一直建立在这样一个基础上，即允许有创造性的、正在从事研究工作的科学家，独立地选择自己认为最有前途的、能够获得最有价值的新知识的研究领域。历史已经表明，许多影响深远的科学进展，无论是理论性的还是应用性的，都来自难以预料的方向。从这方面看，列出优先发展的领域，也许会阻止甚至扼杀某些最先进的、目前尚未认识到其潜在意义的新方向。但是，该报告又认为，尽管如此，把一部分资金集中于特别有希望的研究领域还是合理的。报告提出，应当把研究资金看作是一种旨在获取最大利润的投资计划，这项投资的主要部分应集中于公认的优先领域，同时应当具有灵活性，也就是应鼓励把随时出现的新的前沿领域纳入业已开列的优先领域清单中。这些充分体现了一种战略思想，就是照顾公认的优先研究领域和未来发展中的新方向之间的关系，国家规划和个人创造性之间的关系，为此，要坚持将必要的规划和必要的灵活性相结合。这里说的仅仅是一个例子，在该报告中还提出和体现了其他一些战略思想，不再一一列举和详述。

科学家个人的研究战略，是每位科学研究工作者、每位科学家应当关注的。从方法论角度来说，研究工作者和科学家的研究战略，应当是科学方法论讨论的主要内容。如果说上述的科学组织工作者的发展战略，通常体现于发展规划和工作指导上，那么可以说，科学研究工作者的研究战略，主要体现在科学思想和研究工作之中。在这一节所说的化学研究中的战略问题，主要指的是研究工作者，即化学家的研究工作中的战略问题。下面，就这个问题作进一步说明。

2. 化学研究中的战略问题

从方法论的角度说，作为一位化学家在实际研究工作中总要考虑两个基本问题：研究什么？怎样研究？这两个问题都关系到研究工作的全局，都涉及总体问题，都需要从总体上进行思考。

研究什么？涉及研究方向和研究课题，这无疑是研究工作中的一个至关重要的问题。这个问题涉及诸多方面的关系及其发展。一般地说，至少需要讨论两种关系：研究方向与化学发展和社会需要的关系；研究方向与研究课题的关系。

化学家的研究方向与化学发展的趋势、社会对化学的需求有着密切联系。举例来说，当代无机化学的发展趋势是在无机化学与其他科学的交叉领域出现生长点。例如，由于化学家和生物学家对于元素在生物体中的重要作用获得了日益增多的知识，使人们认识到生命的一些基本过程，如太阳能的吸收与转化，氧的传输与消耗，细胞间的电信号的交往等，都依赖于各种金属离子。由此形成了生物无机化学的研究方向。在这个方向上可以产生一系列值得研究的问题，如具有有机配位键的金属原子周围的结构是怎样的，在生物体中是怎样进行化学反应的，等等。这些问题经过一些分析和转化，就

有可能形成研究课题。又例如，固体化学和无机化学交界处也是化学发展的诱人的生长点。现代化学和现代技术的发展，使化学家有可能了解表面的结构，了解表面上什么地方以什么方式与一种化学物质相连。在这个方向上开展研究工作，可望获得有价值的成果，而这方面的研究成果不仅具有理论意义，而且具有实践意义，它涉及半导体及电子芯片的制备。

这些例子说明，研究课题与研究方向直接相联系，而研究方向来源于化学家们对化学及其各个分支学科发展趋势的深切了解。因此，在确定研究什么的问题上，需要了解全局性的东西，需要在了解全局的基础上从总体上进行思考。这些都属于研究工作中的战略性问题。我们可以将上述内容用一句话来概括，这就是“了解发展趋势，确立战略目标”。了解发展趋势是确立战略目标的基础和前提，一位研究工作者，尤其是学术带头人，如果不了解，不熟悉本专业（及相关专业）的发展趋势，就不会有清醒的头脑，也就不可能及时发现化学发展的新的生长点，因而也就不可能抓住可望获致巨大成果的研究方向和课题。确立战略目标是了解发展趋势的结果和目的，对本专业（及相关专业）的发展趋势很熟悉、很了解，但是不能从中抓住所要研究的内容，也是无济于事的。在这个具有或属于战略性问题上，需要研究人员具备战略头脑和战略眼光。在化学和科学史上，有许多杰出的化学家或科学家，在这个问题上显露了令人敬佩的战略头脑和战略眼光。例如，居里夫人和卢瑟福等人，在本世纪之初，抓住了刚刚崭露头角的放射性作为研究方向，做了多方面的开创性工作，获得了许多发现和研究成果。卢瑟福于1908年、居里夫人于1911年分别荣获诺贝尔化学奖。在第二次世界大战期间，美国有机化学家伍德沃德从战场上奎宁短缺和有机化学的发展趋势中看到了人工合成天然产物的前景，他与多林博士于1943年2月1日开始合成工作，14个月后完成了奎宁的人工合成，从此开始了他在有机合成领域的研究工作。伍德沃德以合成天然产物闻名于世，并因在有机合成上作出的卓越贡献，于1965年荣获诺贝尔化学奖。

关于怎样研究的问题，似乎不是战略问题而是个战术问题。爱因斯坦和英菲尔德在《物理学的进化》一书中有一段常被人们引述的话，内容是：“提出一个问题往往比解决一个问题更重要，因为解决一个问题也许仅是一个数学上的或实验上的技能而已，而提出新的问题，新的可能性，从新的角度看旧的问题，却需要有创造性的想象力，而且标志着科学的真正进步。”人们引用这段话的目的往往主要在于说明，提出和确定研究课题（即研究什么）在整个研究过程中所占的重要地位，提出和确定有重大意义的研究课题是研究工作中具有战略性的一环，或者说是研究战略的起点，需要研究者具有远见卓识，具有战略眼光。诚然，如上面已经说过的，这段话中指出的“提出一个问题往往比解决一个问题更重要”是有道理的，因为它是科学研究的起点，无论从经济技术要求方面来看，抑或从科学本身的发展来看，课题的形成和选择都是研究工作中最复杂的一个阶段，所以评价和选择课题，便成了研究战略的起点。

但是，在强调提出和确定课题的重要性和复杂性的时候，不能由此得出结论说解决问题不重要、不复杂。解决问题涉及怎样研究的问题。怎样研究，对于一些问题而言“也许仅是一个数学上的或实验上的技能而已”，在这里

说的是“也许”而不是“一定”。事实上，即使是数学上的或实验上的技能，也决非简单之事，数学推理需要思路，有时需要有创造性，实验首先需要设计，设计好才能做，才是一个操作过程，或者说是个技能问题，而实验设计是需要创造性的。何况，面对已经确定的研究课题，一时不知道应该怎样研究、怎样解决的事是很多的。有些课题提出以后，不只耗费了个别科学家的毕生精力，甚至使几代科学家呕心沥血，为之奋斗终生。

怎样研究，有人认为这仅仅是研究者如何运用研究方法的问题。可是，在实际研究工作中，研究者们决不是孤立地应用一个一个方法，也决不是像一般方法论教科书所说的那样去应用个别的研究方法；研究者在研究一个问题时，一般地说总有一些想法，一些总体上的考虑，基于这种想法和考虑综合地或重点地应用有关的研究方法、部署研究工作。这种想法和考虑起着选择、协调和综合各种方法的作用，或者说，各种有关的研究方法在总的想法和考虑的统帅下活跃起来，发挥着它们的积极作用。正因如此，怎样研究的问题，怎样有效地应用各种研究方法的问题，也有个全局性的东西，因而也是个战略问题。在这里说的总的想法和总的考虑与科学家的科学思想有密切的联系。下面我们就来讨论科学思想。

3. 化学家的科学思想

什么是科学思想？我们在这里讲的“科学思想”是一个含义广泛的概念，它是科学家在实践和已有理论上形成的、对他们的研究对象或具体问题的总的看法、总的想法。从认识论上说，科学思想是人的自觉能动性在科学研究中的具体体现。马克思早就说过，人在劳动过程结束时得到的结果，在这个过程开始时就已经在劳动者的表象中存在着，即已观念地存在着。毛泽东也曾指出，一切事情都是要人去做的，做就必须先有人根据客观事实引出思想、道理、意见，提出计划、方针、政策、战略战术，方能做得好。思想等等是主观的东西，做或行动是主观见之于客观的东西，都是人类特殊的能动性。这就是说，人具有自觉的能动性，人的活动是一种有目的、有计划的创造性的活动，人在实践活动以前，不仅先规定了活动的目标，而且为实现这些目标预先规定了或多或少首尾一贯、相互协调的活动方式和步骤。科学家在进行科学研究时，也具有或更具有这种自觉的能动性，他们的研究工作总是在某种思想指导下进行，这种思想不同于一般的思想，它是在科学工作中、在研究实践中形成的，并与科学内容密切结合的，并与科学工作者的科学理论素养、专业训练密切联系着的思想，这就是科学思想。

科学思想的含义很广泛，概括地说，包括科学家的科学信念和研究思路等等。其中，有些与具体的科学理论有关，有些则与哲学思想发生了联系。

科学信念是科学工作者对于科学认识活动，对于他们所面对的研究领域和研究对象等问题的一些根本看法和根本观点。科学信念是在科学认识活动中形成的，它一经形成就对科学工作者的科学研究工作产生影响。科学信念与科学理论有联系，又高于科学理论，它近于哲学观点，或简直就是科学工作者的科学观，即哲学观点在科学问题上的具体表现。例如，门捷列夫在谈到他如何发现周期律时指出，当他考虑物质的时候……总不能避开两个问题：多少物质和怎样的物质，就是说两种观念：物质的质量和化学性质……因而自然而然就产生了这样的思想：在元素的质量和化学性质之间也一定存在着某种联系，物质的量既然最后成为原子形态，因此就应该找出元素特性

和它的原子量之间的关系；他还说：“依我看来，这两方面的联系，是应当把化学家引出现代的、数量相当可观的，但往往是片面的资料的迷宫的线索。我自己也力求找到这种联系，这种联系是元素周期系的基础，我的全部论述都服从于这个周期系统。”这些说明，在门捷列夫看来，化学元素的化学性质和原子量是客观的，是有着密切联系的，这种联系是可以认识的，科学研究的目的就在于揭示这种联系，从而使零散的元素资料系统化。这些就是门捷列夫对于元素的根本看法，表现为他的科学信念，正是在这种信念的促使下，他苦心研究，锲而不舍，既不满足于元素的人为分类，也不满足于元素的按原子量增加的机械排列，最终发现了元素周期律。我们可以设想，假如门捷列夫不具有这样的信念，而是相反，如果他认为元素仅能作人为分类，那么他就不会孜孜以求，也不会发现周期律。同一位门捷列夫，在晚年，受传统观念束缚，认为元素是不可变的，不能转化的，这种思想影响了他对于元素转化问题的认识，甚至不能接受元素转化的观念。

研究思路是在确定研究课题以后，科学研究工作者依据自己的理论素养和研究经验对课题该怎样进行研究做出的总体设想和预测。正如前面刚刚说过的，研究工作者在研究课题面前，一般都不会立即投入具体的研究，在此之前总要有个通盘考虑。如果是个实验问题，首先要对实验的可行性和前景有个估计，对实验进行总体设计；如果是个理论研究的问题，也要首先对解决的途径、理论的选择等有个总体设想。例如，伍德沃德在确定目标分子以后，总是要依据已有的有机化学理论和自己的经验，对于要合成的分子是否能够合成作出判断，对合成的步骤进行全面、细致的考虑。经过判断和构思，对合成的前景充满信心，在具体合成过程中敢于向一切困难挑战，战而胜之，直到达到预定目标。应当说，这是伍德沃德在有机合成上不断取得成功的重要经验。如果不首先进行判断和构思，不用说具体工作无从着手，即使投入研究，也有很大的盲目性，甚至耗费了精力、时间和材料，得不到预期的结果。世界上一些杰出的化学家的成功之道，莫不与此有关。

应当指出，研究思路是与科学发展水平和所研究的问题的性质、特点有联系的，研究思路不是任意设想出来的。这就是说，对某项课题该怎样进行研究的总体设想和构思，要有客观依据，不能单凭主观上的好恶。举个例子来说，从海洋软体珊瑚中分离出的珊瑚虫毒素，是已知的最毒的毒物之一，有机化学家们试图合成这种毒素。该怎样合成呢？首先要建立珊瑚虫毒素的立体化学结构。但是，由于还没有得到该种物质的结晶品，所以不能用X射线分析方法测定；又由于该物质的结构太复杂，用核磁共振也不能获得结果。在此情况下，化学家们最初可能采取的战略，是在温和条件下小心地把珊瑚虫毒素降解成许多可以操作的小片断，使每个小片断能够保持其原来的立体化学结构；然后从已知活性试剂合成每个片断的各种异构体，并寻找与天然产物片断相匹配的异构体，需要合成20个关键的降解产物的各种异构体，以检测天然产物的结构。这个实例说明，对于珊瑚虫毒素结构的研究的思路，是建立在该毒素的复杂性和已有研究条件的基础之上的，因此，正确的研究思路来源于对研究对象的正确了解，来源于丰富的化学知识和经验，来源于对已有的技术和手段的理解和应用技能，离开这些，就谈不上正确的研究思路。

上述说明，科学信念和研究思路是密切相关的。科学信念不仅影响着研究什么，而且决定着怎样研究，而研究思路把科学信念具体体现出来，特别是在怎样研究上具体体现出来。门捷列夫坚信元素之间有规律性联系，坚信元素的化学性质和原子量之间有着密切联系，而且这种联系可能导致元素之间规律性联系的发现。这种信念促使他决心去研究元素的分类问题；同时，这种信念也促使他从元素自身的性质和原子量之间的联系出发，进行反复比较和试探。

无论是科学信念还是研究思路，都是从总体上看问题的，因此，从方法论上讲，都属于研究战略问题。在这些问题上的正确与否对研究工作有决定性影响。科学信念上的偏颇可能导致在研究什么和怎样研究上的失误，研究思路上的错误有可能使研究工作陷入困境。应当着重指出，科学信念和研究思路，或者说，科学思想，毕竟是在实践中、在学习和研究中逐步形成的。一方面，科学思想具有其客观基础，另一方面，它本身不应当是固定不变的。作为一个聪明的研究工作者，不应当墨守陈规；相反，应当在新的课题研究中检验原来的想法，补充或修改原来的想法，使自己的科学思想不断得到发展。如果实践证明原有想法有问题，比如原有的思路走不通，就应当认真检查、鉴别，必要时要修改原来的思路。但是，无论具体情况多么复杂和多变，研究工作者在研究工作中总有自己的科学思想，他的研究工作总是在某种科学思想指导之下进行，并贯穿于他的研究工作的始终。没有科学思想的科学家是不存在的，没有科学思想指导的研究工作是不可想象的，只不过有些科学工作者自觉地意识到了这一点，有些科学工作者虽有自己的科学思想但没有自觉意识到它。我们在这里提出和讨论这个问题，不仅指出了实际的情况，而且试图使人们注意这个问题，使无意识的变为有意识的，并能够通过各种可能的途径树立正确的科学思想，发挥它的指导作用。

在讨论了化学研究方法的一般性问题以后，就可以进一步研究化学方法的特点及其他有关问题了。

三、经验归纳和理论演绎

经验归纳和理论演绎是化学的基本方法，是化学实验和化学理论相互关系在方法上的表现形式。从认识角度看，化学认识的基本矛盾可以概括为化学实验和化学理论的矛盾；从方法论角度看，化学的基本方法是经验归纳和理论演绎。

1. 经验归纳

经验归纳，指的是经验和归纳的结合，详细地说，就是通过科学实验获取经验事实，积累经验事实，进而对经验事实进行分析、总结和概括，形成定律、假说或理论。在这里涉及两个基本概念：一个是事实，一个是归纳。

事实，或确切地说科学事实，通常有三种含义：第一种含义，指的是对象本身，就是客观对象，可以叫做客观事实；第二种含义，指的是观察、实验中获得的数据、资料、数据等，是对客观事实的初步确认和描述，相当于感性认识，这就是我们所说的经验事实；第三种含义，泛指不能推翻的理论、原理，可以称为理论事实。通常说的观察事实，实验事实，都属于经验事实。经验事实已经是对客观事实的认识和反映，同时又是进一步研究的基础。毛泽东在《实践论》中指出，认识过程的第一步是获取感性认识，第二步是综合感觉材料造成概念，上升为理性认识；他同时又指出，只有感觉材料十分丰富和合于实际才能根据这些材料造出正确的概念和论理来。这里所说的感觉材料就是经验事实。

归纳是从个别性经验事实中概括出一般性原理的方法，是认识从个别到特殊进而到一般的过程。依照逻辑学原理，如果经验事实（在逻辑上表述为观察陈述）数目很多，而且经验事实可以在实验中重复，而且没有任何公认的相反的经验事实，那么就可以从中概括出一般性的结论来。这种概括可以表述为：如果大量的 E 在各种各样的条件下被观察到，所有这些被观察到的 E 无例外地具有性质 B，于是可以说所有 E 都有性质 B。

经验归纳是从经验事实中概括出定律和理论的方法。自波义耳以来，化学家们从自身的研究实践中认识到，化学实验是化学认识的来源和基础，化学中的定律、假说和理论的建立、证实或否定，都离不开化学实验，离不开化学实验中获取的经验事实，同时，化学认识又不能停留在经验事实上，必须进一步从中概括出一般性认识，因而在化学研究中逐步形成了经验归纳的认识传统。正是由于应用了经验归纳法，才逐步发现和确立了一系列定律，提出了许多假说，建立起许多化学理论。许多重要的化学定律，如波义耳定律、盖吕萨克定律、定组成定律等，无不是在化学经验事实基础上归纳而得出的。化学中的经验归纳传统经久不衰，在现代化学中，仍然起着重要的作用，仍然受到化学家们的重视。例如，蒋明谦指出，现今已知的有机化合物已达 500 万种以上，“所有的有机化合物几乎都有这种或那种同系物，因而它们都包括在这种或那种同系关系之中。利用这种关系，不但可以将几百万种有机物分门别类地归纳为若干有条不紊的体系，也可以通过它们的结构和性能关系，根据少数化合物的性能来预计无数未知化合物的性质，以便有效地选择具有人们所需性能的化合物”。蒋明谦通过对不同类型的化合物的物

理化学性能的递变现象的研究，发现了同系递变线性规律。又例如，近几十年来，化学家们测定了许多在溶液中进行的有机反应的速率常数和平衡常数，获得了大量数据，很自然地提出了对这些数据进行分析和总结的要求，分析和总结的结果，首先是确立了一些经验关系，使有机反应中一组数据与另一组数据相互关联起来，由此发展了“相关分析”理论。同系递变线性规律（简称同系线性规律）和相关分析理论，不仅能够对有机化学中的结构和性能，化学平衡和化学反应动力学过程等问题作出定性解释，而且可以进行定量的研究。

经验事实是个别性的，对经验事实进行分析和总结总离不开一般性的假设、设想、原理等等的指导或导向，这就是说，归纳首先表现为在一般或普遍性认识指导下，对个别性的经验事实（个别性指经验事实的性质，它表现为单个现象，一个一个数据，决非只限于一事实）进行概括，可以表示成A—E，因为经验事实不只有一件、两件，而是有许多，如大量同类现象、大量数据等，因此，E可以表示成 E_1 、 E_2 、 E_3 ... E_n ，从 E_n 中得出的结论，实质上具有特殊性，是在已经掌握的经验事实范围内得出的结论，可用B表示，于是，经验归纳具有下述形式：

$$\begin{array}{c} A-E_1-B \\ E_2 \\ E_3 \\ E_4 \\ \dots \\ E_n \end{array}$$

当得到认识B以后，一方面要利用B指导进一步的研究工作，例如，应用有机化合物的同系线性规律处理同系列中取代基的效应，讨论这个规律在无机物系列中的表现等，另一方面，在进一步研究和应用中，认识B得到了验证和发展。所有这些，都具有演绎特征。以A为导向研究E，已经是一种演绎，得到B后进一步应用，也是一种演绎，因此，归纳和演绎是相互联系和互相渗透的。

2. 理论演绎

我们在这里说的理论演绎，有它的具体的内容，表现出了化学认识方法的特点。物理学中经常采用假说演绎方法。假说演绎，指的是从经验事实中抽提出假说或带有假说性质的原理，由此出发进行推论，得出系列结果。这种从前提出发进行推论的认识过程，表现为从一般到特殊到个别的过程，这就是演绎过程。从历史事实来看，化学中的演绎常常以物理学中业已建立的理论为前提，结合具体的化学定律、化学经验事实，得出进一步结论。因为演绎的前提是理论，我们将化学中的这种演绎叫做理论演绎。

热力学理论应用于化学研究，结合化学研究对象的特点，建立了化学热力学；统计力学理论与化学事实相结合，形成了化学统计力学；量子力学理论被用于处理分子中的化学结合问题，产生了量子化学；如此等等。所有这些都是理论演绎的结果，在这些理论建立过程中，应用了理论演绎方法。

理论演绎，从逻辑学观点看，就是从某种理论出发，合乎逻辑地推论出

参见 [英] J.肖特：《有机化学中的相关分析——线性自由能关系引论》，何宗士译，唐恢同校，化学工业出版社，1990年版，第1~5页。

新的认识，表现出理论的解释和预见功能，解释和预见，在逻辑学中是演绎推理。理论演绎同样也渗透着经验归纳，因为在将理论推广到化学中来时，必须要结合化学对象的特点，要将理论与化学经验事实密切地结合起来。这种结合就包含着经验归纳的因素。

在化学史上，经验归纳和理论演绎都曾起了重要作用。19世纪以前，化学中的方法主要是经验归纳法，在一定意义上可以说，经验归纳成了占主导地位的认识方法。19世纪中叶开始，理论演绎日益显示出了它的重要作用。在一定意义上可以说，理论演绎成了占主导地位的认识方法。就认识总体上看，经验归纳和理论演绎是相互联系、相互结合、相互渗透的。在实验中，以理论为指导归纳实验资料和数据；在理论研究中，又以实验事实作为基础和验证理论、发展理论的依据。

四、分和合

分和合，是贯穿化学结构和化学反应的基本关系，因而也是化学研究的基本方法。化学研究中的分和合，有多种表现形式，概括地说可分成四种形式：分离和混合，分析和合成，分析和综合，分化和整合。现在分述如下：

1. 分离和混合

我们先讨论分离与混合。自从将化合物和混合物区分开来以后，化学在研究物质及其性质的时候，首先遇到的一个问题就是必须保证所研究的物质是纯净的物质，问题的反面就是必须设法把杂质除去；在对物质进行分析测定中，经常遇到的问题是样品的成分复杂，测定其中某一组分时，共存的组分产生干扰，有时欲测组分含量极微，测定方法的灵敏度不够，需要对欲测组分加以富集，所有这些都带有一个分离的任务，而分离与混合常常是相互联系、相互依赖的。在这种情况下的分离与混合，都是围绕物质的纯度进行的。因此，在具体说明分离、混合及其相互关系以前，首先应当对纯物质或纯度概念加以说明。

我们刚刚讲过，化学在研究某种物质时必须保证所研究的物质是纯净的物质或纯物质。当化学家们讲到某种物质的组成、结构、性质及其变化时，指的是纯物质的组成、结构、性质及其变化。纯物质是不混有其他物质的物质，是以纯粹的形式存在的物质。例如，氧气是氧元素的原子组成的氧分子的集合，即氧单质，水是由两个氢原子和一个氧原子组成的化合物，等等，都是指纯物质，是纯而又纯的物质，是不混杂其他任何物质的物质。

可是，在实际上，没有绝对纯的物质。自然界中存在的物质都不是绝对纯的，都混有其他物质，或与其他物质共生；人工合成的物质也混有其他物质。即使经过严格处理，也不可能得到绝对纯物质。像硅、锗等单晶，要求纯而又纯，也仍然含有痕量其他物质。在所研究的物质中混杂的其他物质，对该物质而言就是杂质，杂质使物质成为不纯物，不纯物就是含有其他物质的物质，也就是含有杂质的物质。纯与不纯是化学研究中经常遇到的一种关系、一种矛盾。

化学家们研究物质及其性质的时候，希望纯，要求纯，实际上又存在不纯，这就是矛盾。在这种矛盾中求解脱，只好根据实际条件求得可能达到的纯。由此，化学家们自然要关心可能达到的纯的程度该如何衡量，于是产生了“纯度”概念及纯度的量度。纯度这个概念正是在纯与不纯的矛盾中产生的，这个概念本身就体现了纯与不纯的矛盾。

什么是纯度？简单地说，纯度是纯的程度，是所指物质的含量。纯度越高意味着所指物质的含量越多，杂质的含量越少，反之亦然。因此，物质的纯度也可以通过其反面（即不纯、杂质的含量）来衡量，在这种情况下，我们也可以说，纯度是含杂质的程度。前一个定义，纯度是所指物质的含量，或含所指物质的程度，暗含着它的对立面——杂质的含量，不纯的程度；后一个定义，即纯度是含杂质的程度，则直接通过不纯来定义纯度。无论前者还是后者，都与不纯相关，这就是说，纯与不纯是相对而言的，各以对方为自己存在的前提，离开了纯与不纯的关系，纯度和不纯度都难以得到说明。

纯和不纯都具有二重性。纯度高，杂质含量少，干扰因素少，有利于对物质及其性质的研究；有时纯度高又不利于研究，例如，在纯度高的某种溶

剂中，某种溶质的溶解度很小，不利于对该溶质的研究，若在该溶剂中加入少量其他物质（降低了溶剂的纯度），溶解度可显著增加，这就是利用“杂质”，利用不纯而产生的效果。不纯，或纯度不高，杂质含量多，干扰因素多，不利于对物质及其性质的认识，可是有时又需要不纯，需要杂质，这对认识是这样，对一些材料的应用也是这样。

纯度有高低之分，在分析化学中应用的试剂品级与规格，都有一定的规定。我国现行的国家标准，将一般试剂划分成三个等级：一级试剂为优级纯，二级试剂为分析纯，三级试剂为化学纯。这些规定都具有相对性，它将随着科学技术水平的提高而变化，绝对不变的标准是不存在的。在标准中，主要内容是对含量的要求，或对杂质含量的限定，因而关于试剂品级与规格的规定，实质上是对不纯度的规定。

那么，有没有绝对纯的物质呢？所谓绝对纯的概念，实际上只是一种理想化了的概念。有些文献提出，如果任何纯化的努力都不能进一步改变物质的性质，这种物质就称为绝对纯物质。这个定义把纯化技术和测试技术作为绝对纯物质的内容。纯化技术和测试技术都是随着科学技术的发展而不断进步的，此时不能再纯化的，彼时可能进一步纯化，此时未测出物质性质的变化，彼时可能测出它的变化。由此可见，这里提出的所谓绝对纯的定义，实质上只有相对的意义。还有人提出，绝对纯物质是由同一的原子、分子等组成的物质。这个定义具有理论意义，对于科学发展已达到的水平来说，假设存在同一粒子是必要的，统计力学把同一粒子作为科学的基本概念；然而，由绝对同一的粒子组成的物质实际上也是不存在的，从量子力学理论来说，每一个电子都有自己的面孔，化学实验中应用的材料，也决非由绝对同一的粒子所组成。

从认识论上分析，对物质纯度的认识有没有界限？我们的回答是：有界限又没有界限。所谓有界限，有两个含义：其一，达到了绝对纯，即达到了界限；其二，每一阶段对物质纯度的认识，都有一定界限。每一阶段的认识，在质的方面只能分离、测试出有限种类的杂质，在量的方面，只能测定每种杂质的相对含量。所谓没有界限，也有两个含义：其一，对物质纯度的认识，向绝对纯的目标无限地趋近；其二，化学对物质的认识是无限的，一方面不断认识过去未认识的物质，另一方面又不断合成新的化合物，这个过程不会终结，而只要这个过程不终结，对物质纯度的认识也就不会终结。

一般地说，认识物质及其性质，对物质的要求是越纯越好。在化学研究中，要排除干扰因素，在纯粹状态下进行实验，其重要途径之一就是使用高纯度试剂。因此，化学研究的首要环节是提纯，提纯的实质是分离，即把要研究的物质与杂质分开。在分析化学中，分离也占有重要地位，一种分析方法是否能够取得预期效果，往往与分离的效果相联系。

分离方法多种多样。例如，在分析化学中常用的分离方法有沉淀分离法，液—液萃取分离法，离子交换分离法，色谱分离法，电解分离法，蒸馏分离法，等等。这些方法都是分离方法，顾名思义，它们是分离物质或混合物的方法，其目的是使混合组分分开。为了实现这个目的，常常需要混合。这就是说，分离常常与混合相伴随、相联系，为了分离而混合，或为了分离首先需要混合。

蒸馏分离法是最古老、最常用的分离方法之一。它的基本原理是利用液体混合物中各组分挥发性的不同，通过蒸馏使之部分地或全部分离。就是这

样一种简单分离方法，也常常伴随着混合操作，尤其在现代，有些不易挥发的物质，如金属，也可以通过混入某种试剂，使之发生化学反应，转变为挥发性化合物，再用蒸馏方法使之分离。沉淀分离法是利用沉淀反应进行分离的一种方法。应用这种方法，首先要在溶液中混入沉淀剂，如氢氧化钠、氨水、硫化氢以及有机化合物等。沉淀剂与溶液中某些离子形成难溶化合物，使之从溶液中沉淀出来达到分离的目的。溶剂萃取分离，基于不同物质在不同溶剂中分配系数不同，以使不同物质分离。这种方法的关键是选择合适的溶剂，例如，选择有机溶剂与某些物质的水溶液相混合，振荡，搁置而分层，其中一些组分溶于有机溶剂中，另一些组分仍存在于水中。萃取过程的本质在于，有些物质有亲水性，另一些物质有疏水性，如果将某些组分由亲水性转化为疏水性，即可通过萃取方法使之分离出来。从亲水性转化为疏水性，又需混入适当物质。这些实例都说明，分离与混合是相联系的。从方法论角度来说，在明确分离这个目的前提下，为了有效的分离，不应单就分离研究分离，不应只把注意力全部集中在分离上，而要在研究分离方法的同时，要重视研究它的对立面即混合，通过对混合的研究（如混什么，在什么条件下混合等）达到有效分离的目的。有时分离非常困难，与其在分离上花费许多时间和精力，不如寻找一些试剂或溶剂进行混合，使干扰成分生成络离子、络合物、难离解的盐，也就是将它们掩蔽起来，同样可以达到类似于分离的目的。例如，用二乙酰二肟测定 Ni^{2+} 离子时，共存的 Fe^{2+} 离子起干扰作用，混入过量酒石酸， Fe^{2+} 离子以酒石酸盐的形式被掩蔽起来， Fe^{2+} 离子与二乙酰二肟生成的化合物可以忽略不计。这些表明，在分离和混合的关系上，一般地说，分离是目的，因此，要研究分离的方法，而分离又往往不能脱离混合，为了分离往往要先混合。这就启示人们，对于分离和混合，不要就一个方面研究一个方面，应当注意这两个方面的相互依存、相互联系，着重研究分离的时候，也要注意研究混合，并设法利用混合的研究促进分离的实现。

2. 分析和合成

化学中所说的分析，系指对物质的成分、结构、状态的剖析。化学中所说的合成，可分为无机合成、有机合成、高分子合成等，系指从简单的物质（如组成简单的化合物，元素或单体）转变为或制备出复杂的物质（如组成复杂的无机化合物、有机化合物或高分子）。

无论是分析还是合成，它们的基本途径都是化学反应，它们的基本矛盾都是分解和化合。以化学反应为基础的分析被称为化学分析，化学分析所涉及的化学反应多种多样，其基本矛盾是分解和化合。无机合成通过化合反应、异构化反应、分解反应、复分解反应、氧化还原反应、取代反应等而实现，这些反应的基本矛盾也是分解与化合。有机合成、高分子合成同样也离不开化学反应，也脱离不了分解和化合的矛盾。

作为方法的分析 and 合成，正像化学反应中的分解与化合一样，也是互相联系、相互依存的，同时它们又是相互对立的。在化学实验研究中，为了解某种化合物的结构，需要进行分析，通过分析才能认识该种化学物是怎样构成的，分析中含有分解的因素，也含有合成的因素。前面举过的珊瑚虫毒素的例子就是一个很好的证明。为了探索该物质的结构，先要将它降解（也就是分解）成许多可以操作的小片断，而后设法合成每个片断的各种异构体，从中寻找与天然产物片断相匹配的异构体，总共要合成 20 个关键的降解产物

的各种异构体。这个例子说明，探索物质的结构，这是分析过程，可以应用各种分析方法；作为化学分析方法，包含合成或离不开合成，可以说不合成就不能分析。1965年，我国化学家在世界上第一次成功地用化学方法合成的结晶牛胰岛素，在探索过程中，曾提出许多合成方案：如先分别合成胰岛素的A链和B链，再用它们合成具有生物活性的胰岛素；或者采取“工”字形的接合方式，即用两条“工”字形肽链的接合以合成胰岛素；第三个方案，逐个地连接氨基酸。在探索、选择中，一些研究人员首先对天然胰岛素进行拆合研究，即先将天然胰岛素分子中的A链和B链分开，经分离纯化后，再把它们重新组合成具有生理活性的胰岛素。在此基础上，又进一步进行A、B链小片断的合成实验；后来（1964年10月）用合成的B链与天然的A链重组，显示出较高的活性；最后，于1965年9月，进行人工A链和人工B链的全合成实验，终于取得了成功。从这个合成实验过程中可以看出，目的是合成，而在向目标迈进途中，经过拆分和重组的多次反复，而拆分实际上是分解，重组是合成，每一步都需进行分析，以了解合成的结果。

从上述可以看到，在讨论分析方法和合成方法时，涉及了两个不同的领域：一个是分析化学领域，一个是无机合成、有机合成或高分子合成领域，这两个领域是化学中的不同领域，但它们都涉及化学实验。为了说明这两个领域的区别和联系，也为了进一步说明化学实验中的分与合的相互关系，下面，讨论试剂、试样及其有关的一些问题。

试剂，一般地说，就是化学实验中用的化学药品，是能够发生化学反应的物质。在这个意义上，试剂含有原料之意，试剂就是进行化学反应的原料。我们知道，在化学工业中，生产化工产品需要化工原料，例如，生产合成氨需要氢气和氮气以及催化剂等，生产聚乙烯需要乙烯。氢气、氮气、乙烯都是化工原料，有了这些原料，通过一定的设备和流程在适当条件下即可生产出相应的产品。原料是反应物，产品是反应产物。同样，在化学实验中，也需要原料，化学实验中的原料，通常称为化学试剂、化学药品或化学药剂。

在分析化学中，除了试剂以外还有试样；试样，通俗地说就是试验样品。在分析化学中是被分析、被测试的物质。与此相对，试剂则是试验用药品，是分析、测试试样的手段，是分析、测试试样时所用的物质。例如，有一种物质，要求检验其是否含有 Ag^+ 离子，化学家根据已知的化学反应用盐酸进行检验，如果有白色 AgCl 沉淀生成，说明该试样含有 Ag^+ 离子，否则说明不含 Ag^+ 离子。在这个例子中，要求检测的物质，也就是被分析的对象就是试样，盐酸是分析的手段，也就是试剂。当然，事情也可以反过来，如果要求分析的不是 Ag^+ 离子而是 Cl^- 离子，那么含 Cl^- 离子的物质是试样，而 AgNO_3 （即含 Ag^+ 离子）成了试剂。

试样和试剂有什么区别呢？试样的组成或含量是未知的，是尚待分析的，而且试样往往是混合物，是不纯的物质或纯度不高的物质；试剂恰好相反，它的成分是已知的，而且是纯度高的物质。由此可见，试样和试剂在分析化学中是对立的，又是统一的，试样是相对于试剂而说的，试剂是为了检验试样的。在分析化学中与试样相对而言的试剂，可以叫做分析试剂，意思是用于分析的试剂。

正如前面刚刚说过的，在一般化学实验中，也需要试剂，为了区别于分析试剂，可以将其称之为实验试剂。二者有什么不同呢？分析试剂是相对于

试样说的，分析试剂和试样对化学反应来说，都是反应物，但分析试剂的成分是已知，试样的成分是未知的，赖以进行分析试样成分的化学反应也是已知的。例如，盐酸和硝酸银溶液相混合，发生化学反应，生成氯化银白色沉淀，化学家已经知道了这种反应，反过来利用这个反应检验 Ag^+ 离子或 Cl^- 离子。如同一道算术题或代数题，三个数中，已知两个可以求出第三个。在这个反应中，反应物中的一个（试剂）成分是已知的，化学反应的规律是已知的（ $\text{AgNO}_3 + \text{HCl} = \text{AgCl} + \text{HNO}_3$ ），由此可推知试样中含有 Ag^+ 离子或 Cl^- 离子。实验试剂的性质有些不同。作为一般化学实验的实验试剂，如上述，含有原料之意，只是作为化学反应的反应物，它们的成分都是已知的，要研究的是化学反应，发生什么反应，生成哪些产物，等等。在这点上，实验试剂及其反应与化工生产也是不同的，在化工生产中，原料、反应和产物都是已知的；化学实验的主要任务在于探索未知，化工生产的主要任务在于生产产品。

实验试剂，在具体反应中有具体的名称，例如，在氧化还原反应中，叫氧化剂和还原剂，在中和反应中，叫酸和碱。如果愿意的话，也可以称为酸性剂和碱性剂。这两个例子说明，实验试剂在具体反应中也表现为两个相互对立的两个方面，但是，已经没有试剂和试样之分，甚至难以划分主要和次要，主动和被动。

然而也应当进一步指出，用实验试剂研究化学反应，在具体条件下，把着重研究的某种试剂看作主要的，把与它发生化学反应的其他试剂看作是配合的，在这种情况下，后者实际上成了研究前者的手段。例如，当主要目的是研究乙醇的性质时，要将乙醇与金属钠、高锰酸钾等进行反应。在这里，乙醇是研究的主要对象，钠、高锰酸钾等是为研究乙醇而选择的物质。在一些实验中，尤其是在有机化学实验和高分子化学实验中，还常常涉及一些特殊的实验试剂，它们具有特殊的性质，在化学反应中起着特殊的作用。例如，催化剂、抑制剂、阻聚剂、缓聚剂、引发剂、终止剂，还有以发明人命名的格氏剂、费林试剂、许夫试剂等。其中有的主要是实验试剂，有的则主要是分析试剂，有的既是实验试剂也是分析试剂。还有一种特殊的分析试剂就是指示剂。

化学实验中的分析与合成，是使用各种试剂、通过各种化学反应、调节各种可能调节的条件实现的。因此，这里所说的试剂、试样、反应、条件等，都是应用分析与合成方法所不可缺少的，都是在实验中实现分析与合成的物质基础和前提。

3. 分析和综合

实验中的分与合与思维中的分与合，在化学研究中是紧密相关的。实验中的分与合，如果从总体上加以简要的概括，可以说表现为利用化学的或其他的方法和手段，把混合物分开，把化合物分为它们的组成部分，同时又把各个部分组合或构成为整体。在实验的分与合的基础上在思维中也在进行分与合。思维中的分与合，表现为分析与综合。分析，即思维中的分析，是在思维中从整体中抽取出它的组成部分，并舍弃干扰因素和次要因素，把所要研究的问题在尽可能纯粹或简单的状态下加以考虑；综合，则是在分析研究的基础上，进一步把先前舍弃的一些因素加进去，以获得对问题的全面的、具体的认识。

思维中的分与合，具体表现形式是多种多样的，情况也是各异的，而且

具体情况不同分析与综合的方法也不同，在思维中没有固定的模式。在这里我们只能举例作一些描述。

众所周知，量子化学处理结构问题时，首先要写出体系的势函数，然后代入薛定谔方程中求解，得出描写体系运动状态的波函数。为了便于求解，在量子化学发展过程中提出了许多具体方法，建立了许多具体方程，哈特利和福克方程就是其中较早提出的一种。一个化合物体系中的电子本来是相互作用、相互影响的，是统一的、不可分割的整体。但在哈特利和福克方程中，先描述一个电子。这时，把其他电子暂时凝固起来，并将它们按一定方式涂抹成电子云，把被研究的一个电子看成是在这种电子云和原子核所形成的势场中运动。这实质上是将体系加以分割，只描写和研究其中的一个电子。这是分析的过程。然后再通过迭代方法逐步将一个个电子的行为综合成整体。具体方法是，先求第一个电子的波函数，而后求第二个电子的波函数；在求第二个电子的波函数时，又将这第二个电子视为在第一个电子和其他电子以及原子核所形成的势场中运动的，而且，这个时候，第一个电子已经是按照新得到的波函数涂抹成电子云的，因而也就把第一个电子与第二个电子之间的作用 and 影响在一定程度上考虑进去了。依此类推，直至第 N 个电子，然后又可以从第一个电子开始新一轮迭代。迭代过程实质上是逐步综合的过程。

在化学研究中，实验中的分和合与思维中的分和合相互联系、互相转化。例如，对于天然产物的研究，经过实验分与合，可以获得关于天然产物的结构方面的信息，经过思维中的分析与综合提出关于天然产物的结构的构思，写出结构式，再通过多次实验进行检验，以得出基本的、确定的认识。在此基础上，通过实验中的分与合，把天然产物合成出来。某种天然产物，是最初的研究对象，对化学家这个主体而言，它是客体，是天然存在的客体，我们称之为天然客体。从对天然产物的研究中形成了关于天然产物的认识，在思维中把握了它们的结构，建立了结构模型，这时，这种模型也就成了化学家进一步研究的对象，因而它也是一种客体，是思维中的客体，理论中的客体，而且是多少理想化了的客体，可以简称为理论客体。在这种理论客体指导下，或者说依据理论客体，可以通过实验将它合成出来，再次转化为现实的客体，为了区别于天然存在的化合物即天然客体，人工合成的天然产物称为人工合成化合物，也就是人工客体。上述过程可以简化为：天然化学客体——理论化学客体——人工化学客体。

从天然化学客体到理论化学客体，实际上是从实验到理论的认识过程，这时的理论认识（也就是理论化学客体）虽然经过了一些实验检验，但在未将它们合成出来以前，终究还是理论上的东西，具有假说的性质。这种认识是否正确，最终还要通过合成实验来检验。

在这里提出了一个新问题，即理论上的可能性与实验中的现实性的关系问题。这个问题也可以表述成：理论上判断的化学客体（即具有某种结构的化合物）能否转化为现实的人工化学客体，或者说，相应于理论化学客体的人工化学客体是否能够存在。

这里所说的存在，就是理论上被考察的可能的化合物结构所构成的集合中，哪些结构能够通过实验被合成出来，并具有足够的动力学稳定性？从理论上说，这个集合可以分成两个子集：一个子集，它所包含的结构原则上能够被合成出来，并且能够稳定地存在；另一个子集，它所包含的结构原则上

不能被合成，即不可能存在。如果能够找到划分两个子集的标准，对于化学家来说无疑是一件幸事，可惜现代化学还难于确定这样的标准。虽然现代化学通过理论计算可以提供一些指导，但是离问题的彻底解决还有一段路。于是就形成了这样一种局面：如果利用已有的知识、物质条件和技术，某种认为可能存在的具有某种结构的化合物在实验室中被合成出来了，这就证实了这种人工化学客体存在的可能性，并且已经转化成了现实性；如果这种理论客体没有被合成出来，是否就一定证明该人工化学客体不可能存在呢？问题并不这么简单。有些比较简单的化合物，涉及的理论比较成熟，合成步骤和技术也不那么复杂，通过理论分析和实验能够做出必要的结论。有些则不然，这就是说，在实验室中没有合成出来，并不能完全肯定它是不能被合成的，当然，也不能完全肯定它是能够被合成的。实验作出的否定性结果比肯定性结果包含着不确定性，因而包含着更丰富的内容。肯定性结果，即在实验中合成了某种化合物，在认识上只有一种可能性，证明了该化合物是能够被合成出来，因而是现实地存在的，或已经由可能性转化成了现实性；而否定性结果，却包含着两种可能性，理论上设想的化合物可能存在也可能不存在。

列宁在《唯物主义和经验批判主义》一书中指出，实践标准具有确定性和不确定性。他指出，生活、实践的观点应当是认识论的首要的基本的观点。当然，在这里不要忘记，实践标准实质上决不能完全地证实或驳倒人类的任何表象。这个标准也是这样的“不确定”，以便不至于使人的知识变成“绝对”，同时它又是这样的确定，以便同唯心主义和不可知论的一切变种划清界限。

关于某种结构的化合物是否存在的判断，其是否符合实际，最终要由化学实验来检验。化学实验离不开某种方法和途径，只有通过具体的方法和具体的途径才有可能合成所要合成的化合物。在这个意义上说，通过化学实验检验某种预想结构的化合物是否存在的问题，就转化成了化学合成方法和途径的选择问题。从原则上说，在同一时期，或在同一的实践和认识的水平上，合成方法和途径的选择得当，合成实验的成功机会就多，从而证明某种结构的化合物存在的机会也就多；反之，合成方法和途径的选择不当，化合物合成不出来，正如上面刚刚说过的，在这种情况下，并不能彻底否定此种化合物存在的可能性。实验方法和途径多种多样，选择的余地是很大的，因此，当化学家选择了几种不同方法和途径没有实现预计的目的，并不足以证明这种目的是不能达到的。这样，上述列宁关于实践标准的不确定性论点从方法的角度得到了说明。当然，某种理论化学客体能否转化成人工化学客体，最终还得依靠合成实验来检验，化学合成实验最终也能够作出检验，这又表现了实践标准的确定性。

4. 分化和整合

化学的发展是与分析方法的发明和发展紧密联系着的。化学家们最熟悉的是化学反应，与此相联系，除了人们早已熟悉和掌握的方法以外，在化学中最早发展起来、应用最为广泛的分析方法，是化学分析方法。早在 17 世纪下半期，波义耳已经相当全面地概括了当时已知的和他自己独创的关于水溶液中某些物质的检定反应。波义耳之后，经过一个多世纪，到 19 世纪，定性分析和定量分析得到系统化，形成了以重分析法和容量分析法为主体的化学分析法。化学分析法是在化学反应和化学理论上发展起来的分析方法，

它的建立和发展，标志着方法的分化，就是从一般科学方法中分化出来一种特殊的化学方法。这种方法到本世纪二三十年臻于完善。化学分析法已经成了化学中的传统方法。这种方法不仅被用于组分分析，而且被用于结构分析，例如，直至本世纪30年代末，为了了解化合物的结构，主要依靠元素分析、化合物的反应、相应衍生物的生成以及颜色反应，对于结构复杂的天然产物的结构，大多采用降解方法，使之化为简单化合物。

这种传统化学分析方法对化学的发展起了积极作用，时至今日，对常量组分的测定基本上仍然沿用经典的化学分析方法。但是，由于长期沿用，使化学家们在一定程度上形成了一种习惯或偏见，偏爱传统的或经典的化学分析法，对于在其他科学领域发展起来的新工具、新仪器、新方法，或者视而不见，或者墨守陈规不愿使用，或者不够敏锐，总之，形成了一种固守传统方法的习惯。当然，也有些化学家在新事物面前表现出了应有的敏锐性。例如前面多次提到的伍德沃德，在有机合成中很注意物理仪器的作用。他在研究萜类天然产物的结构过程中利用了紫外吸收峰波长计算方法，在测定青霉素的分子结构时，应用了红外光谱测定法。伍德沃德的工作，推动了紫外、红外、核磁、质谱等方法在化学研究中的应用。

不管一些化学家多么不习惯，也不管一些化学家主观上是否情愿，工业生产的发展，化学和新兴科学技术的进步，一方面对分析方法提出了新的挑战，如对试样中微量乃至痕量组成进行测定，对分析灵敏度的要求越来越高，另一方面，也为创立新的方法提供了可能。于是，在传统的化学分析方法继续改进和使用的同时，新的分析方法不断涌现。现代分析化学已经被化学的、物理学的、电子学的、数学的、计算机科学的乃至生物学的最新成就和方法武装起来了。因此，现代分析方法，正如现代科学一样，在继续分化、专门化的同时，出现了合的趋势，即综合或整合的趋势。

例如，激光是基于原子物理学、量子理论、光学和电子技术发展起来的一门尖端科学技术，现在，将激光作为研究和探测化学反应及其过程的手段和方法，已经取得了重大进展。利用短脉冲激光光谱可以检测超短寿命的自由基、激发态分子或离子，研究快速过程，分析生化样品。极谱分析是较早发展起来的一种电化学分析法，近年来在这方面又有新的进展，催化极谱法和络合吸收法的研究极有前途，并注意对极谱法与高效液相色谱联用的研究，以期达到同时进行分离和测定的目的。现代分析方法的发展，出现了一种重要趋势，即各种仪器联用，以取长补短，扬长避短，如气相色谱—质谱联用、液相色谱—质谱联用、气相色谱与红外光谱联用，气相色谱与核磁共振谱联用、液相色谱与原子吸收光谱联用，等等。

化学家们利用现代化的仪器和技术等手段，使过去无法研究和了解的问题变成可以研究和了解的问题。例如，化学家早已经知道，两个分子只有在接近、碰撞时才有可能发生化学反应。但是，仅仅知道这一点是远远不够的，除此以外，化学家还必须知道分子碰撞以后发生的情形，例如，需要知道分子碰撞后能量的转移情况。以前，依靠传统的化学方法是无能为力的，现在，采用一种短脉冲激光与红外荧光时间分辨测量法，可以进行振动激发过程实验。如果采用12纳秒脉冲、308纳米波长的紫外辐射法，可以从甲醛中得到高活度的甲醛自由基，再用第二个已调谐好的适于HCO吸收的激光，就可以测知HCO基的存在，它的振动态以及它的寿命。用N₂和NO这两种双原子分子作为碰撞对手，则可以对快速的、相互竞争的化学过程有更为深入的了解。

从以上简述的内容能够得出什么方法论的结论呢？首先，化学家不应当局限于自己的专门领域，而应当放开眼界，面向各个科学研究领域，将其他研究领域中的方法、技术、手段和仪器等，凡适合于、有利于化学研究的，即采取“拿来主义”，为我所用。在科学方法上，也应当像在其他问题上一样，不拘一格，不受局限，不因循守旧，而应当尽可能地广集众家之长、补我之短。过去一些化学家曾受传统方法的局限，现在人们已经打开了眼界，在化学研究中开辟了广阔天地，使分析化学现代化了。而且，随着各种新方法的移植和应用，人们越来越清楚地认识到，分析方法和技术，如同世间一切事物一样，无不有两重性，每种方法和技术，有它的长处和特点，也有不足和局限，不可能至善至美、完美无缺。正因如此，人们才逐步认识到不应受某一种方法和技术的局限，而应取长补短，使各种方法和技术依据实际需要而结合起来，使各种仪器依不同情况将它们联合起来使用。

其次，不仅拿来，还要研究。其他科学领域的发明、技术、方法等，有些可拿来使用，更多的尚需专门研究，以使之更适合于化学问题，并经过研究开发出新的方法。例如，我国电分析工作者对极谱催化波和络合吸附波已经做了大量的研究工作，“优选了许多适合于催化波和络合吸附波的测定体系，测定了用一般极谱法难以解决的各种元素。目前用催化极谱法及络合吸附法测定的元素已有六十多种”。又例如，对倍增光子激发的研究导致了功率特别大的 CO_2 红外激光的发展。研究发现，采用倍增光子激发使许多单分子分解和重排，产品可用激光诱导荧光进行检测；红外吸收依赖于振动，而振动的共振频率对原子的质量是非常敏感的。由此给人以启示，利用可调激光就可以使一群分子中特殊的同位素分离出来，而让一般的分子留下来。这样，从对倍增光子激发的研究中，得出了一种同位素分离的新方法。

最后，在开发新方法的同时，不断改进传统方法。尽管现代被称之为仪器分析的方法具有明显的特点和优越性，但是，传统的化学分析方法毕竟是在化学土壤中产生和发展起来的，它本身经过了长期应用考验，发挥了巨大作用，特别是因为对含量较高的组分能取得较高的测定准确度，对常量组分的测定仍然适用。因而在发展现代化的仪器分析的同时，也不应当忽视对传统分析方法的研究和发展。过去，当人们局限于传统方法的时候，有些化学家注意到仪器分析方法的特点和优越性，倡导在化学中使用现代化的分析方法，并在使用中研究和发展这种方法，事实证明，这对于在化学家的研究中运用仪器方法起了积极的作用。时至今日，紫外、红外、核磁、质谱、色谱等方法及与之相应的仪器在化学家的研究中发挥着重大作用，特别是在有机化合物分子结构的测定中，传统的化学方法大都为波谱方法所代替。可以说，分析化学的面貌发生了根本性变化，分析化学研究兴趣也发生了转移。就是在这种情况下，是否应当注意问题的另一方面，传统的或经典的分析方法有没有继续研究的价值，有没有改进的余地，或者用一句话概括，还有没有发展前途。提出这个问题或许不是没有意义的。

五、模仿和创造

化学研究方法的另一个特点就是模仿。模仿，仿效，也叫模拟，总得有被模仿者和模仿者，模仿就是用模仿者去模仿被模仿者，于是，在这两者之间建立了某种关系。模仿似乎只是学，是仿效，没有创造；其实不然，模仿中有创造，在模仿的基础上进一步创造。化学研究的重要特点之一，正是在模仿中创造，在模仿的基础上进一步创造。这一节，我们围绕模仿和创造讨论化学方法论中的一些问题。

1. 化学中的模型

一般地说，人们在研究事物的时候，一方面常常就这个事物研究这个事物，另一方面又常常将这个事物同其他事物进行比较，通过比较认识事物之间的相同或相似，以及事物之间不同和差异。例如，将有机化合物与无机化合物进行比较，在历史上，拉瓦锡都把它们看作氧化物，这是相同点；同时拉瓦锡也已经发现无机化合物中与氧化合的另一部分是简单基，而有机化合物中与氧化合的另一部分是复杂基。通过比较确定了有机化合物和无机化合物之间的相同点和不同点。

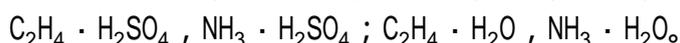
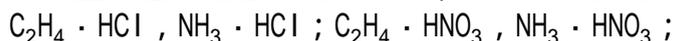
化学研究中的比较，在很多情况下更看重相同或相似，从比较中发现相同或相似。例如，对化学元素的比较发现性质相似的元素组成的元素组，即后来在元素周期表中的元素族，对有机化合物的比较发现组成相似或相同的同系列，每个同系列均可以用一个通式来表示。诚然，相同或相似只是相对的，是就某一方面而说的。这种相似性的比较，是建立模型的方法论基础。

化学中的模型，突出地表现为化学结构模型，化学结构模型可以说是化学模型中主要的基本的形式。

19世纪中叶以前，随着对有机化合物的研究，特别是对有机化合物组成的研究，积累了日益增多的经验资料，在此基础上，化学家们开始从研究有机化合物的组成逐步过渡到研究有机化合物的结构。

19世纪初，贝采里乌斯提出了电化学二元学说，把化合物看成是由带相反电性的两部分相互吸引而构成的。这个学说几乎统一地解释了当时已知的全部无机化合物。在此基础上，他试图将这个学说推广到有机化合物中去。在他看来，有机化合物的构成原因和方式，与无机化合物相似。他从无机化合物推想有机化合物，即由此推论彼。虽然结果后来被证明是不正确的，但是从思维方法来说是有意义的。人们思考问题，常常将未知事物和已知事物进行比较，由已知推想未知，通过比拟、联想、推论，试探着、摸索着前进。

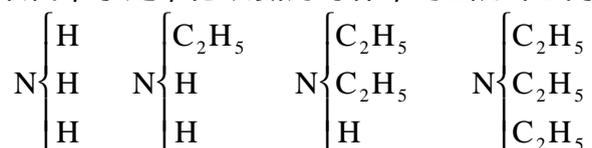
1828年，杜马和布莱(P·Boyle)基于实验事实提出一种假说，把乙醇及其衍生物看作是乙烯的化合物，并将其与氨的化合物进行比较，例如：



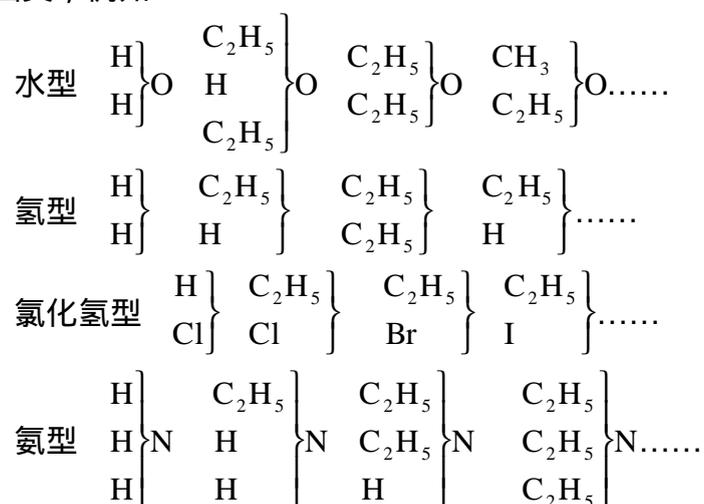
这个假说虽然没有得到普遍承认，也没有得到更多的实验事实的支持；但是，从方法论角度看，这个假说的提出与比较方法的应用有关，是在比较的基础上的模仿。每一对化学式中，如 $C_2H_4 \cdot HCl$ 和 $NH_3 \cdot HCl$ 中，有一部分是相同的，另一部分从形式上看是不同的，一个式子中是 C_2H_4 ，另一个式子中是 NH_3 ，然而，从杜马和布莱的思想实质来看，这两者（即 C_2H_4 和 NH_3 ）是

相似的。因为杜马和布莱是仿照氨的化合物的构成式而写出醇及其衍生物的构成式的，在这种仿照、模仿的意义上， $C_2H_4 \cdot HCl$ 中的 C_2H_4 ，类似于 $NH_3 \cdot HCl$ 中的 NH_3 。

后来，在类型论中，化学家总是将有机化合物与某种研究较多的无机化合物进行比较。1850年，A·W·霍夫曼发现，用碘乙烷与氨作用，氨中的氢可以逐次为乙基取代，于是，他以氨为母体，写出如下式子：



1851~1855年，威廉逊提出了水类型，他认为几乎全部无机化合物和已知的有机化合物，都可以归之于水型。日拉尔在氨型和水型基础上，增加了氢型和氯化氢型。他以无机化合物的化学式 (H_2O 、 NH_3 、 H_2 、 HCl) 为母体将有机化合物分成四类，例如：



日拉尔是类型论的集大成者，他把类型论发展到了很高的水平。类型是一种模型，但是正如人们所熟知的，在日拉尔看来，类型并不反映化合物中各组成成分之间的实际关系，只是为了说明化合物在各个反应中的作用，因此，他提出的类型只能算作是一种功能模型。

在经典化学结构理论中采用的分子结构式是一种分子结构模型。这种模型是以原子价和化学键概念为前提，通过元素符号和表示原子之间价键的符号依据结构理论而组合成的符号体系，反映分子中各原子之间价键的分布次序或顺序。因此，以化学结构式作为直观表现的分子结构模型，从形式上说是一种符号模型。

分子结构模型一经产生就成为化学家对有机化合物的结构和性质进行研究的强有力的工具。化学家利用化学结构式模拟化合物的化学结构。首先通过有机化合物（原型）的某些性质，确定原型和模型之间关系的相似性，或者说确定它们之间的同构性，然后，已经建立起来的化学结构式就能够帮助化学家判断化合物的其他性质。

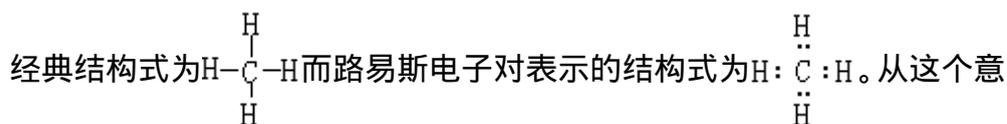
分子结构模型具有重要的功能。分子结构模型能够解释多种多样的异构现象，预见一些异构体的存在。但是，经典化学结构模型对光学异构现象和几何异构现象没有能够给出令人满意的解释，这是因为这两种异构体都具有相同的化学结构，它们的区别仅仅在于空间配置不同。这种矛盾导致了对最

初模型的修改。范特霍夫等人提出了碳的四面体模型。

20 世纪初，随着电子的发现，对于分子结构模型中的价键符号的本质有了进一步认识，相继建立了两种化学键模型：离子键模型和共价键模型。如人们所熟知的，离子键模型假定价电子从某一个原子向另一个原子完全转移，在两个原子之间由于静电作用形成键。这种思想最初是由汤姆逊提出来的，他把原子间的结合归结为法拉第管。法拉第管一端显正电性，另一端显负电性，呈现极性，以法拉第管形式表示的分子模型，也应当是有极性的。这种模型在没有极性的分子面前显得无能为力。

1915 年，斯塔克将原子的全部电子分成内部电子和外部电子，外部电子也叫价电子。综合斯塔克的思想 and 卢瑟福、玻尔原子模型，1916 年，科塞尔和路易斯分别提出离子键和共价键模型。

科塞尔和路易斯提出的分子结构模型，实质上是经典结构模型的对应物，只不过将经典结构式中代表化学键的短线用代表电子的点代替罢了。例如：



义上说，无论是科塞尔的离子键模型还是路易斯的共价键模型，都依然是符号模型。

量子力学建立以后，海特勒和伦敦将其推广到化学领域，实现了从原子的量子理论到分子的量子理论的转化，从而建立了分子结构的量子理论模型。这种模型是依据薛定谔方程建立起来的，因此，分子的量子理论模型既是理论模型，同时又是数学模型，它不仅具有解释功能，而且具有计算功能。随着量子化学的发展，它的计算功能也随之获得了突出表现。

1928 年，鲍林基于对氢分子的量子力学计算结果进行解释，将“共振”概念引入化学结构理论。当时，他所说的共振，系指价电子在两个原子轨道上的交换或共振。后来，他对共振概念的含义作了引伸，并提出了共振论。共振论的基本思想是认为，分子的真实基态不能用各合理结构式中的任何一个来表示，却可以用这些结构式的组合来描述。基于这种思想，鲍林建立了共振论模型，也就是用几个结构式的共振表示不能用单一价键结构式表示的分子的结构。在共振论模型中，包含着计算，但计算不起重要作用。

1931 年，斯莱特提出了建立分子的近似价键波函数和相应的久期方程的一般方法，鲍林在价键方法的创建中也作出了贡献，而且他与斯莱特的思路也比较一致。但是，斯莱特和鲍林的方法，由于数学计算上的困难，对较复杂分子的量子力学计算没有取得实际结果。因此，在相当长一个时期中，价键方法尚需化学论证的帮助。鲍林提出的共振论，在很大程度上是要避免复杂的量子力学计算，试图以化学论证方法对一些化合物进行定性讨论。

从计算角度看，由于价键方法所取的轨道不是正交的，计算困难；分子轨道方法所取的轨道是正交的，便于计算，获得了较为迅速的发展。30 年代，休克尔提出了一种方法，仅考虑平面共轭体系轨道，这是一种半经验计算方法。此后，一些量子化学家又相继提出了许多不同等级的半经验计算方法。60 年代末，随着电子计算机的发展，从头计算的精确计算方法开始发展和普及，到今天，更为精确的组态相互作用方法和多组态自洽场方法也有了很大的发展；基于分子轨道波函数的有关计算，在求得分子的精确几何构型和分

子的振动结构方面，发挥了巨大作用，甚至能够对化学反应过渡态、反应途径以及与化学反应动力学有关的问题进行研究。

除了结构模型以外，在化学中还有其他一些模型的具体形式。例如，元素周期系，即元素依据周期律以表格的形式的排列体系，在一定意义上可以看作是元素之间自然关系的模型，而且，在发现和揭示这种体系之前，也就是在发现元素周期律并组成元素周期系之前，许多化学家提出和建立了各种形式的模型。又例如，在化学中常常运用加和性模型，即把化合物的某些性质看成是由组成该化合物的各组成部分的总和。我们知道，从实质上说，不能将化合物视为组成它的元素或基团的简单总和，但是在一定条件下，或简化地处理，则可以看作是部分之和。化学中经常使用一些数值表，表中列出某些原子或原子团对化合物总的性质作出的贡献，这些数值表就是加和性模型的具体形式。在化学热力学和化学动力学中也广泛运用模型，如理想气体模型、理想液体模型、理想晶体模型、化学反应体系的动态模型等。

模型是模仿原型的，模型模仿原型需具备三个条件：第一，模型和原型相似而不等同，也就是说，模型和原型之间具有相似关系。模型和原型可以在结构方面相似，如作为模型的结构式与分子的实际结构相似；也可以在功能方面相似，或性质相似，如理想液体模型与作为原型的稀释溶液在性质上的相似；同样也可以在结构和功能方面相似。第二，模型（作为原型的代替者）成为研究的对象，也就是说，能够对模型进行研究。第三，从研究模型所获得的知识能够转移到原型上，模型成为认识原型的手段和工具。

与上述三个条件相联系，用模型模仿原型是一个认识过程，包括三个基本环节：建立和选择模型；对模型进行研究；将研究模型获得的知识转给原型。因此，我们所说的模仿或模拟，其意思是，建立或选择能够代替被研究对象的客体（即模型），研究这种客体能够提供关于被研究对象的知识。这里所说的客体，既可以是物质的，也可以是思想的，但模拟中所构思的模型，主要不是指物质客体，而是指思想客体，是指可当作研究对象来研究的思想客体。

在化学中，模仿或称模拟是一种重要的研究方法和认识方法。在合成化学中，天然产物是原型，通过研究天然产物的化学性质建立关于它的模型，研究模型（以结构式表示的）可以进一步认识原型，并可以将其合成出来。在分子化学中，化学家模仿天然橡胶研究和制出了合成橡胶，模仿天然蚕丝合成了人造纤维，模仿生物大分子在生物体内的化学反应过程、生物体内的物质传输过程和能量转换过程，建立了高分子仿生学，如此等等。

化学中的模拟有一种重要形式，就是在所研究的对象中选择最简单、最典型的对象进行分析，建立起模型和理论。通过典型分析所得结果，其实践意义往往是不重要的，而其理论意义和认识论意义却是重要的。这种典型分析提出了思路和思考问题的方法，进一步研究比较复杂的对象时，典型分析就具有启发作用。具体地说，在研究比较复杂的对象时，典型分析的结果可以作为模型来看待，所要研究的比较复杂的体系则可以视为原型，基于模型和原型相似，可以逐步将模型的处理方法转移到原型上，逐步推进，使认识从简单对象扩展到复杂对象，而每一次推进和扩展又会增加新的知识、新的方法。在量子化学中，体系 H_2^+ 比较简单，易于分析，在分析 H_2^+ 所得结果的基础上进而分析 H_2 ，这时 H_2^+ 中的电子运动可以视为 H_2 分子中两个电子中的

任何一个电子运动的模型，分析 H_2 分子所得结果进而可以扩展到多电子体系，如 CH_4 分子。同样，从分析 CH_4 分子所得结果中受到启发，进而分析共轭分子体系，如此递进，一步步扩展，一步步深入，使量子化学的理论和方法不断获得充实，丰富和发展。

正如在第五章中讲过的，从认识发展过程来看，从最简单、最典型的事例入手，突破一点，会使认识获得广泛发展；这种认识发展规律反过来作为进一步认识的指导线索，作为方法，表现在研究过程中，要求善于选择典型对象，从典型对象着手，开展工作，这是一种重要的研究方法，也可称为典型分析方法。所谓典型对象，其一具有代表性，例如苯的结构是芳香化合物的母体，有代表性；其二简单，或最简单，苯是芳香化合物中最简单的化合物；此外，在特定情况下，具有理论意义的对象，也是典型分析中选择典型要考虑的一个因素。

2. 模仿中的创造

模仿是仿照、仿效、模拟，模仿中需要创造性，模仿过程是创造性的研究过程。

模型的建立，依赖于创造性研究。化学模型作为研究的结果，以一定的符号体系而存在，它具有直观性、形象性，是人们的感观可以感知的，或者是人的思维可以把握的。然而，建立模型的过程，却是一个艰苦的、充满矛盾的思维过程，在此过程中，需要主体充分发挥思维的创造性。

一般地说，在建立模型的过程中，包含着猜测或猜想的因素。化学家依据已知理论，深入分析了事实，对要模仿的对象的结构和性质等方面提出某种设想，这中间就包含着猜测。这是建立模型中的重要一环，也是最困难的一环。在猜测中，各种逻辑方法，如比较、类比、归纳、演绎、分析、综合等，都会起一定作用。但是，猜测没有固定的逻辑通道，没有固定的逻辑规则。如果设想按照方法论教科书中讲的逻辑方法和程序去思考，就会产生新的思想，就会形成新的模型，是不现实的。对于新思想的产生，由于它没有固定的逻辑规则，因而有人说依靠洞察力，有人说要靠直觉，也有人说需要灵感，这些说法意在强调新的科学思想的萌芽和产生具有复杂性、非逻辑性。应当承认，在这里，人的思维的创造性具有重要意义。在研究过程中，应当解放思想，敢于猜测、假设，敢于提出奇想、怪想，敢于冲破传统观念的束缚，敢于标新立异。

我们提倡科学研究中大胆猜测，我们说在科学创造中，思维有广阔的自由驰骋的天地或者说有充分的自由。然而这种自由是怎样意义上的自由呢？有多大自由呢？它同实验资料和理论知识的积累有什么关系呢？这需要从以下几个方面进行分析。

第一，猜测依赖于有准备的头脑。人的思维有三种能力，即记忆、理解和创造。记忆力是储存和积累知识的能力，理解力是吸收和把握知识的能力，总起来说，记忆和理解是继承知识的能力，又是创造能力的基础，而基础还不是创造能力本身。记忆力好、理解力强不一定创造能力强，如果思想方法不对头，思想不解放，也可能被知识束缚住头脑。反之，记忆和理解能力差，要创造也很难。创造性思想的产生需要丰富的知识来启迪。从这方面说，作为一个科学研究工作者，要有知识的积累，要自觉地锻炼自己的思维能力，只有在丰富的知识和较强的思维能力基础上，思维才能自由飞翔，才有可能

提出奇想、怪想，提出有意义的猜测。

第二，猜测与经验事实。科学上的猜测不是与经验事实毫无关系的任意猜测，而是以经验事实为基础，猜出的东西要与经验事实相符合。在猜测与经验事实的关系上，一方面要反对经验主义，反对局限于经验事实，而提倡高屋建瓴，猜出经验事实的底蕴，猜到它的本质；另一方面必须承认，不管怎样猜，总要考虑经验事实，猜出的结果要符合实际。打个比喻，猜测好像猜谜，可以作各种各样的猜测，但毕竟要从谜面出发进行分析，而且谜底只有一个，猜的结果必须与谜底一致，才算猜对了。当然，科学中的猜测，允许猜错，也允许多次猜测，但毕竟要受“谜底”制约。

第三，直觉和灵感。直觉是人脑基于有限数量的资料和事实，调动一切已有的知识和经验，对客观事物的本质及其规律性作出的迅速识别、敏锐的洞察、直接的理解和整体的判断的思维过程。直觉使一些杰出的化学家在别人悟不出什么道理的地方，能够抓住问题的关键，作出重要发现。灵感是化学家对所研究的问题长时间集中思索出现的“智力超限”，是思维活动中量的积累引起的质的飞跃。许多有重大发现的化学家几乎都有过这种体验：对某个问题进行研究，在一段时间里百思不得其解，不知在什么时候突然想通了，思路清楚了，问题解决了。

凯库勒发现苯分子的结构，在化学发展中树立了一块里程碑。凯库勒在研究苯分子结构过程中，苯的化学组成和性质总在他的脑海中萦绕，他的思维如同一匹脱缰的马在广阔的大地上奔驰，然而总是沿着苯的组成和性质提供的线索奔驰。就这样，经过长时间的思索，他在朦胧的睡意中突然“看”到蛇咬自己的尾巴的情景，苯分子结构终于被他“想”出来了。

建立模型模仿原型，首先是为了认识，有时也为了实践，而认识的最终归宿还是实践。模仿天然产物而建立的模型，最终是为了在实验中将它合成出来。合成实验将模型转化为它所反映的原型，与此同时也就检验了模型。合成实验的设计，如同建立模型一样，需要创造性的思维，也是一种创造。合成实验在已知的反应中做出明确的选择是一种创造，在实验中发现了新的反应同样是一种创造。

伍德沃德在合成维生素 B_{12} 的过程中发现了分子轨道对称性守恒，充分体现了合成中的创造性。维生素 B_{12} 是一种含有 6 种元素 181 个原子立体结构异常复杂的分子。伍德沃德在合成维生素 B_{12} A 环的一部分的过程中，据已知反应精心设计了一条合成路线，而在实验中却出现了意外现象，他抓住这种现象深入研究，认识到光照和加热在反应中的不同作用和化学反应立体化学途径的差别，得出了光照和加热可以引起两种不同的几何移动的概念。以此为基础，深入进行探索，终于发现了控制这种化学反应进程的、前人尚未认识到的重要因素，即分子轨道的对称性。

如果说在不久前，合成战略只是在一系列已知反应中做出明确的选择，这就好像解一道几何题，只需要在已知定理中选择适当的定理按照一定步骤进行推理一样，在这种情况下，可供选择的反应和定理都是已知，已经确定了的。现在，有了分子设计，有了机械推理方法，有可能为某些特定的合成目标设计和发明一些适用的反应。这样，化学家们不仅能够模仿天然产物或生物体的样子，合成出为人们所需要的物质，而且还能进一步合成自然界未曾有过的、并具有人们所需要性质的物质。所有这些都离不开模型，都是在

模仿中发展的，而模仿中有创造，模仿为了创造。

第七章 化学中的概念

任何一门科学都离不开概念，化学作为一门基础性科学当然也不例外。化学中有许许多多的概念，其中有些概念适用于化学的各个学科，有些概念只适用于化学的某一学科，我们将前者称为化学中的基本概念，将后者称为非基本概念。

研究化学概念可有不同角度。例如，从历史的角度，研究化学概念的产生和发展；从化学和认识论角度，研究化学概念的实质；从逻辑学角度，研究化学概念的分类、内涵和外延等。这一章，我们试图以化学基本概念的历史演变为基础，对化学基本概念从多种角度及其相互结合上进行一些分析，以便揭示化学概念的辩证内容，更深入地认识化学概念，特别是化学基本概念的实质。

一、化学基本概念的历史演变

1. 从元素到分子

元素概念是化学中的第一个基本概念。元素概念的产生可以追溯到遥远的古代。元素这个词源于古希腊的“ $\epsilon\lambda\epsilon\mu\epsilon\tau\omicron$ ”一词，意思是原始物质或原初物质、始基。古代自然哲学家把一种或几种可直接感觉到的自然物，如水、气、土、火等视为组成万物的本原，后来亚里士多德进一步区分了原性（原始性质、原始品性）和元素。炼金术士继承了这些思想，进而把原性也视为独立的、具体的要素，与元素分离，并被看作根本的东西；但是在金属的构成上，又将原性和元素结合，统一到硫、汞上。化学医疗派的化学家，加上了一种新元素——盐，形成了汞、硫、盐三元素说。汞、硫、盐既是元素又是原性，是二者的统一。从古代自然哲学到化学医疗派，在元素概念上尽管有所不同，但其基本思想是一脉相承的，这个基本思想就是认为元素是组成各种各样物体的本原、基础或基本要素。

1661年，波义耳在《怀疑派的化学家》一书中对过去的元素概念提出了怀疑，他基于实验进行论证，说明亚里士多德的四元素（土、水、气、火）和后来的三要素（汞、硫、盐）都不是真正的元素或要素，理由很简单，它们都不能从金属中提炼出来。波义耳以一种行之有效的方式把元素定义为不能分解为更加简单的物质的物质，两种或多种元素可以结合成一种复合物，复合物又可以重新分解。波义耳的元素概念具有权宜性质，假如一种物质能够分解成为更简单的物质，它就不是元素，在化学家未找到一种方法把简单物质分解成更加简单的物质之前，就可以将它看作元素。不过，在波义耳看来，元素应当具有确定的数目，这个数目到底是多少，理论和实验尚未能提供有力的确证。波义耳的元素概念具有方法论意义，它启示人们不应当局限于仅仅用元素去解释现象，更为重要的是去发现新元素，从实验和理论上弄清楚哪些物质是简单的、不能分解的物质，也就是哪些物质是构成其他物质的基本要素。但是，在当时的条件下，波义耳的元素概念，与其说是行动的指南，勿宁说只是一种看法，因为哪些物质能够分解，哪些物质不能分解，在当时是个难以确定的问题，与此相联系，哪些物质是元素，哪些物质是由元素构成的化合物，也就是个难以确定的问题。要确定这些问题，在很大程度上只有依靠个人经验，带有主观经验性质，而这种主观经验又是与分析、分解相联系的。因此，前苏联著名哲学家凯德洛夫把这种元素概念叫做经验分析的元素概念。

在波义耳之后，许多化学家都在不同程度上讨论过元素问题。其中，拉瓦锡在1789年出版的《化学教程》中，专门讨论了元素概念。拉瓦锡在元素概念上的贡献，主要表现在两个方面。在他之前，有些化学家，如波义耳、罗蒙诺索夫等，仅仅一般地讨论什么是元素，而没有指出哪些是元素；有些化学家在实际上认定哪些是元素，具体研究了某种或某些元素及其性质，却没有说明元素概念的含义。拉瓦锡则第一次研究了这两个方面，并把这两个方面结合了起来。他一方面给元素概念下了一个明确的定义，“如果我们把分析所达到的最终界限的观念与元素或物体基元的名称联系起来，那么，对

于我们来说，所有还不能用任何方法分解的物质都是元素”；另一方面，他总结前人的成果提出了第一张元素表。表中列出了 33 种元素，并分成四类：

第一类，光、热、氧、氮、氢；第二类，硫、磷、碳、盐酸基、氢氟酸基、硼酸基；第三类，铈、银、砷、铋、钴、铜、锡、铁、锰、汞、钼、镍、金、铂、铅、钨、锌；第四类，石灰、苦土、重土、矾土、硅土。

拉瓦锡赞同布莱克 (J·Black) 的热质说，他认为热质是不能分解的简单物质，按照他提出的元素概念，热质是元素；与此相似，光也被认为是一种简单物质，因而也是元素。拉瓦锡认为，一切酸都是氧与另一种基相结合的产物，盐酸是氧和盐酸基的化合物，氢氟酸是氧和氢氟酸基的化合物，硼酸是氧和硼酸基的化合物，氧是元素，与氧结合的基不能分解，也是元素。元素表中的土，都是氧化物不是元素，但在 19 世纪以前，化学家们认为土是元素，况且这些土在当时是不能用任何方法分解的。拉瓦锡将元素概念应用于实际，元素概念成了判明哪些物质是元素的理论依据；元素表中列出的元素又是元素概念在实际元素中的体现。这两个方面的关系体现了概念和现实的关系，实际存在的元素成了元素概念在现实中的原型，元素概念则是对现实元素的抽象，在某种意义上可以说，它是现实存在的元素的模型。

拉瓦锡在元素表中所列的元素，其中有些在今天看来根本就不是元素；尽管如此，这张元素表的提出仍然是一个巨大进步，它表明元素不再是不可捉摸的东西，而是实实在在的物质形式。这是一个进步，同时又存在着矛盾：难道化学元素在化合物中真的以独立的物质形式存在吗？拉瓦锡或许已经意识到了这个矛盾，所以在他陈述化学元素定义之前还有一句话，他说：“如果用元素名称来表示构成物体的简单的、不可分的分子，那么，我们也许会不认识它们……”拉瓦锡所说的分子指的是微粒、粒子。这个矛盾是存在着的，这个矛盾的解决还要等待历史很久。

拉瓦锡的元素概念，正象波义耳的元素概念一样，带有经验分析的性质。经验分析的元素概念直接与分解方法相联系，随着分解方法和分析技术的进步，元素概念必然要随之发生变迁。如果将拉瓦锡的元素概念应用于实际，所有未能分解的物质都是元素，那么，在一个时期，元素的数目要超过真正的元素的数目；在另一个时期，如 19 世纪，一切原来不能分解暂时被认为是元素的化合物，一个一个地被排除了，剩下的是真正的化学元素；在下一个时期，如进入 20 世纪，放射性元素和同位素的发现，人工核反应的实现，一切真正的元素都是可以分解的，依据拉瓦锡的定义，真正的元素也不再是元素，最后竟会是这样，没有一种元素能够被称为元素。可是，实践告诉人们，元素是确实存在的，元素都排列在元素周期表中，它们各有各的性质，彼此之间有规律性的联系。问题出在哪里呢？显然不在元素本身，而在元素概念上，具体地说，问题出在拉瓦锡提出的元素定义上。

拉瓦锡提出的元素概念的定义，只是指出了元素是不能或未能分解的物质，违背了给概念下定义的逻辑规则，定义必须用肯定形式而不能否定形式。与此密切相关，拉瓦锡提出的元素概念的定义，没有指出元素这个概念所反映的对象本质属性，更确切地说，它没有表明元素这个概念所反映的

转引自凯德洛夫：《化学元素概念的演变》，陈益升等译校，科学出版社，1985 年版，第 4—5 页。

凌永乐：《世界化学史简编》，辽宁教育出版社，1989 年版，第 109—110 页。

参见凯德洛夫：《化学元素概念的演变》，陈益升等译校，科学出版社，1985 年，第 4 页。

物质形式是什么，而仅仅将未能分解的特征加到元素上，未能分解只是我们分解物质的方法和分析技术所达到的界限，这个界限具有暂时性，因此，这种元素概念也具有暂时性。那么，元素概念所反映的物质形式应当是什么呢？

恩格斯曾经指出：“化学中的新时代是随着原子论开始的（所以，近代化学之父不是拉瓦锡，而是道尔顿”。原子（atom）来自希腊的“ $\alpha\tau\omicron\mu\omicron$ ”，意思是不可分。关于原子的概念，在古代自然哲学中业已产生，并获得了初步的发展；在近代科学中，与力学相结合，形成了带有机械论色彩的原子概念。无论是在自然哲学中还是在近代科学中，原子概念的基本含义都是不可分性，原子被看作不可再分的最基本的物质微粒。

17、18 世纪，随着化学分析，特别是定量分析的发展，化学计量的经验性定律陆续被发现。从逻辑上讲，化学计量的经验性定律应当成为道尔顿提出化学原子论的前提和基础。但是，道尔顿的原子论却不是直接通过考察这些经验性定律而提出来的。

道尔顿在早期的研究中所关注的问题是物理学问题或者说是气象学问题。他注意到大气是均匀的，他对此感到疑惑，从而发生了研究兴趣。1801 年，道尔顿在英国皇家学院发表的演讲中曾经指出，在对气象进行观察和对大气的本性、成分进行研究过程中，有一个问题使他感到惊异，这个问题就是：一种混合的大气，即两种或两种以上的弹性流体的混合，为什么能够形成均匀的气体？在此之前，查理（J·A·charles）已经提出了气体体积随温度升高而膨胀的定律，一切迹象表明，气体具有微粒性，微粒之间的排斥力与热有密切联系。道尔顿提出了一种热氛原子模型。他在笔记中记下了这样的看法：物体最后原子乃是在气体状态时被热围绕之质点或核心。

道尔顿认为，原子有形状、大小和重量，相同的原子，其形状、大小和重量相同，不同的原子，其形状、大小和重量不同，相同原子之间互相排斥，不同原子之间不相互排斥，当不同气体原子混合后，它们彼此之间没有什么影响。基于这些看法，道尔顿合理地解释了他提出的分压定律。

道尔顿提出原子概念以后，提出了测定原子量的任务。他本人已经意识到，对原子相对重量的测定，是一个全新的课题。他曾经提出过一个假定：相同体积的不同气体在相同条件下含有相同数目的原子。如果这个假定成立，只要测出蒸气的相对密度就可以求出原子的相对重量。但是，他注意到一些反应，产物的密度小于反应物的密度，这使他意识到，测定蒸气密度的方法不能成为测定原子量的一般方法，道尔顿由此否定了上述假定。

正是在这种情况下，道尔顿转向了化学方法。在他之前，许多化学家对气体化合的重量组成进行了实验研究，积累了许多定量分析资料。但是，要从这些实验资料中计算原子量，首先需要确定“复杂原子”的组成式。为此，道尔顿不得不大胆地提出一些假定，即所谓化合的“最简规则”：两种元素 A 和 B 只能得到一种化合物时，此化合物必为二元化合物（AB），若发现两种元素 A 和 B 有两种化合物时，则应认为一个是二元化合物（AB），另一个是三元化合物 AB_2 或 A_2B ，如此等等。这些假定，在道尔顿的思想中不是毫无根据的，因为在他看来，在一个“复杂原子”中，简单原子的数目越少，体系就越稳定。AB 最稳定，因为这个二元化合物中没有排斥力。

诚然，无论如何，道尔顿提出的这些假定是带有主观任意性的，但是，

这些假定把原子概念与化学组成、化学变化结合起来了，具有了化学特征。原子已经不再仅仅是一些具有力学性质的微粒，而成为组成“复杂原子”和参加化学变化的最基本的微粒。

道尔顿将化学元素 (chemical elements) 和基本粒子 (Ultimate particles) 看成是同一的，他所说的基本粒子就是原子，这样，他就把元素和原子联系起来。依据道尔顿的思想，重量和形状、大小等相同的原子，属于同类原子，反之，则属于不同类原子。同类或不同类，主要标志是原子量。从这种观点看，元素是具有相同原子量的一类原子。将元素和原子密切联系起来，元素可以通过原子来规定，元素是具有相同原子量的一类原子的总称，原子是元素的物质内容。

从古代自然哲学的元素概念到近代的经验分析的元素概念，把元素视为构成万物的本原或组成各种物体的基本成分或要素。经验分析的元素概念提出了如何认识基本成分或要素 (不能分解或未能分解)，没有提出、更没有解决这个基本成分或基本要素是什么的问题，道尔顿则初步解决了这个问题。这个基本成分或基本要素是什么呢？回答是原子。

道尔顿的原子概念是一个新的进步的起点，但是，道尔顿的原子概念中存在着混乱和矛盾。道尔顿一方面把原子看作不可分的最后粒子，另一方面又把原子分为简单原子和复杂原子，复杂原子实质上是由原子 (或简单原子) 组成的化合物，实际上是分子，可是，他与他同时代的一些化学家，却不能接受分子概念。

分子概念虽不象元素和原子概念那样古老，但是，分子概念的萌芽也于古代就产生了。据说生活在公元前 2 世纪的一位希腊哲学家和医生阿斯克列比阿特，曾经用 一词表示堆或堆积，意思是最小微粒，这种微粒不同于德谟克利特所说的原子，它可以被破成破片。后来，法国哲学家伽森迪把这个词译成拉丁文 *molecula*，由此演变成分子。

几乎在道尔顿提出原子概念的同时，盖吕萨克和洪保持发表了他们的实验结果：氢气和氧气化合时的体积比 2 : 1。接着，盖吕萨克进行了一系列气体化合实验，总结出气体反应体积简比定律。依据道尔顿原子论，原子在化学反应中以简单数目比相化合；依据简比定律，气体化合时其体积成简单数目比。这两者联系起来，很自然得出不同气体在相同体积中所含原子数成简单整数关系的结论。于是，盖吕萨克提出：同温同压下，相同体积的不同气体中含有相同数目的原子。这个假定遭到了道尔顿的批评，在他们之间发生了争论。这种争论引起了学术界的注意。阿佛加德罗于 1811 年发表了《原子相对质量的测定方法及原子进入化合物时数目比例的确定》一文，提出了分子概念。他当时采用了三个概念，一个是基本分子 (elementary molecule)，相当于原子，另一个是组合分子 (Integrate molecule)，系指化合物分子，第三个是组成分子 (Constituent molecule)，指的是单质分子。他指出，任何气体中组合分子的数目总是相等的；任何简单气体的组成分子都不是由单个基本分子组成的，而是由一定数目的基本分子依靠吸引力结合而成的，而且当一个物质分子和另一个物质分子形成组合分子时，

由一个物质的组成分子分裂成 $\frac{1}{2}$ 、 $\frac{1}{4}$... 数目的基本分子，与另一个物质的组成分子分裂成的 $\frac{1}{2}$ 、 $\frac{1}{4}$... 数目的基本分子相结合，由此形成的化合物的组合

分子数目就变成双倍、四倍……

阿佛加德罗的思想表述得很清楚：第一，在同温同压下相同体积的任何气体中含有相同数目的分子；第二，单质分子不是由单个原子组成的，而是由一定数目的原子组成的；第三，单质分子分裂成原子，不同原子结合成化合物分子。阿佛加德罗提出的分子概念和分子假说，核心内容是单质分子及其与化合物分子的关系。道尔顿的复杂原子实质上是化合物分子，道尔顿不承认分子概念，主要障碍在于单质分子。在他看来，同类原子相互排斥，无论如何也不能彼此结合成分子，况且，单质分子的概念与电化学二元学说的基本思想格格不入，因此，分子概念提出以后，没有得到化学家们的承认，以致延误了近半个世纪之久。

在阿佛加德罗之后，安培（A·M·Ampere）和戈丹（A·M·Gaudin）相继提出了分子假说，特别是戈丹明确划分了原子和分子，消除了术语上的不明确性。从阿佛加德罗到戈丹，分子概念获得了确定的含义：分子是由原子组成的，是物质、特别是气态物质能够独立存在的最小微粒，单质分子是由同种元素的原子组成的，化合物的分子是由不同元素的原子组成的。应当指出，一些著名化学家没有承认分子假说，不等于说他们根本不使用分子术语，尤其是在1833年戈丹明确使用分子这个术语以后，对一些化学家产生了一定影响。但是，尽管如此，在19世纪前半期，化学家们使用的术语是非常混乱的，对分子概念的理解也是很不一致的。直到1860年，经过坎尼查罗的有力论证，分子概念才在化学界得到普遍承认。

19世纪后半期，基于原子分子理论，元素、原子和分子这三个概念之间联系被揭示出来了。单质分子是由同种元素的原子组成的，元素是具有相同原子量的一类原子，是组成单质分子的基本成分，单质分子则是元素在自由状态下的存在形式；同时，元素又是组成化合物分子的基本成分。在这两种情况下，元素都是一定种类的原子。

1869年，门捷列夫发现了元素周期律，并将元素组成了周期表。在发现了元素周期律和组成了元素周期表以后，每种元素在周期表中占有一个“位置”，这个“位置”一经建立反过来就成为元素的特征，元素表现为在周期表中占据一定位置的一类原子。

19世纪末，以电子和天然放射性的发现为开端，元素、原子和分子概念发生了进一步演变。电子的发现打开了原子的大门，人们认识到，原子不是不能分的、不可破的，它也有自身的组成和结构。随着原子模型的建立和不断改进，人们对原子的理解也不断深化，对元素的认识也不断深化。由于发现了天然放射性，对放射性元素而言，不可分性、绝对不变性已经失去了意义。同位素的发现又表明，同一种元素的原子在质量上和稳定性上可以是不同的，原子量不是元素的本质特征，而原子序数或核电荷数才是决定元素在周期表中“位置”的决定性因素。随着对原子内部结构认识的深入，人们不仅肯定了原子在分子组成及其化学变化中的地位和作用，而且进一步揭示了原子如何形成分子，原子怎样参加化学反应。这就是说，人们对分子的认识也逐步发展了。

20世纪，在对橡胶和纤维素等物质进行研究的基础上，施陶丁格（H·Staudinger）提出了大分子（Macromolecule）概念。他指出，橡胶是由数目很多的异戊二烯组成的，这个数目是不固定的，即使是纯橡胶，也是由异戊二烯的聚合物的同系物组成的，这些同系物仅仅是异戊二烯的数目不

同。按理说，化学家们研究了许许多多有机化合物，碳碳相互结合能够形成很长的碳链，照此推论下去，从小分子进一步认识大分子，也就是高分子，不应当有什么严重障碍。可是，正如分子中原子数目的增加将会引起分子性质的质的变化一样，从认识小分子到认识大分子，也就是从认识低分子到认识高分子，是认识上的飞跃，实现这种飞跃经历了曲折的过程，发生过激烈争论。以奥斯特瓦尔德为代表的胶体化学学派认为，橡胶等物质是小分子通过分子间力结合起来的，以施陶丁格为代表的有机化学派则坚持认为，橡胶等物质是通过化学键将众多原子结合起来的大分子，高分子物质的性质主要决定于它们的结构而不是分子间的缔合力。在这场争论中，以施陶丁格为代表的有机化学派的观点，不断得到实验的支持。美国化学家卡罗瑟斯（W·H·Carothers）等人从合成的角度发展了高分子概念。

2. 从亲和力到化学键

亲和力（affinity）或化学亲和力（chemical affinity）是个古老的概念，曾经是化学中的一个基本概念。这个概念最早是由德国炼金家阿尔伯特·马格努斯（Albertus Magnus）提出来的，其本意是姻亲关系，他试图用以解释物质变化的原因。后来，到 17、18 世纪，作为化学变化原因的亲和力，一方面与微粒学说结合在一起，另一方面又与力学密切联系，所谓亲和力，具有纯粹力学的性质。

18 世纪末、19 世纪初，化学家们基于对物质的组成和变化的研究，对于原子之间相互结合已深信不疑。原子之间依靠什么力量相互结合呢？抽象的亲和力已不能令人满足，同时，人们对静电作用有了较深入的研究。正是在这种情况下，贝采里乌斯提出了电化学的二元学说，把原子之间的结合归结为静电相互作用。在这个意义上，亲和力被归结为静电吸引力，亲和力就是静电相互作用力。

与此差不多同时，在道尔顿提出的简单原子结合成复杂原子的简比规则中，已经包含了简单原子相互结合存在着一定的数量关系的思想。这就是说，早在 19 世纪初期，基于化学研究，对于亲和力的认识，在质和量两个方面都获得了发展。质的方面，依据贝采里乌斯的学说，表现为静电作用力；量的方面，原子之间以一定数量关系结合。从物质组成方面来看，亲和力是使原子相互结合的力，是静电力，这种力与原子之间结合数量的经验资料相联系，导致了原子价（或化合价）概念的产生。

1852 年，弗兰克兰（E·Frankland）在其他化学家（如武兹、霍夫曼、威廉姆逊等）思想的启发下，从实验研究中发现，化合物中每一元素的原子亲和力都以一定数目得到满足，由此提出了化合力（Combining power）概念，这个概念的提出，一方面是亲和力概念的发展和具体化，另一方面又是原子价概念的先声。

1854 年，奥德林提出了取代值（Replaceble Value）概念，以表示含氢化合物中的氢被其他元素或基取代的数量。1857 年，凯库勒研究类型式时提出了基数（basicity numbers）、原子结合数目，原子数或亲和力数（affinity numbers）等概念。1858 年，库柏进而指出，“已经发现，所有元素都有一个共同固定的性质，称为化学亲和力。发现它有两个方面：（1）亲和力的种类；（2）亲和力的程度。前者是一种元素对另一种元素的亲和力……后者是元素

所表现的结合程度或限度”。库柏所说的亲和力的种类，指的是质的方面；亲和力的程度指的是量的方面。

1865年，霍夫曼在《现代化学导论》中提出，用“quantivalence”（量价）一词代替凯库勒提出的原子数等，按照他的意思，元素有1价的、2价的、3价的和4价的，与这些数值相对应，它们分别能够与其他一定数目的原子相结合。1867年，凯库勒使用了“Valecz”一词；1868年，维希哈尔斯（Carl Hermann Wichelhaus）称之为价，他解释说：“Valenz（价）作为较简单的词用来代替霍夫曼的量价，这两个词的含义是相同的。”英国化学文献从1869年开始使用“Valecy”一词，后来，在美国化学文献中使用了“Valence”，这两个词是同义的。

在化合价概念形成过程中，也提出了化学键概念。键（bond）或化学键（Chemical bond）是谁最先提出来的，在化学史文献中有不同说法。从有关的资料可知，布特列洛夫于1863年在一篇文章中说过“原子之间的化学键合方式”，“原子之间的化学键”之类的话，“сВ”在俄文中有结合、键合键等含义，无论怎样翻译，布特列洛夫指的是原子之间的结合，是键的意思。1866年，弗兰克兰也指出，他使用键（bond）这个词表示将原子结合在一起的作用，但是他提出和使用这个词主要是强调其数量方面，即键数。

原子价和化学键，有着共同的理论来源，它们都是从亲和力概念演化而来的，原子价表现为亲和力的整数量度，化学键表示亲和力的性质，表现为化学结合的一种作用。如果说原子价可以看成原子的结合能力，化学键则可以看成是原子之间的已经实现了的化学结合，价数等于键数，从数量上看，二者是等价的。

应当指出，在19世纪下半期，由于科学水平的限制，化学家对亲和力本性的认识还处于唯象阶段，因此，对亲和力的数量方面的认识被提到了首要地位，这样，在19世纪，化合价或原子价自然成为化学中的重要概念，而化学键概念被挤到后面去了。正是在原子价概念基础上，产生了化学结构概念和理论。

提到化学结构，正如前面已经讲过的，离不开组成，组成说的是成分，物质的成分或化合物的成分。组成包含着组成之间的关系，组成之间的关系可分为位置关系和结合关系，位置本身就是一种关系，是次序和方位关系，结合关系则是各成分间的相互作用关系，前者可以看作外部关系，即各成分之间的关系，后者可以看作内部关系。1858年，凯库勒在《论化合物的结构和转化以及碳的化学性质》一文中开始使用结构概念（Constitution），阐述了碳原子在有机化合物中是如何联结的，凯库勒把结构看作是一种建筑，重点在于外部关系，在于原子的排列。1861年，布特列洛夫在《论物质的化学结构》中把原子的相互结合称为化学结构，布特列洛夫的着眼点在于内部关系。1874年，范特霍夫和勒贝尔分别发表论文，提出了碳的四面体模型，建立了空间结构概念，实际上是以原子价概念为中心，将原子之间的结合关系和空间关系统一了起来，形成了空间构型概念。后来，到20世纪，哈沃斯（W·H·Howarth）进一步提出了构象（Conformation）概念，50年代以后，巴顿（D·H·R·Barton）提出和发展了构象分析（Conformation Analysis）

凌永乐：《世界化学史简编》，辽宁教育出版社，1989年版，第179页。

库兹涅佐夫：《化合价学说史》（俄文），科学出版社，1977年，第44页。

概念，构象分析的基本信条是认为分子的物理和化学性质与其占优势的构象有关。

在化学结构概念和理论的发展中，化学家们在关注化学结合的数量和方式的同时，越来越关注化学结合的本性，越来越想知道，在化学结构式中连接原子的短线表示的是什么，也就是原子价或化学键的本质是什么。1865年，法国化学家杰拉奥(De la vaud)首次提出原子中存在“次原子”的概念，他把“次原子”视为化合价单位的物质承担者。在杰拉奥的猜测中，我们已经影影绰绰窥见到原子内部结构和原子之间化学结合新图象的萌芽。

到19世纪80年代，尽管原子不可分的观念在整个科学界仍然占据着统治地位，但是一些化学家却从化学经验事实中，在探索化学键和化合价的形成原因过程中，逐步接近了原子复杂性的思想。例如，罗森(W·Lossen)于1881年指出，化学家们正在期待着了解亲和力单位是什么。里凯于1888年提出，每个价键都与两个相反电粒子的耦和或偶极有联系，他还提出碳原子有一层以太外壳，原子本身是特殊亲和力的载体，以太外壳是形成价键的场所，每个价键都取决于两个相反电极的存在，该电极固定在直线两端，他把这样形成的体系称为偶极。1888—1889年，威利森努斯提出，原子不是像点一样的能量载体，而是有一定空间的，是由原始原子组成的。所有这些都说明，已经产生了原子具有复杂性的思想的萌芽，但所有这些又都仅仅是猜测和假说。在经典化学范围内，关于化学键和化合价的理论，还只能是唯象的理论，关于化学键和化合价的概念还只能反映化学结合的外部关系，原子之间的连线就是它的直观表现形式。

自从发现电子以后，科学家们一方面继续研究电子的性质，研究原子的电子结构，另一方面开始研究电子与化学结合的关系。20世纪初期，雷姆赛(W·Ramsay)提出了一种见解，他认为化学键的物质承担者是电子，如Na和Cl结合形成NaCl，他以NaECl来表示，E是电子，在这个式子中，化学键就是由电子形成的化学结合。在玻尔建立了原子电子层结构理论以后，离子键、共价键概念相继被提了出来，并以此为基础，电子对键的概念获得了进一步发展。朗缪尔(I·Langmuir)明确提出了共价键概念，他认为两原子共享电子对形成的键是共价键，由于电子转移形成的键是电价键，他还进一步提出，电子对可分别由两个原子提供，也可以由一原子提供为两原子共享，这好像是借用电子对实现联合，由此演化成配位共价概念(Coordinate covalency)。

量子力学建立以后，很快被应用于研究化学键和化学结构。众所周知，以薛定谔波动方程为基础，形成和发展了价键理论和分子轨道理论，进一步揭示了化学键的本质，并演化出定域键、离域键、 π 键、 δ 键等新的概念。

从亲和力到化学键，标志着对化学结合的认识的不断深化和发展。以亲和力概念为出发点，随着对化学结合认识的不断深入，不断提出新的概念，使亲和力概念在新的概念中得到体现，并随着新的概念的演变而演变。

3. 从自由能到活化络合物

我们已经多次指出过，物质的组成和结构与化学反应是分不开的，是紧密联系在一起的。研究组成和结构与亲和力概念密切相关，研究化学反应最初也与亲和力概念相联系，是与寻求亲和力的量度分不开的。一些化学家从研究亲和力出发，将反应速度和化学平衡结合起来，从平衡中研究过程，逐

步认识了反应速度与化学平衡之间的联系和区别，反应速度与反应物质量之间的关系。还有一些化学家，试图从化学运动形式与其他运动形式之间的关系去探索量度亲和力的途径和方法。如有人设想化学反应热效应可以作为亲和力的量度，有人试图从化学反应与电的关系去测定亲和力，都没有成功。热力学建立以后，很快被应用于化学反应的研究。1875年，贝特罗提出“最大功原理”：任何一种无外部能量干扰的纯化学变化，向着产生能释放最大热量的物质或物质系统的方向进行。1882年，赫姆霍兹(Helmholtz)指出，化学反应释放的热量不是亲和力做功的量度；他把化学能分成两部分：一部分是能够自由地转化为其他形式的功的部分，另一部分是只能以热的形式释放出来的部分。前一部分叫做自由能，可由熵和内能引出：

$$F=U-TS$$

F即为自由能，叫做赫姆霍兹自由能；在等温条件下，TS代表体系内能中由于熵效应不能做功只能以热的形式释放的那部分能量，这部分能量即为束缚能。对于可逆、等温过程，赫姆霍兹自由能的减少，等于体系对外界所能做的功，也就是最大功。他认为决定亲和力作用方向的是自由能，而不是束缚能。自由能的特征是能够使化学反应做机械功，束缚能是潜在的热。这样，赫姆霍兹把自由能和热区分开来，对最大功原理提出了修正，确定了判断化学反应方向的判据，即向自由能减小方向进行，证明了恒温恒压条件下达到化学平衡的条件是自由能达到最小，自由能减少是可望获得最大功。

吉布斯也曾对自由能概念进行了讨论，并提出了一个状态函数G，后来被称为吉布斯自由能，其物理意义是，在可逆、恒温、恒压条件下，体系吉布斯自由能的减少等于体系所能做的最大非膨胀功，对于不可逆过程，体系做的非膨胀功小于吉布斯自由能的减少。

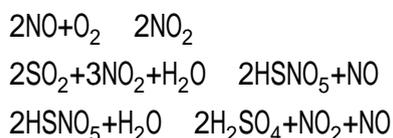
自由能概念反映了状态关系，自由能本身就是一个状态函数，它与化学反应的方向和限度有关系。但是，化学反应以何种速度进行，这是有关化学反应的另一个重要问题。这个问题涉及反应物浓度、反应温度、催化剂等诸多因素。1889年，阿伦尼乌斯注意到，如果认为温度变化只影响分子的运动速度、碰撞频率等，不足以说明温度对化学反应速度的影响程度，于是，他提出了活化分子概念。活化分子与能量相关，活化分子是比一般分子具有较多能量的分子，或者说是吸收了活化能处于活化状态的分子。1909年，特劳兹(Trautz)提出反应物分子必须处于活化状态才能发生化学反应。后来以此为基础，建立了双分子反应碰撞理论。

20世纪30年代，化学家们应用量子力学和统计力学理论研究化学反应速度，建立了过渡态理论，提出了过渡态概念。过渡态被认为是反应物和产物之间的一种中间状态，它具有较高的势能。从结构观点看，它是反应物分子碰撞过程形成的一种临界构型，也称为活化体。从活化分子到活化体，标志着人们的认识从状态深入到过程。

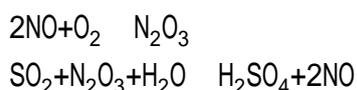
反应过程的研究，还涉及自由基。自由基具有活化特征，好像活化分子，它可以引发化学反应，使链增长；又具有过渡态或活化体的特征，它也是反应过程中的中间态、中间阶段，链式反应由它引发，它又在反应中产生。在一定意义上可以说，链式反应中的自由基是活化分子和活化体这两者的特性的统一。

过渡态、中间状态或活化态，是化学反应中的重要概念。众所周知，谈到化学反应不能不涉及催化。催化概念正是在研究化学反应过程中逐步形成

的。19 世纪初，法国的克莱芒 (F. cle ' ment) 和德索米 (C. B. Decormes) 在研究二氧化硫于空气中氧化成三氧化硫的反应时，注意到氮的氧化物所起的作用，他们推测可能是一氧化氮先与空气中的氧发生作用生成活泼的中间化合物，再与二氧化硫作用，把氧交给二氧化硫使之转化为三氧化硫，一氧化氮又从中得到复原。1812 年，戴维提出了类似的看法，可用如下反应式表示：



这个过程不断反复进行，其中 NO_2 是中间化合物。1835 年，贝采里乌斯提出，中间化合物不是 NO_2 ，而是 N_2O_3 ，反应式如下：



1851 年，威廉逊指出，乙醇在硫酸存在下的脱水反应，是乙醇先与硫酸生成乙基硫酸，乙基硫酸与乙醇作用生成乙醚，分解出硫酸，乙基硫酸是中间化合物。1930 年，邢歇伍德 (C. N. Hinshelwood) 等人以碘蒸气作催化剂，使乙醛蒸气加热分解，发现反应速度与催化剂浓度成正比，而催化剂碘蒸气的浓度在反应过程中保持不变，这就证明催化剂参与了化学反应但在反应中不断复原，证明了在反应中生成了活性中间化合物。依据这种理论，催化是催化剂参与反应生成活性中间化合物、进而分解出催化剂和产物的过程。

活性中间化合物，是反应过程中产生的中间产物，又是进一步反应的化合物。20 世纪 30 年代以后，又形成了催化活化过渡态概念。反应物分子经碰撞、接触后形成活化络合物，再转变为产物，活化络合物是一种中间过度态，它的形成除了分子碰撞外，还与固体催化剂的存在有关。反应物分子在催化剂表面由于活性中心的影响，被吸附的分子发生变形，化学键弱化，于是形成了吸附活化络合物，使反应活化能降低，从而促使化学反应发生。在中间化学吸附概念的基础上，进一步形成了多位催化概念。所谓多位催化，意思是说对反应物分子发生影响的，不只是一个活性中心，常常是多个中心。以活性中心概念为基础，还出现了活性集团催化概念，它吸收了活性中心概念的内容，同时又指出催化活性中心的载体不是晶体而是非晶相中几个原子组成的集团。此外，还发展了催化作用的电子概念，等等。

催化概念随着化学的发展，特别是随着催化理论的发展而不断发展。从中间化合物概念到活性集团催化概念和催化作用的电子概念，核心的内容或基本的思想是中间物、过渡态，如刚刚指出的，活性中间化合物，催化活化过渡态，活性中间化合物实质上也是一种过渡态，至于活性中心概念、多位催化概念等，则进一步说明了催化过程是在催化剂的哪个部位进行的。总之，活化、过渡态，不仅是一般化学过程中的重要概念，而且是催化化学过程中的重要概念。

活化分子，活化络合物，自由基，这三个概念反映了人们对化学反应过程认识的不断深入。这三个概念都与活化有关，“活化”分子，“活化”络合物，顾名思义，指的是活化的客体，自由基没有活化字样，实质上也具有活化特征。

二、化学概念的内容和实质

1. 化学基本概念的发展逻辑

从化学基本概念的历史演变中可以看出，就概念所反映的对象的特点而言，化学基本概念可分为三类：实体概念，关系概念和过程概念。实体概念是以具体化学客体为反映对象的概念，如元素、原子、分子、高分子等，都是实体概念。当然，化学中的实体概念，除了这些概念以外还有很多很多，例如，酸、碱、盐、溶液、胶体、氧化剂、还原剂、配位化合物，等等，都是以具体化学客体为反映对象的概念，都是实体概念。关系概念是以具体化学关系为反映对象的概念。亲和力、原子价、化学键、化学结构等，它们反映的是具体的化学关系，原子之间的相互作用关系和空间关系，都是关系概念。同样，除了这些概念以外，化学中还有许多关系概念，如酸性和碱性，氧化和还原，分解和化合等，也都是以具体化学关系为反映对象的概念，都是关系概念。过程概念反映的则是具体的化学过程，如化学反应、反应机理、自由能、过渡态、自由基等，反映的都是过程，或与过程直接相关。

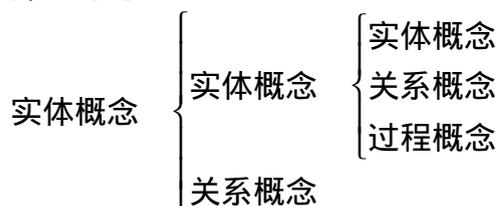
在逻辑学中，根据概念所反映的对象是事物本身还是事物的某种属性，将概念分成实体概念和属性概念。我们所说的关系概念大体上相当于逻辑学中的属性概念，化学概念所反映的事物的属性，表现为化学客体的性质，它们是在关系中表现出来的，离开了关系，性质无从表现。例如，酸性是相对于碱性而说的，碱性是相对于酸性而言的，酸性和碱性只有通过关系才能获得表现。氧化性和还原性也是如此，氧化性在与还原性的关系中表现出来，还原性相对于氧化性获得表现。除了反映客体性质的概念（逻辑学中称属性概念）以外，化学中还有过程概念，它们所反映的对象既不同于客体又不同于关系，具有特殊性，即过程性。

这三类概念所反映的对象是紧密相关的，实体具有一定性质，在实体关系中表现出来，实体关系形成过程。例如，酸和碱是实体概念，酸性和碱性是关系概念或属性概念、性质概念，而酸和碱发生作用形成中和反应，中和反应是过程概念。氧化还原反应是过程概念，氧化性和还原性是关系概念，而氧化还原反应以及氧化性和还原性的物质载体是氧化剂和还原剂，反过来说，氧化剂和还原剂这两种客体发生关系形成氧化还原反应，在该反应中相应的客体表现了氧化性和还原性。

从基本概念的历史演变来看，化学概念有其形成和发展的逻辑次序。大体说来，这个逻辑次序是：最初，从 17 世纪至 19 世纪初期化学中形成的主要概念是实体概念，或者用化学术语来表示，这个时期形成的主要概念是组成概念，如元素、原子、分子等概念；19 世纪前半期，继实体概念之后或与实体概念发展的同时，产生了关系概念，如原子价、化学键等；从 19 世纪中叶开始，过程概念形成了，发展了，并被提到了显赫地位。应当强调说明，上述历史的或逻辑的次序，仅仅是就主要概念或基本概念的形成和发展而说的，决不是说，产生了关系概念，实体概念不再产生，已有的实体概念不再发展了，也决不是说，产生了过程概念，实体概念和关系概念不再产生，已有的实体概念和关系概念不再发展了。情况恰恰相反，在产生实体概念过程中，关系概念和过程概念在孕育中，产生了关系概念似后，还继续产生新的实体概念，原有实体概念还在继续发展；产生了过程概念以后，实体概念和

关系概念也在继续产生和发展。

如果将上述内容用公式化的形式来表示，那么化学基本概念产生和发展的逻辑应当是：



在现代化学中，已经形成了实体概念、关系概念和过程概念，现代化学的概念体系就是由这三类概念组成的有机整体。

化学中的概念，按层次分，可分为化学概念、科学概念、哲学概念。这就是说，化学中应用的概念，不限于专门的化学概念，一般科学概念和哲学概念，在化学中也起着重要的作用。例如，能、熵等概念是物理学概念，而且具有更为普遍的意义，体系、过程、时间、空间等，已不仅仅是科学概念了，实质上已超出了科学的范围成为哲学范畴了。这些概念在化学中是经常使用的，是化学中的重要概念，或者说，也是化学中的基本概念。

值得指出的是，在化学概念的形成和发展过程中，化学概念与哲学概念有着密切联系。元素、原子，都曾经是自然哲学中的概念，后来从中演化成化学概念。化学结构概念是在化学土壤中孕育、形成和发展起来的，从化学结构概念逐步抽象，形成了结构概念，不仅成了一般科学概念，而且也成为哲学的一个重要范畴了。在当代，无论是科学还是哲学，都在研究结构，都把结构作为一个重要概念，在此基础上建立自己的结构理论。过渡态是化学中的一个重要概念，现在，过渡态也逐步具有了更为普遍的意义，而且有成为哲学范畴的趋势。关于哲学概念和科学概念的关系，哲学概念和化学概念的关系，具体些说，如何从哲学概念演变为科学概念或化学概念，或者反过来，如何从化学概念和科学概念上升为哲学概念，哪些概念能够上升，哪些概念不能上升，通过什么途径上升，如此等等，都是有待进一步研究的问题，对这些问题研究，无论对化学、科学还是哲学都具有重要的理论意义。

化学基本概念的演变，大体上说，有三种基本形式：一种形式是新概念代替旧概念，另一种形式是从旧概念中分化出新概念，第三种形式是名不变实变。

新概念代替旧概念，典型的例子是从亲和力概念到原子价、化学键和自由能概念。如前所述，亲和力概念是化学中的一个古老概念，它即表示化学结合的力，也表示化学反应的推动力。在 19 世纪中叶，从化学结合方面来说，亲和力概念逐步为原子价和化学键概念代替了，特别是在现代化学中，一般不再使用亲和力概念，而使用化学键概念。在这个意义上说，化学键概念是对亲和力概念的否定，在语词上用新术语代替了旧术语；但是这种否定也不是绝对的否定，而是辩证的否定，在否定中有继承的因素，化学结合的思想内容被继承了，亲和力在化学键中得到了体现，并且获得了发展，关于化学结合的原因、作用机理等，要比亲和力概念的内容深刻得多、丰富得多了。从化学反应方面来说，自从吉布斯提出自由能和化学势概念以后，许多英语国家相继采用吉布斯自由能和化学势，来量度化学运动，古老的亲和力概念逐步消声匿迹了。

从旧概念中分化出新概念。如前所述，在化学中确立原子概念以后，基于新的经验事实产生了新的矛盾，从原子概念中分化出分子概念。这种分化，在道尔顿原子论中就已经萌芽了，他把原子分为简单原子和复杂原子，这是将原子一分为二，分成两类原子，我们已经说过，道尔顿的复杂原子实质上是化合物或称化合物分子，只不过他没有提出分子概念。经过众所周知的曲折的历史过程，最终完成了这个分化，形成了分子概念，也就是从原子概念中分化出了分子概念。

化学概念的分化，还有其他一些形式。一种形式是正名，即把原来模糊不清的概念分清了，用明确的概念反映了不同的对象。例如，在 18 世纪以前，混合和化学结合不分，混合物和化合物不分，把混合看作化学结合，把混合物看作化合物，波义耳在《怀疑派化学家》一书中使用的“mxt bodies”，实质上指的是化合物。后来，混合物分化成机械的混合物（mechanical mixture）和化学的混合物（chemical mixture），从化学的混合物演变为化学的结合（chemical combination），最后演变为化合物（compound）。另一种形式是划分，即从原来概念所反映的对象中划分出了不同对象，用新的术语表示出来，分化出不同的概念。例如，空气这个概念，原来认为反映的是单一气体，普利斯特里从实验中发现了“脱燃素空气”和“燃素化了的空气”，从单一气体中划分出了不同气体，经过其他人的进一步研究，脱燃素空气实为氧气，燃素化了的空气实为氮气。这样，从空气这个概念中划分出了氧气和氮气。同时又划分出二氧化碳气，水蒸气。后来，又从空气中分化出了稀有气体，如此等等。

名不变实变。概念在语词表达上未发生变化，也没有分化出新的概念，但是概念的内容变化了、发展了。化学基本概念的演变，大都具有这种形式。如元素，原子，分子，酸碱，等等，自它们形成开始，概念的名称未变，但概念的含义变了。

如前所述，元素概念自波义耳将其作为不能分解的、组成化合物的基本成分开始，元素这个术语未变，内容几经变化。道尔顿建立原子论后，元素概念的含义可以表述为具有相同原子量的原子。门捷列夫发现元素周期律、建立元素周期表以后，每种元素在元素周期系中都占据一个位置，这个位置反过来成为元素的基本特征，元素被理解为在周期系中占据一定位置的一类原子。20 世纪初期，莫斯莱（H·Moseley）确定了原子在周期表中的序号，即原子序数，范登布洛夫和查德威克等人提出和确定了原子序数等于核电荷数。这样，元素乃是具有相同核电荷数的一类原子的总和。

原子概念，略去自然哲学的和机械论的原子概念不说，在道尔顿的理论中被理解为组成化合物和参加化学反应的最基本的微粒。在建立原子分子论以后，原子成为组成分子和参加化学反应的最基本的物质微粒。此后，原子概念的含义又几经变化，经过了四个发展阶段：第一个阶段，与原子的均匀模型相联系，原子被看成电子嵌在均匀分布的正电荷中而构成的体系；第二个阶段，在建立了原子有核模型以后，原子被视为小太阳系；第三个阶段，玻尔建立氢原子电子结构模型，人们对原子核外电子运动的性质有了进一步认识；第四个阶段，是量子力学建立以后的发展阶段，进一步揭示出核外电子运动的规律。从现代理论来看，原子是由质子和中子组成的核与核外电子

层构成的体系，是化学组成、结构和化学变化的基本物质微粒。

同样，分子概念在“分子”这个术语之下内容发生了深刻的变化。在分子概念刚刚提出的时候，分子被理解为物理学上的最基本微粒，它是由原子组成的；依据现代观点，分子是由原子核与核外电子组成的、能够独立存在的物质体系或微粒，因为分子不仅可以由两个或两个以上的原子组成，也可以由一个原子组成，稀有气体就是由单原子分子构成的。无论是单原子分子还是多原子分子，都是核电子体系，但是这种核电子体系与原子的核电子体系不能等同，作为分子的核电子体系是能够独立存在的，而作为原子的核电子体系是不能独立存在的。

再以酸碱概念为例来说明。酸碱概念是在人类实践中逐步形成的。古代就已制得醋，人们从其味道中逐步形成了酸的概念，人类很早就接触了天然存在的碳酸钠等，从其与酸作用中了解了其性质，逐步形成了碱的概念。18世纪中叶，威廉姆从性质上定义了酸和碱，18世纪下半叶，拉瓦锡又从化学组成上提出了酸碱定义，酸是非金属元素和氧组成的二元化合物，碱是金属元素和氧组成的二元化合物。19世纪后半期，随着电离理论的建立，酸被认为是在水溶液中能离解出 H^+ 的物质，碱被理解为能离解出 OH^- 离子的物质。20世纪，基于质子理论，酸和碱的含义又发生了变化：酸是能放出质子的物质，碱是能够接受质子的物质。与此同时，还提出了酸碱的电子理论：酸被理解为任何分子或离子在反应过程中能接受电子对的物质，碱则被认为是含有可以在反应过程中配给电子对的分子或离子。

无需再举更多的实例，仅从这些例子就足以说明，名不变实变是化学概念，特别是化学基本概念演化的基本形式，从这种演化中可以了解化学基本概念的内容，理解它们的实质。离开概念的历史演化，孤立地、静止地看问题，很难正确认识概念的内容和实质。

2. 化学基本概念之间的关系

化学基本概念的内容和实质通过它们之间的关系被揭示出来。一般认为哲学范畴，特别是唯物辩证法的范畴，都是成对出现的，如物质和意识，时间和空间，原因和结果，偶然性和必然性，同一和差异，质和量，等等；自然辩证法的范畴，也是成对出现的，如系统和要素，整体和部分，个体和群体，结构和功能，有序和无序，连续和间断，等等。化学基本概念似乎不是这样，从表现来看，元素、原子、分子、高分子、原子价、化学键、亲和能、过渡态，等等，似乎都是单个概念，即单独出现的概念；其实，若从其实质来看，化学基本概念也不是单个概念独立存在的，而是与其他化学概念相关联的，正是在这种概念的关联中、在概念之间的关系中，反映着客观的辩证法。因而，化学基本概念的辩证内容，要从概念关系中表现出来。

下面，我们对化学基本概念的辩证内容作些具体分析。

元素是现实的存在，是化学中的实体，元素概念标志这种现实存在，反映这种化学实体。但是，元素概念作为一种科学的化学的基本概念，不能像日常生活中使用的概念那样，仅凭日常生活经验去理解和使用它，而必须理解其科学意义，这时，就需要分析它与其他概念之间的关系。从化学的观点看，元素概念的意义是通过三种关系表现出来的，这三种关系是：元素和化合物，元素和原子，元素和单质。

我们先讨论元素和化合物的关系。当我们把元素理解为物体的组成部分

的时候，其潜在的前提是承认由元素组成的物体是复合的，正如黑格尔说的，把元素理解为物体的普遍组成部分，其“出发点在于认为一切物体都是复合的，于是思想所关切的事情就是把质上得到无限多的规定的、个体化的物体归结为少数非复合的、因而是普遍的质”。其实，由元素组成的物体是复合的这句话本身是同语反复，由什么什么组成当然是复合的。如果不要这种同语反复，剩下的就是元素与复合物体的对立和关系。化学中理解的元素，在历史上，首先以物体的个体性为前提，然后试图分解这种个体性，这就意味着这种个体性是能够分解的，是复合的，反过来说，它就是由元素组成的。

化学中所说的个体性是什么？在化学史上曾被认为是混合物，实质上是化合物。这就是说，元素作为基本组成和分解物质的限度，只有将它与化合物关联起来才能获得理解，离开了这种关联、这种关系，是无法理解的。道理很简单，当我们说元素是基本组成、是分解的限度的时候，总是说它是什么东西的基本组成，是分解什么东西的限度，具体地说，就是化合物的基本组成，分解化合物的限度。如果抽去化合物这个元素的对立物，关于元素是什么我们就什么也说不出。从这个意义上说，元素和化合物是一对范畴，元素是化合物组成部分，化合物是由元素组成的，两者各以对方为存在的前提，并在与对方的关系中表现出自身的内容，揭示出自身的实质。

概念之间关系是多样的，随着化学的发展，元素与化合物的关系转化为元素与原子的关系。依据道尔顿提出的化学原子论，元素被理解为具有相同原子量的原子的总和，在这里，元素与原子建立了联系，要揭示元素概念的意义必然涉及原子概念，涉及元素概念与原子概念的关系。从元素与化合物的关系中，如刚刚说过的，元素是组成各种各样化合物的基本成分，如何认识这种基本成分？通过分解方法去认识。由此提出了判断什么是元素的标准，即未能分解或不能分解。但是，在这种关系中，仅仅提出了如何认识基本组成的问题，没有提出、更没有解决这个基本组成是什么的问题。这个问题在元素与原子的关系中得到了初步解决。若要问元素作为组成化合物的基本组成，它究竟是什么，它的具体物质形式是什么，可以回答是原子。将元素和原子联系起来，通过原子说明元素的意义，用逻辑学的术语来表述，就是通过原子概念给元素概念下定义，元素是同类原子的总称，原子是元素的物质内容。以原子为内容的元素概念，成为进一步演变的起点，在元素概念的进一步演变中，这个基本内容没有改变，改变的只是作为相同种类原子的具体特征，是原子量，还是在周期表中的位置，抑或是原子核内质子数或核电荷数，等等。

分子概念提出以后，又产生了一种新的关系，即元素与单质分子的关系。在原子分子论建立以前，有一个问题一直未弄清楚。众所周知，波义耳一方面认为元素是简单物体，另一方面又认为元素是组成物质（化合物）的基本成分、基本要素；拉瓦锡继承了这种思想，一方面把元素视为未能分解的物质，另一方面又在元素表中列出了元素，元素表中的元素具有独立存在的形态。可是，化学实践表明，某种化合物，如氧化汞，可以分解成氧和汞，它们都是元素，作为元素应当是不能再分的，但它们又具有独立存在的形态，即氧气和汞。作为独立存在的物质形态的氧气和汞与作为氧化汞基本组成的氧元素和汞元素是一回事吗？实际上，直到道尔顿建立原子论为止，一直把

这两者混为一谈，或混淆不清。原子分子论建立以后才解决了这个问题。依据原子分子论，单质分子是由同种元素的原子组成的，元素是组成单质分子的基本成分，单质分子则是元素在自由状态下的存在形式；单质分子分解成原子，不同元素的原子组成化合物分子，元素又是组成化合物分子的基本成分。于是，元素的原子，在 19 世纪表现为不可分割的基本物质微粒，成为化合物的基本成分，从化合物中分解出来组成单质分子，以单质分子的形式得到独立的表现。

三种关系，即元素和化合物，元素和原子，元素和单质，它们既互相区别又互相依赖。元素是基本成分，化合物是复合物，基本成分通过复合物表现出来，离开了化合物也就谈不到作为基本成分的元素，相反亦然。元素和原子是有区别的。元素是表示组成的概念，原子可以表示组成，又能表示结构；元素是集合概念，它不能以个数相称，原子是非集合概念，它可表示原子这个类，也可以表示其中个别原子，可用个数相数。元素和原子又形成一种关系，一种相互依赖的关系，正如上述，元素是核电荷数（核内质子数）相同的一类原子，元素是原子，说明它们有相同点，而且离开与原子的关系，元素概念的内容不能揭示出来。同样，元素是原子，单质是分子，一些元素可以形成几种单质，这说明它们之间是不同的；元素在自由状态（游离状态）下的存在形式就是单质，离开单质概念，元素概念的含义得不到全面表现。三种关系、三种含义是相互联系的，元素和原子的关系是基本的，从这种关系看：元素是质子数或核电荷数相同的原子，它指出了元素概念所反映的物质内容，这是元素概念的核心，其他两种关系则指出了元素的存在形式。

原子概念，在古代产生时，反映的是物质的分立性、不连续性，与之相对的是连续性，分立性和连续性是物质的不同特性。在古代，分立性和连续性是绝对对立的，原子是不连续的、分立的，虚空是连续的、非分立的。原子是不连续的，而且是不能再分的。不能再分正是以承认有可再分的东西为前提，从化学的观点看，能够再分的是化合物。在这个意义上，原子和元素一样，与化合物相对立。道尔顿提出的原子概念，恰恰包含了上述两种关系和两方面的内容：第一种关系，连续的还是分立的，原子是分立的，是微粒，这一点是对古代原子论思想的继承；第二种关系，可分还是不可分，道尔顿把原子看作组成化合物和参加化学反应的基本微粒，这是他的发展和贡献。

在原子概念的基础上提出了分子概念，原子和分子形成了一种关系，原子作为不可分性的微粒，成为分子的基本组成单位，分子是可分的物质微粒，它由原子构成。同时，原子、分子、物体，形成了物质的结构层次，原子是基本的，是基础。随着科学认识的发展，破除了原子的不可分性，因而也就破除了分立性和连续性的绝对对立性。正像恩格斯指出的，“新的原子论和所有以前的原子论的区别，在于它并不主张……物质只是分立的，而是主张各个不同阶段的各个分立的部分（……）是各种不同的关节点，这些关节点制约着一般物质的各种不同质的存在方式”。

从原子和分子的关系中，既可以揭示原子概念的意义，也可以揭示分子概念的意义。高分子概念在其重要方面是相对于低分子而言的，高分子概念的内容和实质，是以低分子或一般分子概念作为潜在的对立物而揭示出来

的。

现在我们讨论关系概念。亲和力，无论是在古代还是近代，都表现为吸引或引力。吸引是与排斥相对而言的；但是，在化学结合问题上，吸引被提到了首要地位，排斥只是吸引的附属性质，或者说，是吸引的一种形式变换。正如前面提到的，只有当吸引在量的大小不同时，在吸引的同时必须有排斥作为补充。如甲乙两物体相互吸引形成化合物（第三个物体），当有另一物体（如丙物体）与甲的吸引大于与乙的吸引，则甲与丙相结合，分解出乙，也就是将乙排斥出来。

亲和力既是化学结合的原因又是化学反应的推动力。对化学结合来说，分为质的方面和量的方面，由量的方面演化出原子价概念，由质的方面演化出化学键概念。原子价和化学键这两个概念既相区别又相联系。原子价概念有两种含义：一种含义是自由原子的性质，另一种含义是结合原子的性质。作为自由原子的性质，原子价是原子相互结合的潜在能力，作为结合原子的性质，原子价是原子之间已经实现了的结合；化学键总是原子之间的结合或相互作用。从这点上说，这两个概念是有区别的。但是，这两个概念有着共同的思想来源，它们都是亲和力概念的具体体现。研究亲和力的质，即它的性质和本质，不能不涉及它的量，同样，研究亲和力的数量也不能不涉及它的性质。化学中通常所说的价数，是从总体上数的，在一个分子中某原子的价数，是说它能与几个 1 价原子相结合；而就每一价来说，它的数量是 1，重点是研究它的性质。在这后一层意义上，价和键是同义的。在化学史上，自贝采里乌斯提出化学结合的电学性质以后，由于对亲和力的本性（它的物理意义）一时难以搞清楚，化学研究的重点，转向了它的数量方面。因此，在 19 世纪，原子价概念显得突出。20 世纪，由于研究的重点转向了价键的本质，因而化学键概念特别引人注目。

在经典化学结构理论中，原子价是产生化学结合的力，是化学结合的原因，也是形成化学键的原因；化学键则是已经实现了的原子价（或化合价），是原子价相互作用的结果。原子价表现为化学结合的潜在能力，是化学结合的可能性，化学键则表现为化学结合的现实性，是已经实现了的化学结合。在数量上，原子价表示自由原子所具有的自由亲和力单位的数量，它与分子中原子之间已经形成的化学键的数目相等。原子价通过它的表现来量度，原因通过结果来量度。化学键的数目与价数相等，但化学键概念着重表示的是原子之间结合的性质。由此可以看出，无论是原子价还是化学键，它们的内容和实质各在与对方的联系中得到表现。

从化学反应方面看，亲和力概念被自由能等概念所代替。能在实质上是排斥。恩格斯指出，“在这里被理解为排斥的运动形式，和现代物理学所说的‘能’是同一个东西”。亲和力概念反映的是吸引的运动形式，自由能概念反映的是排斥的运动形式，在现代化学键概念中，既包含了吸引也包含了排斥，是吸引和排斥的统一。

自由能是相对于束缚能而提出的，活化分子是相对于非活化分子而提出的，过渡态是相对于始态和末态而提出的，自由基是相对于根或基而提出的，如此等等。化学基本概念的辩证内容在概念关系中表现出来，化学基本概念的实质在概念关系中被揭示出来，研究化学基本概念的内容和实质应当注意

它们之间的关系。

3. 化学基本概念与规律和理论的关系

化学概念是化学思维的工具，化学家借助于化学概念理解和把握化学现象。化学概念正像一切科学概念一样，它的语言形式是语词，如元素、原子、分子等，这些语词之所以成为化学概念，这是因为它们反映着对象的本质属性，包含着特定的内容。概念的内容，即内涵，需要表述才能为人们理解，表述已经不是语词而是语句了，与语句相联系的是判断，通过判断将概念与概念联系起来。实际上，化学家们运用化学概念总是将它们联系起来，形成一定的概念框架或概念体系，这就是规律或理论。因此概念与规律、理论是不可分割的。

化学基本概念的含义是随着化学家认识的发展而发展的，是与规律的发现、理论的建立和发展紧密联系的。诚然，没有相应的概念，不能建立理论，但是没有相应的理论，概念也就不成为概念，而只是没有内容的语词了。概念和规律、理论谁也离不开谁。在这里，我们想着重说明的，是结合规律和理论来理解概念，揭示概念的内容和实质。

如前所述，元素概念与物质组成理论密切联系着，基于对物质组成的探求，相信物质都有基本成分，它可以通过不断分解来达到，这种成分用元素一词来表示，就成为元素概念。门捷列夫发现元素周期律以后，元素概念有了新的内容：在周期系中占据一定位置的一类原子。在这种表述中，元素概念是通过周期律（规律）来定义的。

没有原子概念（或相应的别的什么概念）不能建立化学原子论，建立化学原子论后，原子概念才具有了不同于以前自然哲学原子概念的内涵，它不仅仅有大小、形状、次序等性质，而且有了新的性质，如原子量，原子价，组成化合物的最小微粒等。电子发现以后，随着原子模型的更迭，原子概念的内涵不断变化和深化。不同历史阶段的原子概念，具有不同的内涵，皆与不同历史阶段的原子理论密切相关。

化学键和原子价概念在其演变中经历了三个阶段：与经典理论相联系的概念，与电子理论相联系的概念，量子化学理论中的价、键概念。在经典理论中，仅仅指出了化学结合的现象，把化学结合的性质和数量归结为化学键和原子价；在电子理论中，初步揭示了化学结合的物质载体，或者是电子转移的结果，或者是两个原子共享的电子对；在量子化学理论中，则进一步基于电子运动规律（以薛定谔波动方程表示的）揭示了化学键的实质。随着理论的发展和对原子内部结构认识的深入，化学键和原子价概念的内涵不断变化。从这三个阶段可以看出，第一个阶段，对化学结合的认识处于现象论阶段，仅仅认识、肯定、描述（或反映）了化学结合的事实，并用价或键来表示这个事实；第二个阶段，认识了实现化学结合的物质实体即电子或电子对，也就是揭示了现象背后的实体；第三个阶段进一步揭示了实体（电子）的运动规律，认识了价或键的本质。原子价和化学键理论发展的三个阶段，分别提出和回答了三个问题：价、键表现的是什么：是化学结合；化学结合是怎样实现的？通过电子；电子为什么能实现化学结合？价键理论、分子轨道理论和配位场理论分别作了理论上的回答。

从化学概念与规律、理论的关系中应当得出如下认识：第一，要深入理解化学概念的内涵，就得深入理解与之相应的理论的内容，这就是说，应当

结合理论、通过理论来理解和把握概念，因为概念的内涵无非是理论内容的凝结，而理论的内容可以说是概念内涵的具体展开。就以化学结构理论和化学结构概念来说，从经典化学结构理论到现代化学结构理论，核心内容是对原子之间相互作用和相互关系的阐述，它很具体、很丰富，与之相联系的化学结构概念，就其实质而言，也主要反映了这两个方面，即原子之间的相互作用和原子之间的相互关系（排列次序、空间分布），因此，可以把化学结构理解为组成之间按一定空间样式发生相互作用而形成的具有一定稳定性的体系。第二，化学理论发展了，与之相联系的概念内涵也随之发生变化，因此，应当关注化学理论的发展，并从它的发展中不断审视概念的内涵。换句话说，化学概念应当与之相应理论处于同一水平，应当相互协调。以分子概念为例，依据现代化学键理论，特别是分子轨道理论，把分子作为由原子核与核外电子构成的体系来处理，也就是把它看成是一个整体，电子在分子轨道上运动；与这种理论相适应，严格地说，不应当再将分子定义为由原子组成的能够独立存在的最小微粒，而应当提出新的定义：分子是由原子核与核外电子组成的、能够独立存在的体系。这个定义包含两个要点：一个是由什么组成，我们提出原子核与核外电子组成，符合分子轨道理论的基本精神，然而单有这一点，不能将分子与原子区别开来，因为原子也是由原子核与核外电子构成的体系，因此还必须提出第二个要点，“是能够独立存在的”，有了这一点就可以将分子和原子区别开了。这两个要点结合起来，揭示了分子概念的实质，规定了分子概念的内涵，有很高的概括性和广泛的适性。稀有气体的分子是单原子分子，它是由核与核外电子构成的体系，而且能够独立存在。无限体型结晶，是由原子核与核外电子构成的，而且能够独立存在，因此也是分子。过去在一些化学文献中，把分子定义为由原子组成的、能够独立存在的微粒，“由原子组成”意味着至少有两个原子，这样就得把稀有气体的单原子分子排除在外，或在定义之后将其作为例外进行补充性说明。“由原子组成的”，与分子轨道理论的基本精神不一致，在当代科学认识已经深入到原子内部结构以及更深层次的情况下，应当从核与电子（核电子体系）层次上认识分子，确立分子的概念。

以上，我们从化学概念的发展、化学概念关系以及化学概念与规律、理论这三个方面，分别讨论了化学概念的内容和实质。在讨论中虽然对一些化学概念的含义和定义等提出了一些具体看法，然而，这里进行的讨论，重点不在于对化学概念的具体内容提出解释，而在别的方面。一般地说，化学对化学概念的具体化学含义都有说明，但是，化学只提出化学概念和使用化学概念，并从化学科学的角度对化学概念的含义作出说明，不讨论或很少讨论化学概念是怎样提出的和怎样发展的问题，更不研究应当如何看待化学概念，应当怎样分析化学概念。化学哲学不提出化学概念，它不能代替化学的职能，化学哲学却要在化学已经提出的概念的基础上，研究化学概念的产生和发展，进而说明应当如何看待化学概念，应当如何研究化学概念。从这点出发，本节结合一些化学概念所进行的讨论，主要目的在于提出在分析化学概念时应当注意的角度、方法和线索，这种分析有助于开阔视野、扩展思路，加深对化学概念的理解。

三、化学概念的特点

1. 化学概念的特殊性

化学概念与其他科学概念、特别是与物理学概念有共同性，有许多概念化学中使用，物理学中也使用，化学中的一些概念还与哲学概念有历史渊源。可是，也应当看到，化学概念有其特殊性，有其自身的特点。

首先应当指出，任何一门科学都有其特殊的学术名词或特殊的语词，这是作为一门独立学科的重要标志之一，化学也不例外，化学家对他们所研究的对象赋予一定名称，或者说用一定的语词表示他们的研究对象，并赋予一定含义，由此形成化学概念。从这个意义上可以说，自化学家为他们所研究的物质命名开始，化学就有了自己特有的概念，它们是或主要是化学概念。例如，化学元素中的氧、氢、氮、碳等等，是元素的名称，也是具体元素的概念。拉瓦锡称氧为 oxygene（英文为 oxygen），氢为 hydrogene（英文为 hydrogen），前者表示“酸产生”，后者表示“水产生”。“Oxygene”是语词，用它表示氧，同时，这个词又具有从酸产生出来的意思，将语词和含义结合在一起，指称实际存在的气体物质氧，这时这个名称就具有了概念的形式。由此类推，形形色色的元素和各种各样的化合物，都是化学中特有的概念。

其次，还应当指出，有些概念源于其他科学领域，演变为化学概念或引入化学中，与化学经验事实结合起来，具有了化学特点，也就成了化学概念。例如，物理学中能的概念，引入化学，结合化学反应中能转化特点，形成了自由能概念和束缚能概念，物理学中势的概念，引入化学，结合了化学特点，形成了化学势概念。平衡是个一般性概念，甚至可以说是个哲学概念，但在化学中表现为化学平衡，它具有特殊的含义，专指系统内物质之间发生的化学反应所达到的平衡，也就是产物的生成速率和反应物的消耗速率相等。变化和相互作用等也是一般性概念，但在化学中，变化指的是化学变化，在化学中还用化学反应这个术语来表示，指的是物质的组成或结构的改变；相互作用起初表现为亲和力，后来又从具体化学经验事实中抽提出原子价、化学键等概念。如此等等，不一而足。所有这些概念都是或主要是化学科学领域中所特有的概念，都具有明显的化学特征。

2. 基本概念和相关概念

化学概念的特点，在基本概念和相关概念的关系中也有明显的表现。基本概念是化学中普遍适用的基础性概念，如元素和化合物，原子和分子，原子价和化学键，化学组成和化学结构，化学反应，等等，是化学各个学科都离不开的基础性的概念。相关概念是与基本化学概念密切相关的概念。当然，这种区分具有相对性，有些基本概念，它们之间也是密切相关的，就它们的关系而言，也可以说一个是基本的，另一个是相关的。

17、18 世纪，元素概念已经形成，它是化学中的基本概念；同时，在那个时期，作为元素的独立存在形式的具体元素，如拉瓦锡在元素表中列出的元素，实质上是单质，不过当时还没有单质这个概念。元素中的一种特殊形式或特殊的种——氧，不仅是元素概念的具体原型之一，而且在所有已知元

素中处于中心地位。在这个意义上，氧元素成了这个时期的中心概念，与它相关的有酸、碱、盐等概念，酸、碱、盐则是化合物的具体形式。因此，总起来看，这个时期，元素概念是基本概念，与元素概念相关的是化合物概念。这就是说，相对于已经明确的元素概念，化合物概念是相关概念，虽然后者也具有基础性质，也是化学中的一个基本概念。以元素和化合物为基础，将其他更为具体的概念联系起来，形成了概念体系，这是化学中建立的第一个科学的概念体系。

19世纪，基于化学原子论而形成的是原子概念，是继元素概念之后的又一个化学基本概念。与原子概念相关的概念，首先是反映原子属性的概念，如原子量、原子价、化学键等，这些概念也都具有基础性质，但是，它们反映的是原子的属性，与原子实体密切相关，因此，它们对于原子概念来说，可以看作是相关概念。19世纪化学的发展，一方面以原子概念及其相关概念为基础，另一方面又衍生出新的基本概念，这就是分子概念和结构概念。从19世纪中叶开始，受物理学的影响，化学中以化学反应概念为基础，又产生了自由能、化学势、活化分子、活化能等相关概念。因此，综合起来，19世纪的化学，在已有的元素、化合物概念基础上，形成了新的基本概念和相关概念，它们相互关联、互相联系，构成了经典化学的概念体系。

20世纪，化学键概念被提到了首位，成了现代化学的基本概念和中心概念，以化学键概念为中心，并以探索化学键的本质为动力，产生了新的理论、形成了许多相关概念，如键能、键长、键角、定域键、离域键、离子键、共价键、配位键、 δ 键、 π 键等等；与此同时，轨道概念被移植到化学中来，成了一个基本概念，与轨道概念相关的概念有原子轨道、分子轨道、前线轨道、轨道对称守恒等概念，现代化学的基本概念和相关概念构成了现代化学的概念体系，不仅反映了化学的结构性质，而且反映了反应性能。

基本概念和相关概念的关系，大致可分为两类：一类表现为实体概念和属性概念（或如上面的分类，表现为实体概念和关系概念）的关系，如原子概念和原子量、原子价等概念，前者为实体概念，后者为属性概念，属性是实体的属性，属性是在关系中表现出来的，实体概念和属性概念之间的关系即反映了这样的关系。另一类表现为普遍与特殊或个别的关系，在逻辑中叫做属种关系。基本概念的外延宽而且包含相关概念，是属概念；相关概念的外延窄而且包含在基本概念中，是种概念。基本概念与相关概念的关系，表现为属概念与种概念之间的关系。这样的关系在化学中比比皆是。例如，元素与碱金属元素、碱土金属元素、稀土元素等的关系，化合物与无机化合物、有机化合物、配位化合物、离子化合物等的关系，化学反应与无机化学反应、有机化学反应、高分子化学反应等的关系，化学键与离子键、共价键、配位键、金属键、氢键等的关系，所有这些都是属种关系。普遍性概念与特殊性概念，或属概念与种概念的区分是相对的，特殊性概念对外延更小的概念而言，它又可以成为普遍性概念或属概念。特殊性概念的特点就在于特殊，它对外延比它宽的概念是特殊，对外延比它窄的概念是普遍，它常常表现为一个类，如碱金属元素是一个类，配位化合物是一个类，离子键也是一个类，如此等等，化学概念很多都是反映一类客体或一类属性的概念。它是抽象的，一切概念都具有抽象性，同时它又是具体的，它所反映的实体、关系和过程，似乎都有直接的原型。因此，化学概念表现为抽象和具体的统一。这些都是化学概念的特点。

3、化学概念的内涵和外延

任何科学概念都是事物本质属性的反映，有其客观的内容，也就是说有它的内涵；任何科学概念都有它反映的特定对象，这就是概念的外延。

化学概念的内涵和外延是不断变化的。化学概念的内涵和外延是怎样变化的呢？概括起来说，化学概念的内涵和外延的变化，可分成三种形式。

第一种形式，随着概念内涵的变化，其外延时而扩大时而缩小。化学元素概念可以作为一个典型例子。依据拉瓦锡提出的元素概念，凡是未能分解的物质就是元素，“未能分解的物质”是元素概念的内涵。如果将这个定义应用于实际，在18世纪，未能分解的物质应当包括真正的元素，如氢、氧、氮等，还应当包括一些化合物，如一些金属氧化物，因为这些化合物当时是无法分解的，这样，元素概念的外延就应当包含所有这些未能分解的物质，因而元素概念的外延要宽于实际的元素。随着化学分析手段的进步和化学认识的发展，原来是不能分解的变成可以分解的，化合物一个一个地被从元素表中排除了，剩下了真正的元素，这时，元素概念的外延与实际应当包括的对象相符合。如果仍然坚持这个定义，那么随着分解技术和分析方法的进步，元素概念的外延则会变得比实际应当包括的对象窄。从19世纪初开始，元素概念的内涵发生了变化，从未能分解性发展为具有相同原子量的一类原子。依据这个定义，凡具有相同原子量的原子属于一种元素，随着新元素的发现，元素概念的外延又不断扩大。但是，当发现同位素以后，如果仍然坚持这个定义，那么，元素概念的外延将会比实际应当包括的元素范围要宽。依据20世纪的科学成果，元素的内涵又发生了变化，从具有相同原子量的一类原子发展为具有相同核电荷数的原子。在新的定义基础上，随着新元素的发现，元素概念的外延不断扩大。迄今为止，人们尚不知道元素周期表的终点在哪里，因而尚未能最终确定元素概念的外延的限度。

第二种形式，概念内涵的深化主要借助于物理学或物理学和化学的成果，概念外延的扩大则主要基于化学中的发现，因此，化学概念内涵的深化和外延的扩大，是物理学和化学研究的共同结果。化学概念内涵和外延的变化，主要表现为这种形式。

例如，原子概念的内涵，如前所述，在道尔顿理论中，表现为组成物质的不能再分的最小粒子，后来，由于电子的发现和原子模型的变化，原子概念的内涵深化了。原子概念内涵的深化主要是物理学的研究成果，在此之前，在化学领域或物理化学领域，发现了离子，后来又发现了原子自由基，原子离子自由基，使原子概念的外延扩大了。这就是说，原子概念外延的扩大，不仅表现为发现了新的原子，而且表现为发现了由原子衍生出来的新的物质形式。原子概念内涵的变化，反映了对原子内部结构认识的深化，在认识了原子内部结构的基础上，进而发现了原子存在形式的多样性。另一方面，原子概念外延的扩大，不是纯粹的理论演绎的结果，而是化学经验事实和理论解释相结合的产物。原子概念外延的扩大，开拓了人们对原子存在形式多样性的认识，也有助于加深对原子内部结构的认识。

关于分子概念的发展更令人瞩目。20世纪以来，化学家们发现了物质粒子质的多样性。1900年，冈伯格等人发现三苯甲基自由基，这是首次发现的碳中心自由基，1929年，潘内斯等人测定了甲基和乙基的生成。这些都是有机自由基，有些表现稳定，如三苯甲基自由基，有些表现活泼，如链式反应中的自由基仅能瞬时存在。星际分子的发现，也是值得注意的一件大事。星

际分子是存在于恒星际空间的无机分子和有机分子，其中大多数是由碳、氢、氧和氮等元素组成的有机分子，以双原子和三原子分子居多，在恒星际空间还发现了一些自由基和分子离子。此外，从 19 世纪下半期开始到 20 世纪上半期，还发现了单原子分子、配位化合物、高分子、胶体粒子、晶体结构等等。上述种种，是分子吗？关于这个问题，存在着不同观点，不同看法。大致说来，有三种观点。

第一种观点认为，化学发现的这些物质粒子，都是分子的不同表现形式或存在形式。只要我们不是用静止的观点而是用变化、发展的观点看问题，就不应当将分子概念仅仅看作僵死的、封闭的原子构成物。事实上，依据现代观点，分子是由原子核与核外电子构成的能够独立存在的物质体系，上述种种都是由核与核外电子构成体系，至于说独立存在，实质上说的是稳定性，而稳定性是相对的。按照这种观点，过去认为转瞬即逝、不易确定其生存时间的，如自由基，那是因为过去的实验手段和研究方法不够先进，随着实验手段和研究方法的进步，现在或将来会能够确定它们的生存时间。这就是说，分子有稳定分子和不稳定分子之别，稳定和不稳定又是相对的，而且即使不稳定，也有一定生存时间，因而也就有一定独立存在性。稳定和不稳定依条件而定，有些自由基在地球条件下不稳定，在恒星际空间却很稳定。总之，依据这种观点，上述种种都可以用分子概念来概括。这样，从分子的经典定义发展为现代定义，分子概念的内涵深化了，深入到原子核和核外电子层次，分子概念的外延扩大了，它包括了各种各样的分子形式，如分子离子、分子自由基、分子离子自由基、高分子、巨分子等等，随着化学实验和理论的发展，还将会发现分子的新的存在形式。

第二种观点则认为，自 19 世纪以来，发现了许多新的物质不连续形式，原有的分子概念已经不能概括和反映这些新发现了，应当用新的概念代替旧概念，或者说，新的发现已经突破了原有概念的范围。为此，有些文献提出了化学粒子概念，试图用以代替分子概念。

第三种观点采取折衷的态度，承认分子是由原子核与核外电子构成的体系，同时承认新的物质形式是不同于分子的物质存在，认为从分子概念中又分化出了新的概念，如分子离子、分子离子自由基等。依据这种观点，凡具有一定稳定性的、能够独立存在的，可以归入分子概念，不能归入分子概念的可以称为分子粒子。这就是说，这种观点把分子概念和分子粒子概念作了区分。这两个概念有区别也有联系，区别在于稳定性不同，分子是稳定的微粒，分子粒子则可以很活泼、很不稳定；联系在于，分子粒子是由分子衍生出来的，分子粒子概念是从分子概念演变而来的。

本书坚持第一种观点，从而认为，在现代科学发展的基础上，分子概念的内涵深化了，外延扩大了，分子概念内涵的深化，主要是量子化学理论成果，分子概念外延的扩大，主要是化学实验发现并对这些发现进行理论解释的结果。因此，分子概念内涵的深化和外延的扩大是量子力学与化学经验事相结合的结果。

化学概念内涵和外延的变化还有第三种形式，这就是外延的扩大主要表现为从基本概念中分化出新的相关概念，确切地说，表现为从属概念中分化出种概念，在这种分化过程中，属概念的内涵不发生变化或基本不发生变化。例如，化学键概念，随着化学键理论的发展，分化出从属于化学键概念的种概念，离子键、共价键、金属键、氢键、配键等。化合物概念，随着化学的

发展，不断发现新的类型，从而分化出许多种概念。在这种形式中，种概念的总和构成属概念的外延，但是，种概念是一个不断分化的过程，从认识论观点看，这个分化过程是无止境的，化学将会不断发现新的化合物，或合成出新型化合物。

从上述三种形式中可以看出，化学概念在内涵和外延方面表现出来的特点，突出体现在外延上。化学概念外延的扩大，反映着对化学客体及其属性认识的扩展。化学研究对象的特点在于它的特殊性和个别性，化学概念的特点也正是化学研究对象特点在概念上的反映。

第八章 化学中的规律

化学中的规律，可以简称为化学规律，指的是化学科学规律，是科学规律的一种形式。科学规律是对不以人们的意志为转移的客观过程的反映。作为科学中的一门学科的化学，它所研究的规律是人们对客观过程的统一和联系，相互依赖和整体性的认识的一个阶段或一个方面。

化学是研究物质分子及其转变规律的科学，化学规律也就是物质分子转变的规律。在这一章，对化学规律做初步讨论。

一、化学规律的内容和形式

规律在包括化学在内的一切具体科学中，主要是在自然科学中，有时叫做定律，有时又称为原理，无论定律还是原理，在很多情况下可以写成公式的形式。下面，我们从化学中的定律和原理的实际情况出发，对化学规律的内容和形式做一简要分析。

1. 化学规律的内容

化学中的定律和原理多种多样，依据其内容，大致可分成几类，如组成定律、结构定律、化学反应定律，此外，还有气体定律、溶液定律，等等。

从历史发展来说，最早发现的是所谓化学基本定律：质量守恒定律、化合量定律、定比定律、倍比定律等。

质量守恒定律主要是关于化学变化中反应物与产物间的质量关系的定律。我国古代著名哲学家张载，早在公元 11 世纪就已经从哲学的角度阐述了物质不灭思想。明朝的王夫之提出了“聚散变化而其本体不为之损益”的思想，宋应星在《天工开物》中已经将物质不灭原理应用于分析有关化学的生产过程了。在欧洲较早表达了类似的思想的是范·海尔孟(Van Helmont)，他认为无中不能生有，重量是由其他同样重量的物体造成的。1789 年，拉瓦锡明确地指出，“……由于人工的或天然的操作不能无中生有地创造任何东西，所以每一次操作中，操作前后存在的物质总量相等，且其要素的质与量保持不变，只是发生更换和变形，这可以看成为公理。做化学实验的全部技艺是基于这样一个原理：我们必须假定被检定的物体的要素和其分解产物的要素精确相等”。意思是说，化学变化中只能改变物质的组成，而不能创造或消灭物质，有些化学教科书表述成参加化学反应的全部物质的质量等于全部反应产物的质量。

18 世纪末，一些化学家已经认识到化合物的组成是确定的，法国化学家普罗斯特(J·L·Proust)则系统地进行了研究，并阐述了定比定律。普罗斯特通过对矿物成分的分析确立了定比定律的思想，他在《铜之研究》中指出：必须承认，化合物生成时有一只看不见的手掌握着天平，并赋予化合物应有的性质，可以做出结论说在地球深处的自然作用比起地球表面和人手中的自然作用来说，没有什么两样，这些不变的比例，这些表示真正化合物的固有属性，对天然化合物和人造化合物都是一样的。普罗斯特的观点受到贝托雷的挑战，通过与贝托雷的论战，1806 年普罗斯特得出了如下结论：“化合物是特有的产物，自然给了它固定的组成。自然——有时也通过人——任何时候都不能制出在重量和大小方面不同的化合物，就象手中握有天平一样。从南极到北极，化合物都有同样的组成。它们的外表可能因它们产出的方法不同而有所区别，但是它们的性质任何时候都不会不一样。我们在南半球的氧化铁和北半球的氧化铁之间没有看到任何区别；日本的朱砂和西班牙的朱砂是一样的；氯化银，不管是来自秘鲁还是来自西伯利亚，都是完全一样的；在全世界只有一种氯化钠、一种硝石、一种硫酸钙盐，一种硫酸钡盐。

分析总是支持了这个事实。”

差不多与此同时，里希特(J·B·Richter)通过对酸碱中和反应的研究，明确指出：如果两种元素生成一种化合物，因为元素的性质总是保持不变的，发生化合反应时，定量的一种元素总是需要确定量的另一种元素。1793年，里希特在他的著作中提出了“化学计量学”概念，其意思是对组成物体(化合物)的元素进行测量或计量。但是，里希特走到了当量定律的门口，却没有走进去。19世纪初，费歇尔(E·G·Fisher)提出了一张盐基类和酸类化合的当量表。

19世纪初，道尔顿根据对大气物理学的研究提出了原子学说，他已经意识到，从该学说可推出倍比关系，于是他进一步进行实验研究。1804年，他分析了甲烷和乙烯，其中碳与氢之比分别为4.3:4和4.3:2，明确提出了倍比定律；当相同的两种元素可生成两种或两种以上的化合物时，若其中一元素的重量恒定，则另一元素在各化合物中的相对重量为简单倍数之比。

1808年，盖吕萨克综合实验结果，做出如下结论：各种气体在相互发生化学反应时，常以简单体积比相结合；他还发现，化合后，气体体积的改变与发生反应的气体体积之间也有简单关系。实际上，这个结论，指的是在同一温度、同一压力下、参加同一反应的气体之间的关系，而且只对理想气体才是正确的，当然，在室温和大气压下，大多数气体遵守此定律。盖吕萨克将自己的结论与道尔顿原子论结合起来，进一步得出结论：同样体积中的不同气体所含原子数彼此应该有简单整数比关系，相同体积中的不同气体含有相等数目的原子。这个结论遭到了道尔顿的反对和责难。

正是基于对盖吕萨克和道尔顿的争论所进行的考察，阿佛加德罗提出了分子假说，并以分子概念为基础，他指出：“气体物质无论是元素还是化合物，其体积与分子之间存在着非常简单的关系”，这就得设想“对于等体积的任何气体，其中所含的分子数目总是相等的”。1814年，阿佛加德罗进一步指出，“在相同温度、压力下，同体积的气体物质都含有相同数目的分子”。

法国科学家杜隆(P·L·Dulong)和培蒂(A·T·Petit)曾对各种单质的比热进行测定，基于实验结果及其与贝采里乌斯于1818年发表的原子量联系起来，指出大部分固态单质的比热容与原子量的乘积近似为一常数。

19世纪中叶前后，一方面，在化学研究领域内部，随着新元素的不断发现，原子量测定工作不断取得进展和原子价概念的提出，以及在有机化合物的实验研究和理论研究方面所取得的成果，又相继发现了一些定律，如欧洲化学家基于原子价概念建立了分子中原子联结定律(即分子中原子与原子间按一定化合价相联结)，门捷列夫发现了元素周期律。另一方面，在化学与物理学的接触点上，或者将物理学中发现的规律推广到化学领域，导致了一些重要定律的发现或确立。例如，研究化学变化中的热效应，黑斯(G·H·Hess)总结出一条定律，该定律指出：在任何一个化学过程中，不论该化学过程是立刻完成，或是经过几个阶段完成，它所发生的总热量都是相同的；研究电

转引自《化学通报》1983年第9期第64页。

赵匡华：《化学通史》，高等教育出版社，1990年版，第109页。

同上，第110页。

参见凌永乐：《世界化学史简编》，辽宁教育出版社，1989年版，第181页。

解（实质上是电引起的化学变化），法拉第（M·Faraday）发现：（1）电解所产生的某物质的量与通过的电量成正比；（2）当相同的电量通过电路时，电解出的不同物质的相对量与它们的化学当量值成正比。一些化学家和物理学家，将热力学定律扩展到化学领域，奠定了化学平衡的热力学基础，使热力学定律成为研究化学平衡问题的定律，推导出一系列关系式。到 80 年代，勒夏忒列（H·L·Lechatelier）提出了平衡移动原理：在化学平衡中的任何体系由于平衡诸因素中一个因素的变动，在一个方向上会导致一种转化，如果这种转化是唯一的，那么它将引起一种和该因素变动符号相反的变化。

古德贝格和瓦格在别人工作的基础上，又通过自己的实验研究，总结出质量作用定律，简要地说就是化学反应的速率和反应物的有效质量成正比。

溶液与化学变化有着密切联系，关于溶液的性质研究，是化学研究的一个重要方面。在这方面获得的规律性认识，确立了亨利定律，拉乌尔定律和分配定律等。

进入 20 世纪，一方面，由于揭示了原子的内部结构的奥秘，建立了现代科学的基本理论，对过去已经揭示的规律有了更深刻的认识；另一方面，基于新的实验又发现了一些新的规律，例如，放射性衰变规律，分子轨道对称守恒原理，有机化合物同系线性规律等。

在化学中，除了直接以定律、原理的名称存在的规律以外，还有以学说、理论形式存在的规律。学说或理论之所以成为学说或理论，是因为它们包含着规律性认识。学说或理论是规律的展开，是对定律和原理解释、说明和应用。如经典结构理论包含着碳原子以四个价键与其他原子结合和自身结合的规律性认识，原子电子层结构模型包含着原子核外电子运动规律，化学热力学包含着热力学定律及其在化学中的具体应用所导出的基本关系式，化学统计力学理论包含着麦克韦——玻耳兹曼分布律，等等。

化学定律如同任何科学定律一样，在于揭示客观过程的普遍必然性，因此，在化学定律的表述中，含有“任何……都……”，“每一……都……”的意思，有的定律就直接以这种形式来表述。让我们分析几个例子：

质量守恒定律，按照拉瓦锡的说法，摘其要者可表述成：每一次操作中，操作前后存在的物质总量相等；现在我们也可将这一定律表述为：在任何与周围隔绝的体系中，不论发生任何变化或过程，其总质量始终保持不变。

定比定律，依据普罗斯特的思想和陈述，可以表述为：一种化合物，不论是天然存在的还是人工合成的，不论是用哪种方法制备的，它的化学组成总是确定的。

阿佛加德罗定律，可以表述为：在同一温度、同一压力下，体积相同的气体所含的分子数都相等。

这些定律的表述中，可以直接看到这样一些说法：“每一……（都）……”；“任何……始终……”；“（任）一种……总是……”；“……都……”。有些定律的表述，虽然没有直接出现这类字或词，但从上下文中可以看出包含着这些字、词所表达的含义。例如，亨利定律的表述：气体溶解于液态溶剂而成稀溶液时，如气体分压不太大，且气体在溶液中不与溶剂起作用，或虽起作用而极少电离，则被溶解气体的重量与其分压成正比例。其中没有“任何”、“都”之类的字，但从中可以清楚地看出该定律所指的，凡具有所要求的条件的任何气体，被溶解的重量都与其分压力成正比例。又例如，分子轨道对称守恒原理指出：若在协同反应过程中自始至终存在某种对称要素，

反应物和产物的分子轨道都可以按照这种对称操作分类，则反应物与产物的分子轨道对称性相合时反应就易于发生，而不相合时就难于发生。其中说的反应物与产物的分子轨道对称性相合或不相合，从文意中可以看出“任何……都……”的含义。

从这些实例出发可以得出如下几点结论：第一，在化学规律的表述中，都指出了某种客体，如质量守恒定律中“操作”或“体系”，定比定律中的“化合物”，阿佛伽德罗定律中的气体，亨利定律中的“被溶解气体”，分子轨道对称守恒原理中的“分子轨道”等，都是规律所涉及的客体，也就是进入主体活动领域并和主体发生联系的客观事物，是主体实践活动和认识活动所指向的对象。规律的内容反映了关系，关系不能脱离载体，这里所说的客体就是关系的载体，因而是规律的承担者，规律总是某种客体的规律，是与某种客体分不开的。第二，在规律的表述中，直接的或间接的，明显的或暗含的，无论以什么具体形式都指出了条件，如质量守恒定律中的“在任何与周围隔绝的体系中”，阿佛伽德罗定律中的“在同一温度、同一压力下，体积相同的”，亨利定律中的“如气体分压不太大，且气体在溶液中不与溶剂起作用，或虽起作用而极少电离”，分子轨道对称守恒原理中的“若在协同反应过程中自始至终存在某种对称要素”等，都是规律发生作用的条件，定比定律中似乎没有什么条件，其实化合物就是条件。这两点，即客体和条件规定了规律起作用的范围，由此可推论出第三条结论，这就是在规定的范围内所具有的普遍性，也就是在规定的范围内，“任何……都……”，由此可知，规律的普遍性是某种范围内的普遍性。第四，在条件具备时，“任何……都……”，表现了必然性。

总起来说，可以概括成一个公式：

某类客体具备 C 类条件。

则 E 类事件就会发生。

2. 化学规律的形式

内容要通过形式表现出来，形式是表现内容的。“任何……都……”，与具体的客体、条件和事件相联系，成为具体规律（定律、原理等）的内容，而规律的内容通过“任何……都……”表述出来，因而“任何……都……”成了表达规律的形式。

“任何……都……”，是对思维对象的关系的一种断定，用逻辑学的术语说，就是判断。在一般逻辑教科书中都会讲到判断，判断与语句的关系，判断的分类等。判断的形成和表达离不开语句，判断是语句所表达的思想内容，语句是判断的物质外壳和语言表达形式。科学规律在逻辑上表现为一种判断，而这种判断又要通过一定语句表达出来，“任何……都……”是一种表达形式。

过去，在很长时期中，化学家和其他领域的科学家一样，只顾如何发现规律，对于规律的内容和本质，对于规律是如何发现和确立的，往往不闻不问，哲学家把规律作为一个重要范畴来研究，着重探讨什么是规律，什么是科学规律，科学规律与客观规律的关系，怎样认识规律，以及规律的本质及其发展等问题；逻辑学家单纯研究判断，不研究也不考虑判断与科学规律的关系。总之，各自在各自的领域中研究着、探索着，彼此之间没有沟通，没有合作。恩格斯在《自然辩证法》一书中，第一次将判断和规律问题联系起

来进行研究。

恩格斯对黑格尔关于判断的分类思想进行了剖析，指出尽管在黑格尔著作中的叙述读起来令人感到枯燥乏味，黑格尔的分类法有时一眼看过去可能显得是任意做出的，但是黑格尔的分类包含着内在真理性和内在必然性。在此基础上，恩格斯将判断的分类与人类对规律的认识联系起来，做了进一步讨论。他指出，经过长期的实践和认识，人的脑子已经发展到足以能够作出这样一个判断：摩擦是热的一个源泉；又经过了几千年，到 19 世纪中叶，人们作出了一个新的判断：一切机械运动都能够通过摩擦转化为热。接着，很快又作出了这样一个判断：在对每一情况来说是特定的条件下，任何一种运动形式都能够而且也必然直接或间接地转变为其他任何运动形式。恩格斯将第一个判断称为个别性判断，第二个判断为特殊性判断，第三个判断为普遍性判断。恩格斯说，对于第三个判断，在形式和内容上都同样是普遍的，以这种形式表述的规律，是绝对的自然规律，通过新的发现只能提供新的证据，提供新的更加丰富的内容，可是像这样表述的规律本身不能再增加什么了。

恩格斯所说的“摩擦是热的一个源泉”等，从逻辑上看，是一种判断，从科学观点来说，它是一条规律，在这里，判断和规律密切结合在一起。从语言学方面看，它又是一种语句，语句表达了判断的思想内容，而判断的思想内容，在这里所指的具体问题上，构成科学规律。同时，恩格斯还表达了一种思想，三个判断的关系，即从第一个个别性判断到第二个特殊性判断，进而从第二个特殊性判断到第三个普遍性判断，反映了人类对运动形式之间关系的规律的认识历史。

陈昌曙在《自然科学的发展与认识论》一书中，用一节（即第五章第五节）专门讨论了原理、定律与学说。他认为，在科学知识中有条件关系的判断，大体上相应于原理，必然关系判断大致相应于定律，说明因果关系的判断大体相应于学说（包括假说），公式是关系判断，原理、定律、学说都可以写成公式或包括着公式。可以看出，他试图从逻辑的观点对原理、定律和学说进行分析，并提出了许多有启发性的见解。应当说，他的工作是很有益的尝试，是在将哲学、逻辑学与科学规律结合起来进行研究的有益探索。

在我们看来，规律，从本体论角度说是客观规律；从认识论角度来研究，通常说的科学定律（化学定律是科学定律中的一部分），是客观规律的反映；在逻辑学上，表现为规律陈述，具体地说表现为一个条件陈述语句，即“如果 A，那么 B”，或者写成“A → B”。当然，规律表现为一个条件陈述语句，但不是所有条件陈述语句都是规律陈述；作为一条规律，A 与 B 之间必须要具有内在必然性，或内在性、本质性，实际上就是因果性。作为规律，除了内在必然性或因果性以外，还必须有普遍性。

恩格斯说过，“自然界中普遍性的形式就是规律”。所谓普遍性的形式，就是具备一定条件，某件事情随时随地都会发生，至于这种事情是否只发生过一次或者重复了 100 万次，以及在多少天体上发生过，那是无关紧要的。例如，氯和氢在一定压力和温度的界限内受到光的作用就会通过爆炸而化合生成氯化氢，只要具备这里所说的条件，必然会发生。这里说的条件，指的是

参见恩格斯：《自然辩证法》，于光远等译编，人民出版社，1984 年版，第 114—116 页。

详见陈昌曙：《自然科学的发展与认识论》，人民出版社，1983 年版，第 154—160 页。

恩格斯：《自然辩证法》，于光远等译编，人民出版社，1984 年版，第 106 页。

客体氯和氢，一定压力和温度界限以及光的照射，具备这些条件，必然发生爆炸化合成氯化氢，用公式来表示就是：

如果 C 类条件实现，
则 E 类的事件就会发生。

金观涛在《整体的哲学》中指出，“规律是指一定的条件集合 C 和一定的现象（事件）集合 E 之间存在着确定的联系。当确定性联系不存在时，我们将其关系表述为类似的有关统计规律的陈述。我们把它称为广义因果律”。
。下面，我们就来讨论化学中的因果律。

二、化学中的因果关系和因果解释

1. 化学因果性的探索

早在人类文明曙光初升的时代，人类就已接触到或观察到自然界的一些现象，就其实质而言，是化学变化所产生的现象。随着实践和认识的发展，人们试图对这些现象进行解释，逐渐地提出了一个问题：物质变化的原因是什么？古代哲人用爱和恨解释元素或原子的结合和分离。类似的观念延续下来，到公元 13 世纪，德国炼金术士马格努斯（Albertus Magnus）提出了亲和性（affinity）概念，其本意是“姻亲关系”，把它看作物质变化的原因。

随着近代科学的产生，对化学变化的原因的解釋，脱去了拟人观的色彩，开始了科学的研究。在近代自然科学中，亲和性概念是和原子论结合在一起的。作为物质结构学说的原子论，它的发展至少经历了三个主要阶段：：第一阶段是古代自然哲学的原子论的发展阶段，第二阶段，17、18 世纪，表现为机械的原子论，第三阶段，19 世纪，建立了化学原子论。在第二阶段，原子或微粒具有纯力学的性质，使它们相互结合的亲和性也具有纯力学的性质，可称之为亲和力。

波义耳将亲和力与他的微粒说结合起来说明化学变化。他指出：“相异二元素之微粒相互吸引，则生成第三种物质，即生成化合物。倘此化合物中二元素成分之相互亲和力小于其中一成分与第四种物质之亲和力，则此化合物即分解，而另生成第五种物质。”波义耳试图用亲和力解释微粒之间的结合，用微粒之间亲和力大小不同解释微粒的分解。总之，用亲和力解释了微粒的结合与分解，从而也就解释了化学变化。

波义耳已经提出了通过不同物体之间反应能力确定亲和力相对大小的思想，但他没有进行具体研究。法国化学家杰奥索瓦（Geoffroy）将物质间的反应能力进行比较，他指出，两个物体（a 和 b）相化合，如果第三个物体（C）与它们中间的一个物体（例如 a）具有较大的亲和力，就能够从该物体中把物体 b 置换出来。依据这种设想，他编制了一张亲和力表。在他之后，有许多化学家研究亲和力表，如施塔尔、贝格曼等。他们实质上是将亲和力视为一种引力，把它看作形成化合物的原因；同时，由于亲和力相对大小不同，可以引起化学反应，因此，亲和力又是化学反应的原因。

1803 年，道尔顿提出了化学原子论。他指出，原子是化学元素的最基本单位，在化学变化中保持不变。化学中的化合是原子以简单数目比相结合。道尔顿的原子论隐含着原子之间存在相互作用的思想，但他没有进一步对这种相互作用提出解释。瑞典化学家贝采里乌斯早就注意到这样一些事实：有些物质能够彼此化合，有些则不能。他试图找出原因。在他从事化学研究的时候，物理学对静电的研究已相当深入，对动电的研究也取得了进展，伏打电堆问世以后，对电解的研究也很有成绩。正是在电学的启发下，贝采里乌斯提出了电化学二元学说。按照他的学说，元素的原子都有两极，一极显正电性，另一极显负电性，二极的电性不相等，有的原子总体上显正电性，有

参见前苏联凯德洛夫：《恩格斯论化学的发展》（俄文），莫斯科《化学》出版社，1979 年版，第 22 页。

编写组编写：《化学发展简史》，科学出版社，1980 年版，第 94—95 页。

的原子总体上显负电性，显正电性的原子和显负电性的原子相互结合。化合以后，电性不能完全抵消，产生的化合物可以再相互结合，形成第二级化合物，进而还可以相互结合，形成第三级化合物，如此等等。电化学二元学说把原子相互结合的原因归结为静电吸引。这个学说几乎解释了当时已知的无机化合物，却在有机化学中遇到了困难。可是，这个学说力图说明的问题，即化学结合的原因问题，并没有因这个学说的衰落而失去意义，这个问题依然存在，而且一直困扰着化学家们。

此后，对这个问题的研究大体上是沿着两个方向发展的。一个方向，可以称之为化学方向，也就是对化合物的组成和变化的事实进行总结；另一个方向，可以称之为物理化学研究方向，引用热力学理论对化学反应进行分析。

一些化学家从化学实验中发现，彼此发生化学结合的原子或基，都具有一定的数量关系。基于这种观察和发现，提出了“化合力”、“原子数”、“亲和力单位”等概念，后来形成了原子价概念。原子价或化合价，被认为是元素的原子所固有的一种性质，是形成化合物的能力。与此同时，还提出了化学键概念。原子价在一种意义上被理解为自由原子的结合能力，它是形成化学结合的原因；化学键被理解为已经实现了的化学结合，它是化学结合的结果。

19世纪中叶前后，热力学取得了令人瞩目的成就。热力学是研究能量相互转换所遵循的规律的一门科学。化学反应中既然伴随着能量的转化，因此热力学理论可应用于化学反应的研究。吉布斯证明，在恒温恒压下如果在理论上或实践上一个反应能够用来完成有用功，这个反应是自发的；相反，如果由环境提供有用功致使反应发生，反应则不是自发的。恩格斯曾经说过：“功是从量方面看出来的运动形成的变换”。一个化学反应能被用来完成有用功，就意味着发生了运动形式（能的形式）的变换，这种能做有用功的能就是自由能，又称吉布斯自由能，常用符号 G 来表示。依据吉布斯的理论，如果 $G_{\text{反应物}} > G_{\text{产物}}$ ，则 $G < 0$ ，反应能自发发生；相反，如果 $G > 0$ ，反应不能自发发生；当 $G=0$ 时，反应达到平衡。

$G < 0$ 是什么意思？它表示一种动因，即推动化学反应的一种作用，用因果性术语来表述：如果存在自由能差，化学反应能够从自由能高的向自由能低的方向进行；这个表述，若用前面说过的公式来表示，相当于“如果 A，那么 B”，这是规律的陈述形式。

19世纪末 20世纪初，发现了电子，建立了原子的有核模型和核外电子层构型模型，化学家对原子价、化学键的实质有了进一步认识。依据科塞尔提出的离子键理论，正、负离子之间的静电相互作用是化学结合的原因；根据路易斯提出的共价键理论，原子之间形成化学键的原因被归结为两个原子共有一对电子，价键理论在电子对键基础上对原子之间的化学结合进行量子力学的说明；分子轨道理论把分子看作一个整体，电子在一定分子轨道上运动，分子轨道由原子轨道组成，原子轨道相互重叠形成化学键。

综上所述，人类对化学因果性的探索形成了化学因果观念，化学因果观念的发展和演变，从一个侧面反映了人类对化学运动形式认识的历史发展。化学因果观念是对化学因果关系的反映。化学因果关系是怎样的关系呢？

2. 化学中的因果关系

前面已经指出，因果律的一般公式可概括为：

如果 C 类条件实现，

则 E 类事件就会发生。

我们结合对化学反应的分析，首先研究条件集合 C。化学反应可以写成如下一般形式：



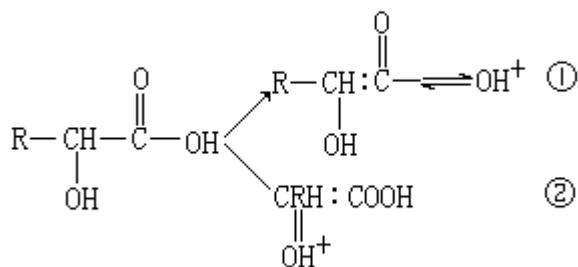
其中反应物可以是一种，也可以是两种或两种以上，化学中所说的反应条件，多种多样，如溶剂、温度、压力、时间、催化剂等。因果律中的条件集合 C，对化学反应来说，包括反应物和反应条件。

一个化学反应能否发生，首先与反应物本身的结构有关。从因果关系来看，反应物的结构是发生化学反应的内在根据。在两种或两种以上的物质发生反应的情况下，对所指的某种反应物而言，它的结构是发生反应的内在根据；同时，它又必须与另一种或几种反应物发生相互作用，化学反应才能发生。例如，酸必须与碱发生作用才能发生中和反应，具有氧化性的物质必须与具有还原性的物质作用才能发生氧化还原反应，等等。这时，所指的反应物与其他反应物一起形成了反应物体系。就这个反应物体系而言，反应物之间的关系是体系内部的关系。这种关系是条件集合 C 中的一个方面，它既不同于分子内部结构，也不同于反应条件，它是介于这两者之间的要素。许多化学反应还必须有适宜的反应条件。这样，条件集合 C 可以具体化为内部结构或内在根据，反应物之间相互作用和反应条件。后两个因素，即反应物之间的相互作用和反应条件，对特指的某种反应物而言，都是反应借以发生的环境，可以叫做环境条件，相对于环境条件，特指的反应物结构称为内在根据。在这里，我们将条件集合 C 划分成两个基本要素：内在根据和环境条件。

具有某种结构的物质在不同环境条件下，可以发生不同的反应。这表明这种物质具有发生不同反应的可能性，而哪种可能性变成现实性，取决于环境条件。例如，在氧化还原反应中，某种反应物究竟是氧化剂还是还原剂，要由与其发生反应的物质的性质来决定。又例如，乙醇脱水，在不同温度、用不同催化剂发生的反应不同，180 在 Al_2O_3 存在下生成乙烯，用浓 H_2SO_4 作催化剂 150 生成醚。

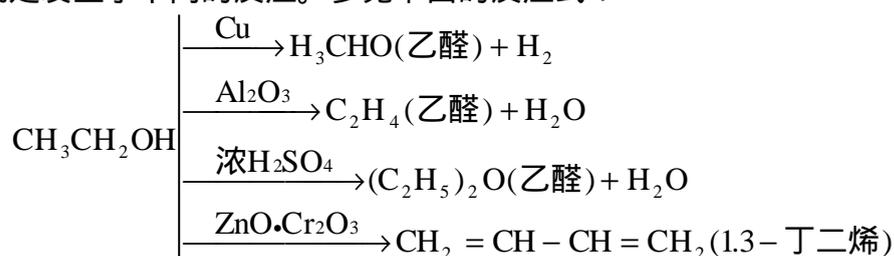
可是，反应的可能性取决于内在根据，即化合物的结构。例如，

$$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{R}-\text{CH}-\text{C}-\text{OH} \\ | \\ \text{OH} \end{array}$$
 至少有两种可能的反应方向，是因为它的结构有两种可能的变化：



多官能团分子一般都有发生不同反应的可能性，而哪种可能性变成现实

性，要视环境条件而定。还以乙醇为例，用不同催化剂可以得到不同的产物，也就是发生了不同的反应。参见下面的反应式：

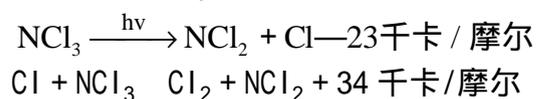


划分内在根据和环境条件，不仅反映了化学因果关系中条件集合的特点，而且具有实践意义。化学家研究化学反应的目的，是为了认识化学反应的规律，用于指导实践。在实践中，化学家们总是希望化学反应朝着人们预期的方向进行，而且在这个方向上求得高效率，如高反应速率、高转化率等。为此，一方面分析反应物的结构，认识发生反应的可能性，另一方面还必须研究环境条件，找出适宜的条件和控制方法，以便使所希望的可能性变成现实性，并获得较高的收率。

划分内在根据和环境条件，还可以说明规律和规律的实现方式之间的关系，并从具体情况出发，找出规律发生作用的具体途径。规律是客观的，是不依人们的意志为转移的；但规律的实现方式是多样的，具有多种可能性。规律的实现方式不同，结果也就不同。规律的实现方式是可以选择、可以控制的，同一种规律由于选择了不同条件或设置了不同条件，实现方式不同，结果也就不同。选择或设置不同条件，这是人的主观能动性的体现。物质分子的内部结构是内在根据，它决定着化学客体的存在，也决定着与该化学客体有关的化学反应，决定着化学反应的可能性，因而也就决定着化学反应的规律性。改变环境条件不改变规律的性质，却改变了规律借以实现的具体方式。环境条件本身也是客观的，改变环境条件就是改变客观事物之间的关系。如对某种反应物而言，选择与之发生作用的不同物质，其反应进行的方向可能不同，选择不同的催化剂，其反应进行的方式也不同，如此等等。改变，包括取消一些，增加一些，或更换一些，更换实质上是取消和增加的结合。如同一条河流，增加一些，筑堤以阻止水的漫出；取消一些，清除河道中的阻碍物使河水畅流。取消和增加，改变了客观物质之间的关系。这些是人工可以办到的，是可以人为选择的，但是规律本身是不能改变的。人们不能让具有天然放射性的元素不放射射线，也不能让放射线不服从相应的规律。这就是规律与规律的实现方式的辩证法，是规律的客观性与发挥主观能动性的客观依据。

化学中的因果关系，具体表现形式是多种多样的，概括起来，有两种基本形式：因果链和交互作用。

化学中的因果链，原因引起结果，结果又作为原因引起新的结果。例如， NCl_3 的光分解，首先使 NCl_3 分子分解，需要消耗能量，产生自由基，自由基是反应的产物，是结果，它又成为原因，进一步使 NCl_3 分解，产生 NCl_2 ，不仅不再消耗能量，而且释放出能量， NCl_2 又从结果转化为原因，与 NCl_3 发生反应，即引起 NCl_3 分解，产生三个Cl自由基。反应式如下：



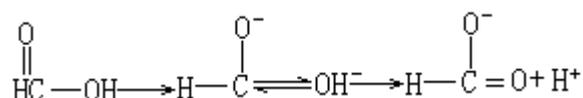
升和下降，分别是引起 A 过程和 B 过程的原因，A 过程和 B 过程的进行又反作用于它们各自的原因，A 过程使 $[Br^-]$ 下降，B 过程使 $[Br^-]$ 上升，以临界值为 A 界，不断起动 A 过程和 B 过程。在这个例子中，原因和结果的交互作用，得到了生动的、具体的体现。

因果关系或因果性，是客观存在的关系和规律性，在化学过程中也是普遍存在的。在一定意义上可以说，化学家对化学过程的研究，其主要目的之一就在于揭示客观的化学因果关系，因果制约性。这在化学理论研究中就表现为因果解释。

3. 化学中的因果解释

因果解释是化学中解释的一般模式。在化学文献中，我们常常可以看到这样一些陈述语句：“……物质分子具有……性质或发生……反应，是因为（或原因在于）它具有……结构”，或者说，“……物质分子由于它的结构……所以有……性质或能够发生……反应”。前一种陈述是解释性的，表现为从结果去追溯原因，再用原因解释结果；后一种陈述是从原因去说明结果，在解释的同时含有预见性因素。

例如，比较下述几种酸的酸性强弱，发现它们依次减弱， $HCOOH > CH_3COOH > H_2CO_3$ ，这是已知的事实。原因是什么呢？基于有关结构理论，有人提出如下解释：



这个式子表示， $HCOOH$ 的酸性是由于诱导效应离解出 H^+ ； $\begin{array}{c} \text{CH}_3\text{C}-\text{OH} \\ \parallel \\ \text{O} \end{array}$ 则可能发

生两种共轭效应，一种可能是， $\text{H}^+\text{CH}_2 \rightleftharpoons \begin{array}{c} \text{C}-\text{OH}(\text{A}) \\ | \\ \text{O}^- \end{array}$ ，另一种可能是

$\begin{array}{c} \text{CH}_3-\text{C} \\ | \\ \text{O}^- \end{array} \rightleftharpoons \text{OH}^+(\text{B})$ ，共轭效应 (A) 使共轭效应 (B) 降低，共轭效应 (B)

反过来又抑制了共轭效应 (A)，相互作用的结果使共轭效应 (B) 不可能像 $HCOOH$ 那样离解出那么多的 H^+ ，致使 CH_3COOH 的酸性弱于 $HCOOH$ 。同理， H_2CO_3 也有两种可能的共轭效应，它们之间的相互作用更强烈，因而酸性更弱。这个例子是从已知事实出发，从理论上对事实作出解释，表现为从结果去追溯原因。

又例如，1960 年，伍德沃德在领导维生素 B_{12} 的合成中发现，将一种化合物 (A) 加热，原来预计得到产物 (D)，结果却生成了另一种产物 (B)。经过深入分析得知，化合物 (D) 和 (B) 二者之间在结构上的差别，仅仅在于两种化合物都具有的两个基团 (Me^- 和 MeO_2C) 在环平面的上下位置不同。进一步的实验研究发现，化合物 (B) 经光照射后，发生开环反应，得到原来预计的产物 (D)。(D) 经光照后又转化为起始反应物 (A)。伍德沃德意识到，在这类反应中包含着一种尚未认识的重要控制因素。经过与霍夫曼共同研究，探明了反应物 (A) 的分子轨道对称性和产物 (B) 的分子轨道的对称性是一致的，而 (D) 的分子轨道的对称性与 (A) 的分子轨道对称性不一致。经过他们的共同研究，得出了结论：当反应物与产物的分子轨道对称性一致

时，反应易于发生；当它们不一致时，则反应难于进行。这个认识过程（经过高度简化了的过程）表现为，从结果[预计由(A)产生(D)而实际生成(B)]去追溯原因，最终察明了原因，即(A)和(D)的分子轨道对称性不一致，而(A)和(B)的分子轨道对称性一致。总结出分子轨道对称守恒原理以后，又可进而解释和预言。可表述为：由于分子轨道对称性一致，能够发生协同反应。这种表述可以改写成规律陈述：如果分子轨道对称性一致，那么发生协同反应。

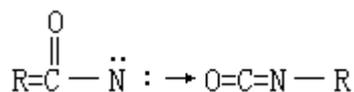
从结果去追溯原因，以原因解释结果，这是化学事实和理论解释之间关系的一种表现形式，也是化学发展的一种重要形式。我们以原子价理论的发展为例做些具体分析。原子价理论建立以后，解释了许多化学经验事实。随着化学的发展，要说明的化学经验事实越来越多，越来越复杂。从原子电子层结构去解释化学经验事实常常遇到困难，这就不得不从已知的化学键的性质和数目等事实去认识原子的原子价，归根到底也就是更进一步探索原子的电子结构。在这里涉及两种因素：一种是已知的化学经验事实；另一种是关于原子电子层结构方面的理论知识。从原则上讲，前者是研究问题的出发点，从已知的事实出发，不断修正、补充和发展结构理论；后者应当能够从前者中推论出来。这样，从两种因素自然引出两条认识发展的途径，一条是从结果去探察原因，另一条是从原因去说明结果。原子价概念和理论正是在这两种因素、两条认识途径的相互矛盾和相互作用中发展的。当用碳原子的基态电子结构不能解释碳为什么是四价的问题时，一些化学家提出了“价态”概念，试图用碳的激发态的电子结构进行解释，同样，为了说明其他化学事实，又陆续提出了“杂化”、电子对授受等概念。

化学中的因果解释，有三个重要特点：

第一，注意主要原因和结果。化学与物理学相比较，具有其特殊性。物理学常常从高度抽象的模型出发，分析物质运动的一般规律；化学则要研究各种具体的对象，研究多种多样的元素、分子、化学反应。从这方面说，化学研究的内容是极其丰富和极其复杂的，这就决定了化学中涉及的因果关系的复杂性。从结构上看，一个分子系统，一般是由两个或两个以上原子核与核外电子组成的体系，涉及多粒子及其相互作用。从化学反应来说，由于参加反应的物质不是绝对纯的物质，因此实际的化学反应，有主要反应，也伴随着复杂的次要反应或副反应。这种情况就决定了化学家们在进行研究的时候，不得不舍弃次要的，抓住主要的，这种因果解释在化学中是一贯的，甚至可以说已经形成了一种传统和习惯。例如，在化学反应中，分主反应和副反应，把反应物视为纯物质，着重研究它们所产生的结果。在原子价的电子理论中，分价电子和非价电子，着重研究价电子的行为及其产生的效应。在研究共轭烯烃化合物时，主要考虑 π 电子的作用，忽略 σ 电子的作用。福井谦一基于分子外层轨道的主导作用，提出了前线轨道概念，建立了前线轨道理论。正如福井谦一本本人所说的：“前线轨道理论不限于为了解释只用电子密度难以说明的关于定向性的经验事实而开始引入轨道概念的，其重要意义还在于首先指明将 HOMO（即最高占据轨道），LUMO（即最低空轨道）这些特定轨道与其它轨道相区别，而这些特定轨道的重要性在环加成反应的选择定则中又显示了出来。”所有这些都说明，化学中的因果解释注意主要原因和

主要结果。可以这样说，区分主要原因和次要原因，注意研究主要原因及其结果，是化学研究中的重要的方法论原则，也是促使化学研究取得进展的重要因素。

第二，追溯因果链。所谓因果链，正如前面讲过的，是原因引起结果，结果又作为原因引起结果，或相反，从结果去追溯原因，进而追溯原因的原因。例如，在有机化学中对分子重排的解释就是这样。霍夫曼（Hoffmann）分子重排，如下式所示：



有人对其机理作如下解释：由于 C 原子和 O 原子相连（原因 1），使 C 原子的电负性增大（结果 1）；由于 C 原子的电负性变得很大（原因 2），使 C—N 键的稳定机制削弱（结果 2）；由于 C—N 键稳定机制削弱和 —N 不稳定（原因 3），导致分子自身结构的改变，使 C、N 间形成双键（结果 3）。类似的因果解释在化学中是普遍存在的。

在化学结构理论的建立和发展过程中，最初通过对化学经验事实的总结，提出了原子价概念，建立了原子价理论。原子价表现为原子结合成分子的原因。发现电子和建立原子核外电子结构模型以后，又把形成价键的原因归结为电子的转移或电子对。量子化学建立后，又进一步把成键的原因归结为电子在原子核之间出现的几率大。从结果去追溯原因，从一种原因追溯到更深的的原因，原来的原因就转化成了结果。

第三，研究原因和结果的交互作用。恩格斯曾经指出，“交互作用是我们从现代自然科学的观点考察整个运动着的物质时首先遇到的东西”，“只有从这个普遍的交互作用出发，我们才能达到现实的因果关系。为了了解单个的现象，我们就必须把它们从普遍的联系中抽取出来，孤立地考察它们，而且在这里不断交替着的运动就显示出来了，一个为原因，另一个为效果”。

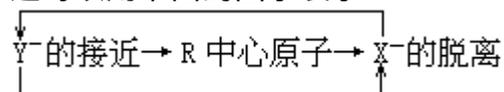
人们为了了解现象之间的联系，从交互作用中抽出因果联系加以考察是必要的，但是不应忘记，这种因果联系毕竟是处于交互作用之中的，因此在具体的因果解释中，应当注意原因和结果的交互作用。在许多情况下，如果不注意这种交互作用，问题就解释不清楚。

例如，在 Sn_2 亲核取代反应中

$\text{Y}^- + \text{R}-\text{X} \rightleftharpoons \text{Y}-\text{R} + \text{X}^-$ 研究表明，R 为给电子基时，其反应速度要比 R 为 H 时的反应速度小，而 R 为吸电子基时，其反应速度要比 R 为 H 时的反应速度大。但是，研究中发现，在 $\text{R}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{CH}_2\text{Br} + \text{Br}^-$ （放射性 Br^- 离子） $\rightleftharpoons \text{R}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{CH}_2\text{Br}^* + \text{Br}^-$ 的反应中，无论 R 是吸电子基还是给电子基，其反应速度都要比 R 为 H 时的反应速度大。有人提出了如下解释：在反应中， Y^- 向化合物进攻，引起 X 脱离而生成 X^- ， X^- 脱离又促进了 Y^- 的进攻，也就是促进了 Y 与化合物的结合。这就是说， Y^- 的进攻（原因）引起 X^- 的脱离（结果），而 X^- 脱离（结果）又对 Y^- 的进攻（原因）发生了反作用，从而加快了反应速度。 Y^- 的进攻和 X^- 的脱离互为因果，表示如下：

Y^- 的进攻 \rightleftharpoons X^- 的脱离

还可以用下面的图示表示：



在酶催化反应中，因果的交互作用也表现得很明显。在酶催化中，酶分子的构象与底物的构象，有时在反应前并不完全吻合，当二者发生相互作用时，底物分子对酶分子发生诱导作用，使二者的构象相吻合，酶分子又对底物分子的反应发生催化作用。在这里也发生了原因和结果的交互作用。

原因和结果是一对重要的哲学范畴，反映着客观事物之间的规律性联系。因果联系及其交互作用，具有重要的认识论和方法论意义，它为我们提出了认识因果联系，进行因果解释的重要途径和方法。当研究某个问题而尚不知其原因的时候，这是对该问题的认识很不深刻的时候，为了探索原因，使认识不断深入，经过初步研究可以提出可能的原因，也就是从结果去追溯原因，这时，提出的可能的原因具有假设的性质，对认识起着指导作用，应当设法用这种可能的原因试探着解释现象。有时，一时弄清原因，也可以暂时撇开原因，或者说不问原因，仅从现实出发，从已知的经验事实出发，总结具体的规律性，这样也有利于开阔思路和研究工作的进行。这种研究，就其实质而言，是暂时撇开了“为什么”的问题，把研究的着眼点放在“如何”和“怎样”上。经过认识“如何”和“怎样”，逐步接近以致达到认识“为什么”。在化学中，如同在一般认识中一样，仅仅提出因果的交互作用是不够的，甚至是空洞的，重要的是在承认因果的交互作用的前提下，设法找出中介，即中间环节。

在化学中，常常从物质的性质和反应去认识物质的结构，这表现为从结果去认识原因；在认识了结构，特别是获得了关于结构的规律性认识以后，不仅能够解释物质的性质和反应，而且能够提供预见，这又表现为从原因去解释结果，预见可能产生的结果。在这里，关于结构的规律性认识或者说结构规律，起着中介的作用。化学中的具体规律，无论是组成规律、结构规律还是反应规律，其内容都是关于“如何”和“怎样”的说明。这就是说，当人们从结果去追溯原因暂时得不到什么肯定认识时，可以先就具体问题揭示有关的规律，基于规律性认识进而可以提供解释和预见，这时，这种规律性认识就表现为对原因和结果之间联系的认识的中间环节。规律性认识本身，即对化学中的规律的认识，也是发展的，化学中的规律有经验性规律和理论性规律，从经验性规律到理论性规律，标志着对规律认识的深化和发展。

三、化学中的经验性规律和理论性规律

1. 化学中的经验性规律

经验性规律是直接从经验资料中总结、概括出来的规律。经验性规律在化学中称为经验性定律，如定比定律、当量定律、气体化合体积定律等，都是化学中的经验性定律。

经验性规律和经验性认识是不同的。哲学中所说的经验性认识或经验认识，指的是人们在同客观对象的直接接触（包括借助于认识工具的接触）过程中对客观对象的现象和外部联系的反映。经验性规律或经验定律，虽然也是一种认识，是认识发展中的一个阶段，然而它已经不是对客观对象的现象和外部联系的反映，而是对事物之间本质关系在一定程度上的反映。

化学中的经验性规律是直接从化学实验事实中总结、概括出来的，因而是与化学实验事实（或称经验资料）直接相联系的，是在化学实验的基础上形成的。例如，定比定律的确立就经历了一个过程。自近代化学产生开始，化学实验就成为化学研究的一种基本方法和途径，人们在化学实验中不仅注意反应物和产物的性质的变化，还要注意研究反应过程中重量关系。正是在实验研究过程中逐步形成了每种化合物都有确定的组成的思想，也正是在这种思想的驱使下，普罗斯特才对化合物的组成进行了专题研究，而他得出定比定律的直接实验基础，是对碱式碳酸铜的组成所进行的分析，经过分析，他发现无论是天然的还是人造的碱式碳酸铜的组成完全相同，以此为基础，经过进一步推论，得出了定组成定律。又例如，气体化合体积定律的发现，也是直接从实验数据中总结、概括出来的。在氢、氧被发现不久，凯文迪许就测定了氢和氧化合成水的体积比。盖吕萨克受凯文迪许实验的启发，对氢和氧化合成水蒸气的体积关系进行了实验研究，同时他还做了许多其他实验，如氨与氯化氢的化合反应，一氧化碳与氧的化合反应，二氧化硫与氧的化合反应，等等，综合各种实验结果，盖吕萨克发现了气体化合体积定律。

当我们说化学中的经验性定律是从化学实验事实中直接总结、概括出来的时候，决不意味着忽视思维的作用，决不表示通过对经验事实的确认就能发现经验性定律。情况恰恰相反，化学中的经验性定律与经验事实有着直接的联系，但经验性定律不是经验事实的简单记录、描述和确认，而是基于经验事实提出了某种思想或假说，在这两者的相互作用中逐步形成的。经验性定律已经在一定程度上揭示了现象间的本质联系，因此，从经验事实到经验性定律，是认识的飞跃。从经验事实中发现和确立经验性定律，经过了去粗取精、去伪存真、由此及彼、由表及里的加工制做过程，同时还离不开一定的概念、思想、学说。上面分析过的定比定律和气体化合体积定律业已表明，无论是普罗斯特还是盖吕萨克，他们在实验研究中受别人的研究工作的启发，并在自己的研究中产生了某种思想，又在专门的实验研究中确定了这种思想，得出了具有规律性的认识，进而将这种认识表述出来，成为定律。还有，倍比定律的发现，首先是由于道尔顿基于原子论作出的推论，进而又用经验事实确证了这个推论。

从经验事实中发现和确立经验性定律，需要有深刻的思想。对于定比定律的发现，我们虽然难以清楚地描述出普罗斯特经历了怎样的思维过程，然而仅从当时他受到贝托雷的责难和他本人的答辩中可以窥见到，他在定比定

律上做了多么艰苦的研究工作和深入的思考！他发现和确立定比定律，关键之一是明确区分了化合物和混合物，据此他研究了人工制备的化合物和天然化合物的组成，研究了不同来源的同种化合物的组成，进行了多方面的详细的论证。这些都表明，他在发现定比定律的过程中，具有丰富的科学思想，他的科学思想无疑起了重要作用。

化学中的经验性规律，一般地说只确定了对象之间关系的“如何”或“怎么样”，经验性规律本身既没有说明“为什么”，也没有或暂时未能说明这一类对象间关系的“如何”或“怎么样”与其他对象间关系的“如何”或“怎么样”有什么联系，也就是说经验性规律之间的关系尚未能得到说明。例如，定比定律、化合量定律、倍比定律、质量守恒定律等，它们各自尚处于孤立状态，它们之间有什么联系，在经验性规律的认识阶段尚不能得到统一的理解和说明。

化学中的经验性规律，既然是规律，一经发现和确立，就具有指导作用。就以质量守恒定律、定比定律、倍比定律、化合量定律等所谓化学计算定律来说，它们被称为基本化学定律。这些定律不仅在发现它们那个时候具有重要的指导意义，就是在当代，这些定律仍然具有指导意义。这些定律之所以被称为基本化学定律，是因为它们实际上是化学科学赖以建立的基础。组成的测定，定量分析，化学反应中的计算，化学中的一些基本概念的确立，无不与这些经验性定律的发现和确立相联系。

2. 化学中的理论性规律

理论性规律是相对于经验性规律而言的，理论性规律一方面要以一定的实验事实为基础，另一方面又与新的概念的提出、某种理论的建立密切联系着。理论性规律不仅揭示了“如何”或“怎么样”，而且因为它的建立与某种概念和理论相联系，因此在确立理论性规律的过程中在一定程度上理解了为什么。化学中的理论性规律，一般地说，是包含在化学理论中的规律或规律性认识。化学理论之所以称为理论，是因为它是在一定的化学概念基础上，使用判断和推理的方法，反映了事物的本质、事物的全体和事物的内部联系，一句话，反映了物质分子及其变化的客观规律性。例如，原子分子论是化学中的基本理论，它包含着关于化学组成的规律性认识，如果我们将该理论中规律性认识，改为规律的形式，可以说：任何单质或化合物的分子，都是由具有一定质量（原子量）的原子所组成。同样，化学结构理论中包含着关于化学结构的规律性认识，化学热力学和动力学理论包含着化学反应的规律性认识，如此等等。这些理论中的规律性知识，都可以表述成化学规律的形式。就以普里戈金（Prigogine）创立的耗散结构理论来说，我们可以这样表述：任何一个开放系统达到远离平衡态的非线性区时，一旦系统的某个参量的变化达到一定的阈值，通过涨居，系统发生突变，由原来的无序的混乱状态转变到一种时间、空间或功能有序的新的状态，形成新的有序结构。这种表述具有“任何……都……”的形式，而且指出了客体（即系统）和条件，说明了如果具备了这些条件，必然会发生的情况。这无疑是一种规律。而这种规律是与理论密切结合的，理论在说明了这种规律性认识的同时，还说明了为什么会如此。

理论性规律无疑也是经过科学家的创造性研究而确立的规律。理论性规律具有解释、预见作用，而且理论性规律较之经验性规律这种作用表现得更

为突出。

3. 从经验性规律到理论性规律

化学史表明，在近代化学形成时期，最先发现和确立的规律是经验性规律，正如上面指出的，诸如定比定律、质量守恒定律、当量定律等；在化学中的一些分支领域，初创时期确立的规律也是经验性规律，例如，在气体物质化学反应的研究中，最先确立的是气体反应体积定律，在对溶液的研究中最先发现的是亨利定律，如此等等。随着化学的发展，研究的深入，在经验性规律的基础上，或者为了解释经验性规律，逐步建立相应的理论，同时，发现新的规律，使化学认识从经验性规律发展到理论性规律。

从经验性规律到理论性规律，大体说来，有两种形式。第一种形式，从知其然到知其所以然。例如，门捷列夫发现的元素周期律，是从已知元素及其性质的经验事实中总结、概括出来的，当时的发现仅仅指出了元素的性质随原子量的增加而呈周期性变化。在这个意义上它是一条经验性定律，只说明了是怎样的，未说明为什么会这样。进入 20 世纪，由于建立了原子结构模型，特别是建立了原子核外电子壳层结构模型，揭示了原子核外电子的填充规律，这时人们才认识到元素的性质是随原子序数（即原子核电荷数）的递增而呈周期性变化的，是由原子核外电子的填充规律决定的。如果说门捷列夫发现周期律时，该规律是直接从经验资料中总结出来的，因而是与经验资料直接相联系的，那么原子序数、核电荷数以及原子核外电子的填充规律等等的发现，固然与一定的经验资料也有着密切的联系，但更为重要的是与新理论的建立、新概念的提出密切相关。原子核外电子的填充规律，首先是建立在原子有核模型和玻尔的电子结构模型的基础上，其次又是从量子论和量子力学理论中推导出来的，没有这些新的模型和新的理论，不可能揭示电子的填充规律。同时，在确立电子填充规律时，不仅知道了原子核外电子怎样填充，而且也从理论上理解了它们为什么会这样填充。在这个意义上说，原子核外电子的填充规律是理论性规律。从门捷列夫元素周期律到现代的元素周期律，或者确切地说，从发现元素的性质随原子量的增加而呈周期性变化到揭示元素的性质随原子序数的递增而呈周期性变化，并揭示了这种周期性变化的内在本质，是人们对元素之间关系的规律的认识，从知其然到知其所以然的发展过程。

第二种形式，从特殊到普遍，从分立到统一。化学中的经验性规律和理论性规律之间的关系，表现为特殊性规律和普遍性规律之间的关系。因此，从经验性规律到理论性规律，表现为认识从特殊发展到普遍，从分立发展到统一。经验性规律是理论性规律的一种表现形式，或者是理论性规律的特殊情况，经验性规律可以从理论性规律得到解释，经验性规律之间的关系也可以从理论性规律获得说明；理论性规律是经验性规律的综合和统一，从理论性规律可以推论或演绎出经验性规律。

例如，化学中的定比定律、当量定律、质量守恒定律等经验性规律，在建立原子分子论以前，它们是各自分立的，不知道它们之间有什么关系；原子分子论是化学的基本理论，包含着关于化学组成的规律性认识，可以表述成化学规律的形式：任何单质或化合物的分子，都是由具有一定原子量的原子组成的，单质分子是由同种元素的原子组成的，化合物的分子是由不同种元素的原子组成的。每一经验性化学定律（这里指的是定比定律、当量定律、

质量守恒定律等)都可以看作是上述理论性规律的表现形式,而后者(理论性规律)是前者(经验性规律)的内在根据,从原子分子论中可以推论或演绎出定比定律、当量定律等经验性规律。

对经验性规律和理论性规律之间关系的分析具有认识论和方法论意义。它给人以启示:当发现经验性规律以后,不应当就此止步,相反应当以此为新的起点,进一步从理论上对经验性规律进行解释,寻求理论解释的过程也就是将研究工作引向深入的过程。从这种观点看,盖吕萨克发现气体化合体积定律以后,将该定律与道尔顿的原子论进行比较、联想,进行推论,提出相同体积的不同气体在相同条件下含有相同数目的原子,尽管他的结论不正确,但是,他这样做是符合认识发展规律的,也正因为提出了进一步的假定,才引起了一场争论,才引出了分子假说。它还给人以启示:在建立理论、揭示理论性规律以后,也应当想到从该理论或理论性规律出发,可能引出的新的结果、新的规律。道尔顿提出化学原子论后,从中推论出可能存在着倍比关系,因为无论在组成中还是在反应中,

原子只能以一个、两个、三个等整数参加,不能以 $\frac{1}{2}$ 、 $\frac{1}{3}$ 、 $\frac{1}{4}$ 等非整数参加,这样,当几种相同元素以不同比例组成化合物时,应当有倍比关系。道尔顿从理论中作出了推论,不仅发现了新的定律,而且找到了验证原子论的途径。

经验性规律和理论性规律之间的区分是相对的,理论性规律也可以分出不同层次。相对于某种经验性规律的理论性规律,在另一种场合,又可以面对比它更为深刻的理论性规律。人们对化学规律的认识,从经验性规律发展到理论性规律,从一个层次的理论性规律发展到另一个层次的理论性规律,是有限的,是永远不会完结的。

正因为经验性规律和理论性规律的区分具有相对性,因此在化学中还有些定律具有中间性质,也就是既具有经验性规律的特征又具有理论性规律的特征,它们是半经验性半理论性规律。我们曾经指出过的量子化学的一些半经验性方程,大都具有这种特征。此外,让我再做一些具体分析。

我们知道,在科学中,经验性规律有时可以通过经验性公式来表示。例如,天文学中的波德定律,是一个经验公式:

$$R = 0.3 \times 2^{n-2} + 0.4 \text{ (天文单位)}$$

式中 R 为太阳系中任一行星的轨道半径, n 为正整数。开普勒行星运动第三定律,有如下形式:

$$T^2 = K(R)^3$$

式中 K 为常数, T 为任一行星绕太阳旋转一周的时间, R 为该行星的轨道半径。像这样的经验公式,在化学中也有,对这些经验公式的分析对化学规律的认识也有启发作用。这类经验公式是怎样得出来的呢?这些经验公式是从实际观测数据中求出来的,如果用简化的、形象的语言,可以说是从观测数据中凑出来的。在这里,“凑出来”这三个字毫无贬意,要知道,从一些数据中“凑出来”具有规律性内容的公式,着实是一种创造。就以开普勒第三定律为例来说吧。开普勒掌握的数据,见下表所示:

	水星	金星	地球	火星	木星	土星
T	0.241	0.615	1	1.881	11.862	29.457
R	0.387	0.723	1	1.524	5.203	9.539

这两组数据表面看来没有什么规律可言，开普勒在追求宇宙和谐的观念推动下，硬是从这些数据中经过反复计算“凑出来”一个公式。

化学中也有类似的公式，例如，范特霍夫曾提出一个表示反应速度随温度变化的规律的经验公式：

$$\frac{K_{t+10}}{K_t} = 2 \sim 3$$

该公式表示，温度每升高 10 ，反应速度常数增加 2—3 倍。很明显，这个公式是从大量的实验数据中凑出来的。

上述事例告诉我们，化学研究，积累经验事实是重要的，而从经验事实中，特别是从经验数据中总结出规律性的东西同样是重要的，在一定意义上可以说更重要。如何从经验数据中总结出经验规律、经验公式，看来，在一定思想指导下，设法“凑出来”，是行之有效的方法，“凑出来”三个字包含着无穷奥妙，表现出科学工作者的智慧。

我们所说的半经验半理论性规律及其公式，与上述分析的经验性公式不同，它不能从数据中凑出来，需要理论和计算的帮助。例如，有机化合物同系线性规律，可以用三种关联方程式来表示：

$$E = a + b\left(\frac{1}{a}\right)^{2/n} \quad E \text{ 为相应的分子轨道能量，}$$

$$E = a + b \left(\frac{1}{a}\right)^{2/n} \quad E \text{ 为各相应能级的差量，}$$

$$P = a + b \left(\frac{1}{a}\right)^{2/n} \quad P \text{ 为物理化学性能。}$$

蒋明谦指出，“由于这三个方程式普遍适用于各类型同系物的各种主要物理化学性能的递变情况，因此我们将它们所体现的同系递变关系，总起来叫做同系递变线性规律，简称同系线性规律。

上述方程式中的 $\left(\frac{1}{a}\right)^{2/n}$ 为同系因子，它是体现分子整体性的一种结构因素，是分子结构性能关系中矛盾的主要方面。上述方程式的得出，一方面依赖于有机化合物结构和性能的经验事实，另一方面也依赖于分子轨道方法。因此，总起来可以说，体现同系递变关系的这三个方程式，是半经验性半理论性公式。现代化学已不同于经典化学，更不同于近代早期的化学，它所研究的问题越来越复杂，面对的经验数据也不能与过去同日而语，在现代化学发展状况下，若单纯依靠“凑”，已经很困难了，新的规律的发现，依靠数据的积累，也依靠理论的指导和帮助。

第九章 化学中的理论

在讨论化学中的理论以前，首先应当对理论这个概念作一简要说明。一般地说，理论是理性认识形式，是系统化的知识体系。从发展的观点看，一切理论都曾经是假说，正如恩格斯所说：“只要自然科学在思维着，它的发展形式就是假说。”一切科学的理论都是从假说发展而来，同时它又与假说相区别。科学的理论是经过实践证实了的假说，假说是尚未经过实践验证的理论。只要我们承认实践的检验有两重作用，即证实和证伪，就应当承认假说和科学的理论之间的区别。

化学中的理论，简称化学理论，是科学理论的一个重要组成部分。但是，一个时期以来，存在不存在化学理论似乎成了问题，有人说存在，有人说不存在，由此产生了分歧，发生了争论；与这个问题密切联系，化学是不是一门相对独立的基础性学科，似乎也产生了疑问。在这一章，主要围绕这些疑难，对化学理论的内容、实质和特点等问题，作一些探讨。

一、化学理论的形成和发展

只要读一读化学史，我们就会了解，化学理论也像其他科学理论一样，是在历史上形成和发展起来的。在其形成、发展过程中，逐步展现出化学理论的丰富内容。我们认为没有必要简单重复化学史教科书所提供的材料，在这里，我们只想以这些材料为基础，分析各个历史时期化学理论的实质，揭示其发展的内在逻辑。

1.17、18 世纪——元素论

众所周知，人们之所以需要理论，首先是为了解释观察到的现象。解释现象，先是用已有的概念、理论和观念，已有的不够用了，解释不了了，也就是说已有的理论与观察到的现象发生矛盾了，则要修正原有的概念和理论，提出新的概念和理论，由此推动理论的发展。

近代化学肇始，人们用来解释化学现象的现成概念和理论，主要是从炼金术承袭下来的。波义耳虽然已经对炼金术及其以后的元素观念（如帕拉塞尔斯的三元素说）提出了怀疑，但是这种观念的阴魂并未立即消散。17 世纪中叶以后，一些化学家对燃烧现象进行了实验研究，并试图对这种现象作出理论解释。波义耳从他的微粒说出发，对金属的煅烧提出了一种反应式：



梅猷（John Mayow）等人也是沿着这种思路思考燃烧问题。这类解释已经猜到了某种特殊的物质或者说某种元素在燃烧中所起的作用，例如梅猷已经提出了空气中含有的一种所谓的“硝气精”，它在燃烧中是必不可少的，而且呼吸也需要它、离不开它。这就是说，在梅猷的解释中，实质上是将某种特殊的元素视为燃烧和呼吸中所需要的东西，以这种特殊的元素解释燃烧和呼吸现象。可惜，猜测毕竟是猜测，它没有揭示出这种元素究竟是什么，也没有形成系统性的理论。

相反，贝歇尔（J·J·Becher）承袭了帕拉塞尔斯的三元素说，提出了三种土质学说：石土、汞土和油土。油土是可燃性的，它含于一切可燃物体中，燃烧时油土被释放出来。以此为基础，施塔尔于 1703 年建立了燃素说。这个学说用燃素的释放和吸收，解释了燃烧现象和一些化学变化，形成了比较系统的学说。燃素说可以说是化学史上的第一个系统的理论，实质上是一种系统的假说。燃素是什么？施塔尔认为燃素是火的原质和火的要素，是存在于可燃物中的要素。从实质上看，燃素和热素、光素、电液等一样，是科学发展的幼年时期的产物，是为了说明某种现象和某种性质而提出来的特殊质素。燃素是可燃性的物质承担者，热素是热现象的物质承担者，光素是光的物质承担者，如此等等。燃素作为假想的可燃性的物质承担者，在一定意义上类似于古代自然哲学或炼金术中的元素。因此，燃素也是一种元素，就像热素、光素被认为是元素一样。拉瓦锡在 18 世纪下半叶提出的第一张元素表中，仍然把光素和热素与氧、氮、氢等一起看作为物质的元素，他没有把燃素列入元素表，那是因为他已经找出了燃素的真实对立物即氧元素。

拉瓦锡在揭示氧的真实意义基础上建立了燃烧的氧化学说。这个学说能够解释燃素说所能够解释的一切现象，并把被燃素说倒置的过程顺过来，如金属的煅烧及其逆过程，酸的生成等；这个学说还能够解释燃素说所不能解释的现象，如燃素从金属中分解出去重量反而增加了，这是燃素说不能自圆

其说的疑难，而氧化说把金属煅烧视为金属与氧结合，重量增加是自然的事。如果说燃素说是化学史上第一个系统的假说，那么氧化说则是化学史上第一个科学的系统理论。前者是相对错误的学说，后者是具有相对真理性的理论，因而是科学的理论。从实质上看，氧化说是以氧元素为基础而建立起来的理论，因而归根到底是用元素解释化学现象而形成的理论。该理论建立后，拉瓦锡以此学说系统地解释了已知的各种化学现象，并推进了对元素的认识和进一步研究。

17、18 世纪，由于受机械论的影响，面对自然界的各种现象，除了用质素解释以外，还用力来解释。在化学中，除了燃素说，还形成了亲和力学说。如前所述，波义耳已经用机械力解释微粒的结合，并且已经提出了通过不同微粒之间的反应确定亲和力相对大小的思想。法国的杰奥弗瓦发展了这一思想，他指出：“每当两种有结合倾向的物质相结合后，只要加进一种与两者之一具有更强亲和力的第三种物质时，它就会与这一成分结合生成一种新物质，而把另一种离析出来。他以这个原理为基础，通过实验编制了亲和力表。此后，相继有许多化学家研究和编制亲和力表。贝格曼于 1775 年提出了一张包括 59 种物质的亲和力表，并将每种物质按溶液反应和熔融反应分别排列。从对亲和力的研究导致了对化学反应的研究。贝格曼认为，化学变化仅仅由其内部原因决定，与外部条件和反应物之间量的比例无关，两种物体在同一条件下化合的亲和力大小是固定不变的，一切化学变化都能进行到底。

法国化学家贝托雷对亲和力学说进行了深入研究，于 1801 年发表了《亲和力定律的研究》，经过补充、修改于 1803 年出版了《化学静力学概论》。在这些著作中，贝托雷指出，化学反应不仅决定于亲和力的大小，而且决定于反应物的质量，而且质量对反应的影响有时要大于亲和力的影响。他还指出，外部条件首先是温度对化学反应过程和结果有较大影响；化学反应中生成的产物对化学反应具有阻滞作用，因此，化学反应不能进行到底，只能建立反应物和产物之间的平衡。

从波义耳到贝托雷，实质上是将亲和力看作物质微粒的一种特性，它体现于物质微粒的相互关系中，通过这种关系可以比较其大小，并通过对亲和力的研究推进了对化学反应的研究，为化学反应理论的建立准备了条件。

从上面简述的内容中可以看出，17、18 世纪的化学理论，主要是以元素和亲和力两个基本概念为基础而形成的。这个时期的化学理论，从内容来看，包括燃烧理论、化学反应理论等等，既有相对错误的假说，也有基本正确的科学理论，既有比较系统、比较成熟的理论，也有解释个别化学事实的不够系统，或不够成熟的理论。无论属于哪种情况，这个时期的化学理论，就其实质而言，是用元素和亲和力解释化学现象而形成的理论，是元素——亲和力的理论，这种理论基本上是在化学领域产生和发展的，是为解释化学现象而提出来的化学理论。

2. 19 世纪——原子论

19 世纪初，道尔顿基于对气体扩散和不同气体混合的观察和研究提出了原子理论，进而把原子概念与化学分解和化学结合的经验事实结合起来，建

龚育之：《关于自然科学发展规律的几个问题》，上海人民出版社，1978 年 10 月第 2 版，第 156 页。
赵匡华：《化学通史》，高等教育出版社，1993 年版，第 63 页。

立了化学原子论。道尔顿指出，化学研究的一个重要目标是确定组成一种化合物的个体的相对重量；他的《化学哲学新体系》一书的一个大目标，就是要指出简单物体或化合物中终极质点的相对重量和组成一复合质点的简单本质点的数目，以及形成一个更复杂的化合质点中较简单的化合质点的数目。为此他提出了一整套规则作为研究有关化学结合的指导原则，即：两物体 A 和 B 只有一种化合物时，必须认为该化合物是二元的，除非某种特殊原因使之不是这样，当发现有两种化合物时必须认为它们一种是二元的，一种是三元的，当发现有三种化合物时，一种是二元的，另两种是三元的，等等。

化学原子论的建立，使已经确立的化学基本定律得到了统一的理论解释，使元素概念进一步明确起来，使关于化学组成和性质的认识获得了牢固的理论基础。在这个理论上进一步建立了分子理论，原子论和分子论统一起来成为原子分子理论，它不仅是 19 世纪化学的基本理论，也是 19 世纪物理学乃至整个自然科学的基本理论。依据原子分子理论，分子是原子的结合，是化学物质能够独立存在的最小部分，或最小微粒；单质分子由同一元素原子组成，化合物分子由不同元素原子组成；分子在化学反应中发生变化，而原子是组成分子的最小微粒，它在化学反应中不发生变化。

道尔顿在提出化学原子论时，仅仅指出了不同元素的简单原子以简单数目比结合成复杂原子，但他没有说明简单原子如何结合成复杂原子。19 世纪初，贝采里乌斯用静电吸引解释了这个问题，尽管他提出的电化学二元学说后来被化学家放弃了，但是，这个学说将原子之间的化学相互作用归结为静电相互作用，包含着合理因素。在电化学二元学说应用于有机化合物的过程中，遇到了困难和矛盾。正是在克服困难和解决矛盾中，提出了原子价概念和理论，并以此为基础，形成了化学结构理论，发展了化学结构理论。可以说，在 19 世纪，特别是 19 世纪中叶以前，关于物质的组成和结构的理论，基本上是以原子分子论和亲和力学说（及其变种）为基础而建立起来的，基本上是在化学研究领域内发展的。诚然，道尔顿最初提出原子论时，是从对大气的观察和研究开始的；然而，对原子论的进一步论证以及原子论的进一步发展，基本上是在化学范围内进行的。原子结合成分子，原子之间的结合力，经典力学和物理学不能给出具体的说明，抽象的亲和力似乎使问题得到了解决，实际上问题并没有解决。化学循着自身的研究道路，从实际的化学事实出发，抽象出原子价、化学键等概念，对原子如何结合成分子给出了具体的描述和解释。对于原子的最基本特征——原子量的测定，虽说不能完全脱离物理学，但主要还是化学家用化学实验方法逐步解决的。在一个很长时期内，原子和元素这两个概念不仅是相通的，而且是等价的，元素是化学的研究对象，原子也自然是化学的研究对象。因此，门捷列夫曾经把化学定义为关于元素的科学，而凯库勒把化学定义为原子的科学，这两种说法是同义的，与此相对应，凯库勒认为物理学是关于分子的科学。

除了物质的组成和结构以外，化学还要研究化学反应。19 世纪中叶以前，正如前面已经指出的，对化学反应的研究也是从亲和力问题着手的，主要是在化学领域中进行的，但没有取得实质性的理论成果。

与化学中对物质的组成、结构和反应进行研究的同时，热化学、电化学等研究也相应取得了进展。在物理学中确立了热力学第一、第二定律以后，一些物理学家和化学家，确切地说，一些物理化学家着手将物理学的理论和方法推广到化学中来，逐步建立了化学热力学和化学动力学理论，从而使物

理化学成为一门相对独立的边缘学科。

化学热力学和化学动力学主要是研究化学反应的，从这个意义上说，属于化学范围，属于化学的分支学科；同时，它们又是用物理学理论和方法研究化学反应的，它们的基础是物理学理论。化学热力学研究的中心问题是化学反应的方向和限度问题。从化学平衡出发，应用热力学第二定律和熵函数进行处理，吉布斯以内能、熵、体积等热力学参量建立状态方程，引入“热力学势”、“自由能”等概念，使热力学适用于理想的化学反应体系和多组分的多相体系。20世纪初，路易斯(G·N·Lewis)提出“逸度”和“活度”概念，逸度可以作为实际气体对理想气体的校正压力，活度可以作为实际溶液或气体对理想溶液或气体的校正浓度，借助于这两个概念使实际体系具有了与理想体系完全相同的热力学关系式。

化学动力学研究的中心问题是化学反应的速度和机理，包括催化过程的机理。化学动力学的形成和发展，比化学热力学要晚一些。在19世纪，化学动力学还只是唯象地对宏观化学反应速率及历程进行研究和探求，可以说没有达到化学热力学那样的成熟程度和系统程度。

综合起来看，在19世纪，化学中相继建立了原子分子论，化学结构理论，化学热力学理论和化学动力学理论。就其实质而言，与原子和能量有着密切的联系。原子是一切化学物质的组成和结构的基础，也是化学反应的基础，而化学结构和化学反应都离不开能量及其转化。就物质的组成、结构、反应的物质基础方面来说，19世纪化学理论的基础是原子论，化学组成式、分子式和反应式都离不开原子。

3. 20世纪——电子论

19世纪和20世纪之交，以物理学中的一系列重大发现为开端，引发了一场物理学革命。由于在这场革命中，物理学成为带头学科，因此物理学革命具有整个科学革命的意义。由此在科学的历史上，明确划分了两个时期：这场科学革命以前的科学，叫做经典科学；这场革命以后，科学进入了现代科学发展时期。

在物理学的一系列重大发现中，几乎都对化学的发展起了推动作用。从理论的角度看，其中尤以电子的发现和原子结构模型的建立，对现代化学理论的发展具有更为重要的意义。

随着电子的发现和原子结构模型的建立，使化学对原子价和化学键的本质获得了深刻认识，从而对物质的微观结构，也有了深一层的认识。以1927年海特勒和伦敦引用薛定谔方程处理氢分子为标志，兴起了量子化学研究，逐步建立了量子化学理论。

在30—50年代，主要是运用半经验方法研究化学键问题，描绘了化学键的各种类型，解释了结构和性能之间的关系，开始揭示分子容易发生反应的部位，为研究化学反应提供了一定的理论依据。到60年代，量子化学研究日益深入，领域不断扩大，特别是由于发现了分子轨道对称守恒原理，能够从理论上解释和预言某些化学反应（如协同反应）的方向，使化学研究从静态发展到动态。进入70年代，量子化学研究已经涉及催化反应机理。

与量子化学理论的发展相联系，化学动力学也日益微观化和量子力学化。化学动力学已经不限于唯象地描述宏观化学反应及其历程，已经开始对于基元分子过程进行分子水平的和量子态的研究，建立起分子反应动态学理

论。宏观化学动力学研究所得结果，仅仅是在热平衡条件下对为数众多的基元分子过程所观测到的统计平均值，它掩盖了基元分子过程中反应物分子的各种具体形象，如反应物分子的平动和内部运动的量子态、反应物分子相互趋近时相对速度、量子态、空间取向等等。现代化学动力学，则可以借助于分子束、激光等，使反应物分子在单次碰撞条件下发生反应，可以研究指定量子态的反应物分子发生的反应或生成指定量子态的产物分子的反应。应用激光动态光谱学的成果研究化学反应，可以展示出某些分子的空间取向、电荷转移、能量传递、化学键的破坏和形成等细节。

20 世纪的化学理论，除了与量子力学有着紧密联系外，还与统计力学等密切相关。统计力学理论主要是关于物质体系平衡性质的统计理论，统计力学中的物质体系是由大量的按照一定的力学规律运动的分子和原子等组成和达成平衡的体系。统计力学理论应用于物理化学中，能够对物质体系的热力学性质和动力学性质作出解释。量子化学的发展离不开数学工具，量子化学与计算机科学结合起来，形成量子计算化学，在量子计算化学的帮助下，量子化学不断扩大自己的研究范围，不断取得新的成果。

现代化学理论的核心是量子化学理论，而量子化学理论依赖于对电子运动规律的研究，从这个意义上说，现代化学理论的实质或基础，是电子运动论。

从化学理论的历史发展中，我们可以得出如下三点认识：

第一、从历史和逻辑相统一的观点来看，化学理论或者确切地说化学基本理论相应于三个发展阶段有三种形态，这就是：17、18 世纪形成的理论，主要是关于组成和反应的理论，这个阶段反应理论具有特殊的性质，就是说，这个阶段形成的反应理论是关于氧化还原这一类反应的理论，也就是燃烧和煅烧这类反应的理论，尽管当时也曾试图以这种理论解释其他化学现象，如酸性、碱性等，但是就其主要内容而言，仍然是燃烧和煅烧之类的现象的理论。19 世纪形成的理论，主要是关于分子的结构和化学反应的理论，这个阶段形成的反应理论已经不再局限于特殊类型的反应，而是关于一般化学反应的理论。20 世纪的化学理论，应当认为是结构和反应相统一的理论。这样看来，化学理论发展的内在逻辑表现为：组成和性质的理论；结构理论和反应理论；结构和反应相统一的理论。这个逻辑次序恰好与人们对化学问题的认识次序相协调。化学认识的发展次序是先认识组成，继之认识结构，在此基础上又认识了化学反应或化学过程。

第二，组成和性质理论的基本概念是元素，组成与性质密切相关，元素的性质，在 17、18 世纪主要表现为亲和性或亲和力，元素依靠亲和力构成化合物，由于不同元素之间亲和力大小不同而形成化学反应。燃素说和氧化说，从实质上看，主要是在元素概念基础上建立起来的，燃素的分解和吸收，氧与其他物质的结合，虽然没有直接使用亲和力概念，但在当时的思想背景下也不能说与亲和力完全无关。因此，从客体上说，组成的物质基础是元素，组成理论的实质是元素论，是关于元素的学说。19 世纪，从原子论建立时开始，揭示了元素的物质内容，原子成了组成和结构的最基本的物质单位。原子的最基本的性质是质量（即原子量）和结合能力（即化合价、化学键），基于原子量和化合价的资料，揭示了元素周期律，形成了周期性理论。基于原子和化合价建立了化学结构理论。化合价和化学键不过是亲和力思想的发展，亲和力的具体表现形式，从这个意义上说，19 世纪，在结构理论中仍然

继承了亲和力的思想；与此同时，在反应理论中，起初也是为了寻求亲和力的量度，后来引进了热力学理论，采用了能量概念，如自由能、化学位等。亲和力主要表现为吸引，而能量则主要表现为排斥，吸引依靠它的反面排斥来量度，正如现代化学中原子之间结合力的强弱用键能来量度一样。无论是结构还是反应，在 19 世纪，都离不开原子，因此，19 世纪的化学理论的实质是原子论。20 世纪的化学理论与以往的化学理论的根本区别在于，它已经深入到原子的内部结构。以量子化学为主要内容的现代化学理论，它的理论基础是量子力学理论，而量子力学理论是关于微观粒子运动规律的理论。量子化学以薛定谔方程来处理分子，处处涉及原子核外电子运动的规律。现代化学理论，无论是讨论结构问题还是讨论反应问题，都离不开电子，言必谈电子，正如 19 世纪言必谈原子、17、18 世纪言必谈元素一样。正是在这个意义上可以说，现代化学理论的实质是电子论。

从元素论到原子论，再从原子论到电子论，反映了化学认识的深入，也反映了化学理论的发展。

第三，化学理论从它形成时开始，就与物理学理论发生了密切联系。早期的气体定律和理论，既是化学的也是物理学的。溶液理论在它建立初期，就有化学说和物理说之分，后来发展了溶液的物理化学理论，如电离学说，既与物理学中电学有关，也与化学中离解相联，勿宁说是物理化学理论。至于前面提到的化学热力学、化学动力学、量子化学等，更与物理学理论直接联系，物理学理论成为化学理论的直接的理论来源和理论基础。正因如此，化学理论和物理学理论的关系问题，成了引人注意的问题，这是个基本理论问题或者说是个哲学问题，在讨论化学理论的时候，不能对这个问题不闻不问。下面，我们就来讨论这个问题。

二、化学理论和物理学理论

1. 归结论和独特论

一般地说，人们都承认化学是一门基础科学，它不仅对认识生物学的、地质学的、天体演化学的、宇宙化学的现象具有基本意义，而且在发展生产、国民经济和满足人们的日常需要方面起着非常基础性作用。可是，就是这样一门重要的科学，有人却要剥夺它拥有理论的权力。没有理论还成为科学吗？没有自己的理论的科学能够相对独立地存在吗？

早在半个多世纪之前，德国哲学家、逻辑经验主义的重要代表人物赖兴巴赫(H·Reichnbach)就曾提出，“我们有理由说，化学是物理学的一部分，就象热力学或电的学说一样”。还有人提出，在日常看来是合理的意义上说，物理学和化学之间有明显的不同，但是若从现代原子物理学和核物理学的水平上讨论问题，这样的区别多半是不存在的，真正说来，在精密科学体系中并没有化学的位置。看来，确实存在着一种观点，试图取消化学，或者说把化学归结为物理学，把化学理论归结为物理学理论。我们暂且把这种观点称为“归结论”观点。

在这种“归结论”的挑战面前，一些化学家，特别是实验化学家，对引用物理学理论解决化学问题的可能性表示怀疑，或者对量子化学理论和计算表示不信任，他们希望在传统化学理论范围内进行研究工作，保持化学的独特性，相对于“归结论”，我们暂且将这种观点或思想叫做“独特论”。

化学发展的事实已经表明，量子化学理论和计算方法，对化学研究具有重要作用，对量子化学理论的轻视和怀疑已逐渐消失了。可是化学理论和物理学理论的关系问题并没有消失，仍然需要从理论上给予说明。这个问题实际上涉及化学理论的特点问题。那么，究竟应当如何看待这个问题呢？下面，我们试图从本体论、认识论和方法论三种角度对这个问题分别加以说明。

从本体论观点看问题，在物质结构方面，化学和物理学研究的物质客体有共同之点。化学研究的对象主要是分子，涉及原子、原子核和核外电子；物理学也研究分子，同时也研究原子、原子核和核外电子。物理学研究的物质结构层次比化学广泛得多，可以说，物理学研究的，上至宏观物体、地球和天体，下至基本粒子及更深的层次。在原子核和核外电子、原子、分子、聚集态这几个层次上，这两门科学研究的对象是相同的，或者说，这几个层次的物质共同为这两门科学所研究。

在相互作用方面，化学和物理学研究的内容也有相同点。从现代科学来看，自然界中的相互作用分成四类：引力、电磁力、弱力和强力。这四种力或四种相互作用都是物理学研究的内容，化学主要研究电磁相互作用。现代科学，主要是现代物理学的发展，已经否定了特殊的“化学力”的存在，也就是否定了特殊的“化学亲和力”的存在。化学亲和力在本质上是电磁力或电磁相互作用，从这点上说，化学相互作用实质上是物理相互作用。

有些化学文献试图区分物理相互作用和化学相互作用，区分的标准主要有两条：一条是能量标准，一条是形成什么样的体系标准。在这类文献的作

参见日丹诺夫：《唯物辩证法和化学进化问题》，载于前苏联《哲学问题》，1980年第1期，第59页。

参见前苏联《哲学问题》1980年第1期第59页。

者看来，化学中的相互作用是能够导致形成分子客体稳定体系的相互作用，其能量不低于 20—40 千焦耳/摩尔。可是，这样一来，把氢键也排除在化学相互作用之外了。况且，这里所说的化学相互作用，归根到底，还是电磁相互作用。

这就是说，无论从物质的层次结构还是从物质之间相互作用的本质来说，化学确实没有特殊的、根本不同于物理学的东西。在历史上形成的化学亲和力、化合价、化学键等概念，能够较好地解释化学经验事实，以这些化学概念为基础形成了化学理论。如今，现代物理学业已表明，原子之间确实没有特殊的、根本不同于物理相互作用的化学相互作用，化合价、化学键都可以基于电子的运动予以说明，也就是依据量子力学理论作出解释。这些事实意味着在本质论上，化学没有特殊的、根本不同于物理学理论的理论，从基础方面看，化学理论与物理学理论是相通的，甚至可以说，化学理论可以归结为物理学理论。

既然如此，化学有没有自己的理论，化学能不能作为一门相对独立的科学？要回答这个问题，就需要转向第二种观点，即认识论的观点。

从认识论观点看问题，对于同一的或相同的对象，可以从不同角度去认识，从而形成不同的理论。或者说，对于同一的或相同的对象，研究的重点不同，形成的理论也会具有不同的特点。

物理学无论是力学、电动力学、统计力学，还是热力学、量子力学，它们对自己研究对象进行研究时，侧重于一般化、抽象化或理想化。例如，力学研究质点，电动力学研究电磁场，统计力学研究系综，热力学研究系统，量子力学研究微观粒子。这里所说的质点、电磁场、系综、系统、微观粒子等，都具有理想化的特征。物理学从这种理想化的对象出发，揭示它们的运动规律，建立一般性方程，并对这些规律、方程进行解释，从而形成抽象化、数学化、形式化的理论。现代理论物理学中，充满了符号、公式，几乎通篇是符号、公式的推演。在一定意义上可以说，现代物理学理论是符号、公式及其推演过程所形成的体系。

化学不同于物理学，化学侧重于研究具体的、实际的东西。化学研究的分子，不是抽象化的分子，而是多种多样的、具体的分子及其结构、性质和化学反应，由此形成的化学理论具有体的内容，具体的形态。反过来说，基于具体的对象所形成的化学理论，要能够解释具体的、多种多样的化学经验事实。

化学理论和物理学理论的关系，表现为特殊和一般的关系。物理学研究电子、原子、分子的一般运动规律，形成普遍性理论；化学则将这种一般运动规律和普遍性理论与化学研究的具体内容结合起来，把这种普遍性理论应用于化学经验事实，形成能够解释化学经验事实并适用于化学的理论。这时，物理学中的理论发生“变形”，已经不再是原来形态的物理学理论而成为化学理论了。例如，热力学理论是研究能量相互转变所遵循的规律的理论，能量转变是普遍存在的，因此热力学理论的应用范围非常广泛。将热力学理论应用于化学，研究化学反应中的能量平衡和化学反应平衡条件，需要在热力学定律基础上导出适用于化学问题的函数。例如，内能 U 是基本函数，它表示了热力学第一定律的基本内容，本来有内能、功和热就可以解决问题，但是由于化学过程一般是在恒压下进行的，因此，在热力学定律之后还要导出适于恒压过程的热函。同样，熵 S 是热力学第二定律的基本函数，它表示了

第二定律的全部内容，完全可以解决自动过程进行的方向和限度问题，但是利用熵 S 判断恒压、恒容或恒温过程很不方便，在热力学第二定律之后还要导出新的状态函数：等温等容位和等温等压位。经过将热力学定律“变形”，导出一些新的函数，使之一步步适用于处理化学反应过程，由此形成了化学热力学理论。它具有了自己的存在形式和特点，具有了自身的特殊功能，它已经不是原来意义上的热力学理论，而是化学热力学理论了。

从本体论和认识论观点所作的分析中，自然可以引出方法论观点。从物理学理论到化学理论，也就是将物理学理论推广到化学领域，解决化学的实际问题，在一定意义上说，这是个演绎过程。然而，这种演绎过程不是形式逻辑所说的那种演绎推理过程，正如刚刚说过的，在演绎中使原来的理论发生了“变形”。反过来说，从化学理论到物理学理论，从方法论上看是还原过程。科学发展的实际情况表明，还原是一种重要方法，要认识一个层次的本质需要深入到下一个更深层次中去。正是在这个意义上，化学研究分子及其变化时，要研究原子的结构和原子中的电子运动规律。但是，还原不是为了还原而还原，不是为了取消被还原的问题或将被还原的问题归结为还原的问题上去，还原归根到底是为了说明所要说明的问题。因此，从追溯问题的实质上说，是需要还原的，甚至可以说需要“归结”，但是就具体内容而言，是不能完全还原，更不能归结的。

仅仅做了上述说明，似乎还没有完全解决化学理论和物理学理论的关系问题，因为仅仅从特殊和一般的关系上看，人们总还可以提出这样的问题：一般包含着特殊，物理学理论包含着化学理论。为了更深入探讨这个问题，让我们转换个角度，研究一下理论发展的规律，并从这种规律的角度，讨论物理学理论和化学理论的关系。

2. 理论的深度发展和广度发展

一般地说，理论的发展有深度和广度两个方向，向深度发展叫做深度发展，向广度扩张叫广度发展。理论的深度发展是理论的根本变革和深化，是开拓前进道路的发展。在深度发展中，产生新的概念，提出新的思想，揭示新的规律，建立新的基础。例如，从经典物理学发展到相对论和量子力学，就是理论的深度发展。理论的广度发展，是新理论向广度的扩张，是理论应用范围的扩展。例如，量子力学建立以后向各个领域的推广、应用，表现为理论的广度发展。

物理学理论和化学理论之间的关系，表现为理论的深度发展和广度发展的关系。物理学的深度发展，建立起新理论，开拓出新道路，奠定了新基础。化学则引用物理学中建立的新理论解释新事实，形成新理论。在这里要着重说明的是，理论的广度发展也是一种发展。发展是产生和消失的统一，发展是生成，广度发展中也有生成，有新内容的形成。这就是说，在深度发展中形成的新理论，向广度扩张的过程中，不是理论的简单外推，包含着新的内容、新的因素的生成。

让我们简单考察一下物理学理论向化学领域扩展的具体情形。

热力学定律的发现和热力学理论的建立，是理论的深度发展。热力学理论建立后，一些化学家就试图将热力学的研究成果推广、应用于化学研究领域。最先进行这种尝试的是德国化学家霍斯特曼（A·F·Horstmann），而作出重大贡献的是美国物理学家吉布斯。吉布斯指出熵与能量、温度、压力和

体积一样，是用来处理热力学系统的基本概念之一，并将 dv 、 dw 、 ds 三个方程结合起来，统一了第一、二定律，最后得出了 $A = U - TS$ ，由于赫姆霍兹独立地提出了这个状态函数，后来被称为赫姆霍兹自由能。吉布斯还导出了另一个状态函数：

$G = (H - TS) = U + PV - TS$ ，后来被称为吉布斯自由能。吉布斯还从讨论单一的化学物质（单组分）体系发展到讨论多组分复相体系，引入了化学势概念，于是将原有的基本方程修改为：

$$dG = -SdT + VdP + \sum_i \mu_i dm_i$$

若体系中有 a 相，则为

$$dG = -SdT + VdP + \sum_a \sum_i \mu_{ai} dm_{ai}$$

在恒温恒压下这类体系的平衡条件从 $dG = 0$ 变为

$$\sum_a \sum_i \mu_{ai} dm_{ai} = 0$$

考虑到所有相关的各化学组分，导出一个简单公式：

$$\sum_j a_j \mu_j = 0$$

这个公式极大地扩展了热力学所适用的范围。

直到 19 世纪末，热力学还只适用于理想体系，或者将一些实际体系近似地作为理想体系来处理，对于多数实际体系来说，这样处理的结果偏差较大，必须作出各种修正。20 世纪初，美国物理化学家路易斯引入逸度和活度概念，使热力学适用于处理实际体系。

上述情况说明什么呢？上述情况说明，将热力学定律和理论应用于化学领域的过程中，也就是物理学理论向化学领域的渗透的过程中，结合了化学研究的特定内容，使原来的公式发生了变形，并抽提出了新的概念，如化学势、逸度、活度等等，这样一步步地扩大了热力学的适用范围，一步步地与化学问题密切结合起来，一步步地具有了化学热力学的理论形态。这个过程就表现为热力学理论的广度发展过程，也就是化学热力学理论的形成过程。

仅以 $\sum_j a_j \mu_j = 0$ 这个式子为例来说，其中化学势 μ_j ，是多组分和组成可变体系所特有的概念，是通过对实际多组分体系进行分析、研究而抽象出来的，不是从热力学定律导出的；同时，这个式子的得出，也是与化学反应的特点相结合的产物。至于说逸度和活度概念，也不是从热力学公式直接导出的，而是经过路易斯对热力学量的本质进行深入分析而提出来的。所有这些都说明，热力学理论的广度发展中，增加了新的概念、新的思想和新的内容。

量子力学理论的建立，是物理学理论深度发展的结果；物理学理论的深度发展，建立了新的理论，奠定了新的理论基础，开拓了继续前进的道路。量子力学的形式体系之一，是以薛定谔方程为基础而建立的波动力学体系。这个理论体系一经建立，就引起了许多科学家的注意。海特勒和伦敦首先将其应用于化学领域，处理氢分子，研究氢分子中的化学键，奠定了价键理论的基础。量子力学推广应用于化学领域，面对的化学体系都是比较复杂的体

系，为了能够用量子力学研究这类复杂的分子体系，量子化学家们想出了各种方法。例如，为了描述处于复杂的相互作用中的电子的运动，只好将其中一个电子暂时从普遍的相互作用中隔离出来，描述它的运动，接着再描述另一个电子的运动，然后通过迭代过程，把一个个电子联系起来。这种方法最初由哈钦（hartee）提出，后经福克（Fock）改进，被称为哈钦——福克方程。休克尔在研究共轭烯烃和芳香性化合物时，对这两类化合物中的全部电子进行了分析，发现可以将它们分成两组（即 σ 电子组和 π 电子组）分别进行处理；在进行处理时，两个电子组之间的相互影响与每组内电子之间相互作用相比较，前者是次要的，可以忽略不计。进一步研究还发现，决定共轭烯烃和芳香性化合物性质的，主要是 π 电子。这样，就可以将这两类化合物中电子运动规律的研究，简化为探索 π 电子在核与 π 键所形成的分子骨架中的运动规律。在此基础上，经过进一步简化和省略，使得量子力学理论可适用于处理共轭烯烃和芳香性化合物。柯尔松利用休克尔的方法计算了很多芳香性化合物的 π 键键级，在键级和键间距中作了一个极简单的一次式关系的假定，求得的键长和用 X 射线衍射实验求得的键长很接近。这个事实说明，休克尔和柯尔松将量子力学理论用来处理复杂化合物的过程中，经过了分析、简化、省略和补充假定，才使得量子力学理论比较适用于这两类化合物。经过分析、简化、省略和补充假定，量子力学理论改变了形式，成为能够应用于处理化学对象的形式。理论形式的改变具体体现在方程形式的改变上，应用薛定谔方程处理各种分子，得出了一系列具体方程，如哈钦——福克方程，休克尔方程等。在休克尔之后，又提出了许多不同等级的半经验计算方法，以及从头计算法。到 70 年代，应用量子力学理论和电子计算机，已经能够对分子的稳定构型、结构参数、光谱数值、键解离能、分子内旋转势垒、反应热、聚合能、反应活化能、化学反应速率常数等做出相当可信的非经验计算了。尽管如此，量子化学理论的发展仍然与化学经验事实有着密切的联系。正如福井谦一说的：“对经验化学的发展起推进作用的量子力学的另一个侧面就不能不是沿着上述经验化学的方法论的路子去进行了，也就是说，要通过找出作为类推的基本概念而起作用的新的有效的理论概念以及它所驱使的量子力学的理论语言来实现……实验化学的进步实际上是由于出现了要求产生新的理论概念的经验事实所致。”

1952 年，福井谦一发现，芳香烃受亲电试剂进攻时易起取代反应的位置乃是分子中最高占据轨道上电子密度分布亦即该轨道的伸展程度最大的位置，基于这个发现，他强调了特定轨道的作用，这种特定轨道被称为“前线轨道”，并以此为基础，建立了前线轨道理论。从这个理论的建立可以看出，一方面与量子力学的推广、应用相联系，另一方面也与一些概念的提出和确立分不开。首先是电子密度概念，它具有与实验紧密联系的性质，它不仅为实验化学家所熟悉，而且又是理解分子结构和反应性等所不可缺少的概念；而分子中电子密度的分布则是由量子力学的波函数导出来的，电子密度和电子密度分布概念，体现了化学实验与量子力学理论的密切联系。其次，前线轨道、最高占据轨道、最低的空轨道等概念的提出，也是建立前线轨道理论所不可缺少的。

这些事实说明，深度发展和广度发展都是发展。理论的深度发展，是理

论发展中的质变，即突破或革命。突破或革命的结果，使理论发展到一个新的水平，跃上一个新台阶。理论的广度发展虽然是新理论的推广和应用，但是也包含着新内容的生成。总起来说，从理论的深度发展和广度发展的关系来分析，应当承认化学理论的基础，在许多重要方面是物理学发展的结果，不承认物理学理论对化学的基础性作用是不符合事实的；同时也应当承认，物理学理论向化学领域的扩展，经过与化学事实的结合，经过创造性研究，物理学理论已经改变了原来的形态，具有了化学理论的形态，可以说已经为化学吸收、消化和改造了，成了化学的理论，或者称为物理化学理论，或者称为化学物理学理论。因此，不承认化学有自己的理论，或者认为化学只有经验事实而没有理论，甚至认为化学已成为物理学的一个分支，都是不符合事实的。

3. 方法论上的启示

对理论的深度发展和广度发展的分析，具有重要的方法论意义。

首先，科学理论总是发展的，它不会永远停留在一个水平上。这就是说，科学理论总是要向深的方向发展，科学理论的深度发展是必然的、不可避免的。科学理论深度发展的结果，是新思想的产生，新概念的提出，新规律的发现，一句话，是新理论的建立。新理论一旦建立，尤其是科学中一些具有基础性的理论一旦建立，就具有很大的潜力，科学家们很自然地要理解、消化新理论，并试图用来解释现象和事实，解决科学面临的种种问题。这就是说，新理论的广度发展从新理论建立时就开始了。因此，理论的广度发展也是必然的、不可避免的。这就给人以启示，作为一位科学家，当然包括化学家，应当关注不同领域中的发展趋势和最新理论成果，应当不断学习新的科学思想、新的理论和新的方法；同时，还应当善于应用这些成果思考和研究本研究领域中的问题。换句话说，作为一位科学家不仅应当善于推动理论向深度发展，而且应当善于推动理论向广度发展。化学发展的历史业已表明，一些化学家或物理学家，在热力学建立以后，就运用热力学理论和方法研究化学问题，开创了化学热力学研究的新领域。当量子力学建立后，海特勒和伦敦应用量子力学理论和方法研究氢分子的化学键，由此开辟了量子化学研究的新领域，促使量子化学理论不断发展和完善。应当强调指出，从已经提出的概念、已经发现的规律和已经形成的理论中，看出解决某个领域中问题的可能性，并明确地提出这种可能性，这本身就是一种创造，就是对科学的一种贡献。

现代科学正在迅猛发展中，在现代科学中新的思想、新的概念、新的理论层出不穷。不久前，兴起了“三论热”，科学家们饶有兴趣地讨论系统论、控制论、信息论，现在又在讨论耗散结构理论、协同学、混沌理论、超循环论等。许多科学家已经提出了这些理论在不同领域广泛应用的可能性问题，并正在将这些理论广泛应用于化学、生物学、地学以及工程技术等研究领域。应当说，上述这些理论的建立，具有深度发展的性质，或者说是理论深度发展的结果。就以耗散结构理论来说，它是在经典热力学理论和统计力学理论的基础上发展起来的，从经典热力学和统计力学理论到耗散结构理论，是一种突破性进展，是理论的深度发展。依据理论的深度发展和广度发展的规律，化学家们应当关注当代科学理论的进展，充分认识当代科学理论的基础性和启发性，并进一步思考和研究化学问题。我们已经看到，有些学者已经在用

控制论讨论化学问题了。可以期待，随着当代新理论的应用，化学理论将会有更大的进展。

其次，理论的广度发展实质上是具有普遍性的原理与某一特殊研究领域的实际相结合的过程，化学理论相对于物理学理论具有广度发展的性质，化学理论的发展在许多方面（不是一切方面，不是全部）是物理学理论（如热力学理论、量子力学理论、统计力学理论等）与化学研究的实际相结合的过程。结合不是简单捏合，而是有机的“溶合”，溶合中产生新内容，因此，结合是一种创造，结合过程是一种创造性研究的过程。

将物理学理论或其他基础性理论应用于化学研究，在方法论上需要注意两个问题。

第一个问题是应用的根据。一种新理论特别是具有基础性、普遍性或综合性的理论问世以后，最大限度地发挥它的理论潜力，将其加以推广和应用，这是促进化学及其他科学进步的一个重要因素，如果不这样做，或由于受片面分工的限制，囿于一个狭窄的专业范围，对其他领域的理论成就不闻不问，对化学的发展是不利的。引用其他领域（包括物理学中）的理论研究化学问题，首先需要试探，在试探中决定取舍，这是大多数理论化学家实际走过的、现在正在走着的路。在历史上，将一种理论推广应用到其他领域，往往是自发的、不自觉的。例如，17、18世纪，在牛顿力学建立以后，化学及其他科学，几乎都试图用力学原理解释各自领域中的现象，实际上是力学理论向化学和其他科学中的扩张。从历史的观点看问题，在当时这是不可避免的，而且应当肯定其积极作用；但是，从发展的观点看问题，到了19世纪，这种推广应用的消极作用已经表现出来了，由于人们在用力学理论解释化学及其他现象的时候，是不自觉的，在这种推广应用中形成了一种习惯，形成了一种传统，致使它的消极作用显示出来以后，许多人并没有意识到，由此增加了许多多余的阻碍，在一定程度上延缓了科学的发展。在理论的广度发展中，如果化学家们对某种理论能否应用于化学、在什么条件下能够应用于化学等问题，认真加以思考和研究，定会有助于减少盲目性、增加自觉性。这样的问题已经不是纯粹的化学问题，而是一个化学方法论问题了。这样的问题，哲学家应当认真思考和研究，化学家也应当认真思考和研究。有关化学方法论问题，不能完全交给哲学家。爱因斯坦曾经说过，经验迫使物理学家们去寻求更新、更可靠的基础的时候，“物理学家就不可以简单地放弃对理论基础作批判性的思考，而听任哲学家去做；因为他自己最晓得，也最确切地感觉到鞋子究竟是在哪里夹脚的。在寻求新的基础时，他必须在自己的思想上尽力弄清楚他所用的概念究竟有多少根据，有多大的必要性”。爱因斯坦在这里对物理学家和物理学说的话，对化学家和化学是同样有效的。

第二个问题是化学的特点。将一种理论应用于化学研究领域，是将该理论与化学研究的实际相结合。结合就需要从化学研究的实际出发，不深切地了解化学发展的实际，不研究它的特点，也就不能真正结合。应当说，化学家最了解化学的实际，在这方面不会有什么困难和障碍。

参见金松寿：《控制论化学》，浙江教育出版社，1987年版，另见金松寿：《催化设计中的控制论方法》，化学通报，8，52（1985）；“化学与控制论”，载邓从豪主编《现代化学前沿和问题》，山东大学出版社，1987年版，第411—434页。

《爱因斯坦文集》，许良英等译编，商务印书馆，1983年版，第1卷，第341页。

最后，从理论的深度发展和广度发展的关系上看，化学理论在许多方面是在物理学和化学的边缘地带发展起来的，它已经形成为化学中的一个专门领域，人们通常将其称为理论化学，理论化学作为一门学科也被称为边缘性学科。其实，现代理论化学不仅与物理学发生了密切联系，它还与生物学、天文学、地球科学、数学、电子计算机科学以及激光科学技术等，发生了密切联系，形成了各种形式的交叉学科。

理论化学的重要特点之一就是具有交叉性质，这就决定了应当怎样研究它、发展它。既然理论化学是一门带有交叉性质的学科，自然就不能脱离不同学科的相互渗透、相互作用，理论化学研究就应当不断地汲取来自其他学科思想和理论，充实自身的内容。

在历史上，化学被视为一门实验科学。所谓实验科学，其主要意思在于强调化学研究的主要方法是化学实验，通过实验发现化学现象，进而对化学现象提出理论解释。直到现在，许多主要从事化学实验工作的化学家仍然是这样做工作的。尽管现代化学实验研究的领域扩大了，研究手段改善了，测试数据多了，理论解释也深化了，但是，从实质上看，实验化学家的基本工作方法没有改变。

现在，化学中分化出来一门理论化学，主要从事理论化学研究的化学家的主要工作，是建立模型，进行计算，探讨建立模型的方法和计算方法，他们往往不做实验，只是利用别人的实验结果。这样，在化学家中，除了按研究对象可分为不同专业（如主要从事无机化学研究或有机化学研究，高分子研究）的研究人员以外，还可分成实验化学家和理论化学家两部分人，甚至可以说形成了两个学派，即实验学派和理论学派。在物理学界，早有实验学派和理论学派之分，而在化学界，在一个较长时期中，虽然实际上形成和存在着这两个学派，但是人们没有明确地承认或认定这两个学派的存在。即使在理论化学研究中，也存在不同的风格，不同的流派，从而形成了不同的理论形态。就以化学键理论来说，研究的角度不同，处理方法不同，表达形式也不同，形成了价键理论和分子轨道理论，此外还有配位场理论等。

上述种种，提出了一个问题：在当代科学的发展在继续分化、深化的同时也出现了综合和整体化趋势的情况下，应当怎样对待和处理化学界内部以及化学界与其他科学界之间的关系，才有利于化学及其他科学的发展？

从现状看，不仅在化学界与其他科学界之间存在着隔行如隔山的状况，即使在化学界内部，特别是在理论化学家和实验化学家之间，也存在着隔行如隔山的状况，有时甚至存在相互之间轻视对方工作的情况。这就产生了一种矛盾，即主客观之间的矛盾：在客观上，科学的发展出现了相互渗透、相互交叉、整体化的趋势，而在主观上，人们的知识结构和研究的领域越来越专门化。众所周知，依据唯物主义观点，应当让主观去适应客观，不断解决主客观的矛盾才有利于科学的发展。可是，问题还有另外一个方面，科学发展到现在，一个人要熟悉一、两门科学已属不易，要通晓各门科学是不可能的。这又是一个矛盾。

出路何在？看来出路在于交流与合作。在化学界内部，理论化学家和实验化学家应当交流与合作。在这方面已有先例可作示范。有机化学家伍德沃德以有机合成见长，他与年青的理论化学家霍夫曼合作，发现和确立了分子轨道对称性守恒原理，他们的合作在学术界被传为佳话。在化学界与其他科学界之间也可以进行合作或进行学术交流，这种合作或交流对化学和其他科

学的发展也很有益处。有的地方和单位，将不同学科的人组织在一起，定期或不定期地进行学术交流，开展学术讨论，找到共同点时就进行合作研究。事实证明，这样做对发展科学大有裨益。交流与合作，首先需要有交流、合作的强烈愿望；其次还需要学习，搞化学的人要学习一些数理或别的理论，搞数理的要懂一些化学，互相学习的越多，共同语言也就越多，交流与合作越有成效。人们只要留心观察就不难发现，那些有交流与合作的强烈愿望、并经常进行交流或合作的人，他们的学术思想往往是很活跃的。就国内条件说，我们有许多综合性大学，学科较齐全，在一个学校内就有交流与合作的良好条件，问题是怎样利用这种条件。

三、化学理论的结构和功能

1. 化学理论的结构

从逻辑观点来看，化学理论是由化学概念、定律、原理、公式、符号等通过推理而构成的合乎逻辑的知识体系。这里所说的化学概念、化学定律、化学原理、化学符号和公式等等，是构成化学理论的基本要素。

化学概念是化学理论的细胞，没有化学概念不可能建立化学理论；化学概念也不能脱离化学理论而孤立地存在，化学概念的内涵与化学理论的内容密切地联系着。例如，“化学结构”概念是化学结构理论的基本要素，没有“化学结构”这个概念，化学结构理论无从建立，“化学结构”概念的含义不明确，化学结构的科学理论也不可能确切地建立起来。反过来说，要深入理解化学结构概念的含义，必须理解化学结构理论的内容和实质，而且与经典化学结构理论相联系的化学结构概念和与现代化学结构理论相联系的化学结构概念，其含义不是完全等同的，从经典化学结构理论发展到现代化学结构理论，对化学结构概念的含义的认识深化了，发展了。

化学原理和定律是关于化学所研究的对象的性质和关系的判断，如前所述，它们通常用陈述语句来表达。众所周知，化学理论如同其他科学理论一样，它的基础归根到底是实践，通过实践认识客观现实的规律性，因此，化学理论是对化学所研究的对象及其规律的反映。从这点来说，分子、原子等等，或者说化学结构和化学反应等等构成化学理论的客观内容。然而，客观现实的东西不能直接进入理论体系，它们只能以反映的形式进入理论体系。原理、定律等就是客观的关系和客观的规律的反映形式。这种反映形式，其内容是客观的，形式本身是主观的，它是一种思维形式，作为一种判断是一种逻辑形式。

符号是人们共同约定用来指称一定对象的标志物，符号的意义是对客体的反映，化学符号的意义是对化学客体的反映，因此，化学符号也是一种认识工具，是化学理论中不可缺少的结构要素。公式是原理、定律的数学表达，它与定律、原理一起构成化学理论。

上述种种都是构成化学理论的基本要素，然而化学理论又不是这些基本要素的机械的总和，而是由这些基本要素形成的具有一定逻辑结构的整体，是由这些基本要素构成的前后相继、首尾一贯、具有内在联系的体系。化学理论要有明确的概念，正确的陈述，合乎逻辑的推理和证明。这就是说，化学理论是有一定结构的知识体系。

化学理论的结构，可以分出内核和外壳两部分。化学理论的内核，一般说来系指构成化学理论的基本概念和定律的总和，它们是化学理论的核心内容；外壳则是构成内核的内容的应用，或者是在基本概念和定律基础上提出的进一步假定或论断，有时，这种假定或论断又是为了说明内核的，或者是为了内核得到实际应用而提出来的。

以道尔顿的化学原子论来说，构成其理论内核的是原子概念和原子论的基本要点，如什么是原子，什么是简单原子和复杂原子，它们之间的关系，原子的最基本特征是原子量，原子与化合物的关系，原子相互结合形成化合现象等等。构成其理论外壳的是什么呢？例如，道尔顿为了说明简单原子的化合现象，更重要的是为了测定原子的原子量，他提出了原子相互化合的最

简原则，这就是前面曾经提到过的 1 原子 A 和 1 原子 B 相化合，生成二元化合物 AB，1 原子 A 和 2 原子 B 相化合，生成化合物 AB₂，等等。他提出的最简原则，实际上是一种假定，而这些假定又是为了进一步测定原子量，为了具体说明原子论的内容的。

化学理论的外壳，经过实验检验，如果被证明不正确或部分不正确，则将被否定或部分被否定、被修正。构成理论外壳的内容的被否定或修正，并不会立即波及理论的内核，相反，在一定范围内，理论的外壳对内核起着保护作用。如果危及理论的内核，首先在理论外壳中作出反应，或者提出新的假定以消除危及内核的内容，或者修正外壳的有关内容，以保持内核的稳定性。相对于理论的外壳来说，内核具有相对稳定性。同时，当处于外壳的内容经过实验检验得出了肯定结果时，还可以被吸收到内核中去，扩大内核、发展内核。当内核发生变化时，如原子论中认为原子是不可破的、不变化的，同一种元素的原子的质量完全相同等内容，被否定了以后，就意味着理论本身发生了变革。

把理论区分为内核和外壳，具有方法论意义。它有助于人们对化学理论进行分析，认识哪些内容是本质的东西，哪些内容是派生的东西。在理论外壳上的发展固然对理论的发展有意义，在理论内核上的发展对理论的发展更具有意义。理论化学家应当注意研究化学理论的内核，这不仅有助于认识理论的适用范围，而且有助于突破理论的限度。

理论的适用范围也就是理论的限度。从理论原则上说，任何一种科学定律和理论都有其可应用的界限，这就是说，有它的限度。例如，波义耳定律等气体定律，严格地说适用于理想气体，阿伦尼乌斯电离理论实际上只适用于弱电解质溶液，如此等等。

化学理论是有限度的，在没有发现它的限度以前，外推、扩大是不可避免的。在波义耳确定气体定律时认为它适用于一切气体，阿伦尼乌斯建立电离理论时认为适用于电解质溶液，如此等等。外推或扩大使理论包含了不确实性的因素，因此化学理论的确实性也是相对的。对理论限度的外推或扩大，必然引起矛盾，人们在认识过程中逐步发现矛盾，才能逐步认识理论的真正限度，这时人们的认识突破了理论的限度。反过来说，只有当人们的认识超出了理论的限度，才能认识这个限度，才能明确认识理论可应用的界限。只是在建立了离子化物（离子水化物、离子溶剂化物）概念以后，人们才认识到阿伦尼乌斯电离理论只适用于弱电解质溶液，不适用于强电解质溶液，从而确定了它的限度。

超出或突破了原有理论的限度，是因为建立了新的理论。突破了阿伦尼乌斯电离理论的限度是因为建立了强电解质理论。如果不局限于化学理论，还可以举出很多这样的事实。例如，突破了经典力学理论的限度，是因为建立了相对论和量子力学理论，突破了经典热力学或称平衡态热力学理论的限度，是因为建立了耗散结构理论，如此等等。

突破了旧理论的限度建立了新的理论，新旧理论之间是继承、又是突破。新理论或者包含了旧理论，或者与旧理论互补。对于前者，新理论能够说明旧理论能够说明的问题，同时还能说明旧理论不能说明的问题并能预言新的现象；对于后者，新理论说明了旧理论不能说明的问题并能预见新的现象。无论哪种情况，新理论的建立对于旧理论而言都是一种突破；同样，新理论都没有推翻或否定旧理论中已为实验证明了的东西，只是明确划定了它的适

用范围，也就是确定了它的限度。

2. 归纳体系和演绎体系

化学理论是一种知识体系，它有一定逻辑形式。化学理论作为一种知识体系，需要通过推理将各种要素联系成一个整体。一般地说，人们的认识，从特殊到一般，又从一般到特殊。反映这种认识次序的理论形式，表现为归纳体系和演绎体系。

归纳体系，一般地说是从经验事实出发，经过分析、比较等各种方法，抽提出概念或揭示出规律，然后进一步做出理论解释。由特殊（经验事实）上升到一般（理论），是以归纳推理的形式建立的理论体系，这就是归纳体系，或者说归纳式的体系。经典化学结构理论、门捷列夫周期性理论，都可以看成是归纳理论体系。经典化学结构理论体系，首先是基于大量的有机化合物的经验资料，提出类型式，进一步提出了结合定律，提出并确立化学结构概念，对化学结构和化学性质的关系以及分子中各种原子之间的关系进行解释。整个化学结构理论就是这样建立起来的，化学结构理论的体系就是这样构成的。门捷列夫周期性理论，首先也是基于化学元素及其性质资料，通过将元素组进行比较、排列，发现了周期律，形成了周期性概念，进而对周期性进行解释、说明、预测。周期性理论体系表现为从特殊到一般。

演绎体系与归纳体系相反，一般地说，演绎体系是由概念、被认为对概念是有效的的基本定律以及通过逻辑推理得到的结论这三者构成的。诚然，结论必须同各个单独的经验事实相符合。化学热力学理论和量子化学理论都是按演绎形式构成的理论体系。化学热力学理论的演绎体系可以认为是这样构成的：它的逻辑演绎的出发点是热力学的基本概念和基本定律以及由热力学基本定律导出的基本公式；由此出发，通过公式的推导和逻辑推演，分别对热化学、相平衡、化学平衡演绎出一些特殊的规律，再将这些特殊性规律应用于各种具体体系和过程，演绎出个别性结论，解释个别性的化学经验事实，一环扣一环，展现出内容丰富的化学热力学的理论体系。量子化学理论体系，以量子力学中的波动力学方程为出发点，首先向最简单的化学体系氢分子推广，进而又向比较复杂的分子体系推广，同时引进补充假定，得出各种量子化学的近似方法以及抽象程度不同的各个等级的近似理论，从总体上看，量子化学理论也是一种演绎体系。

化学热力学理论和量子化学理论的演绎体系，有许多共同点。它们不是从经验事实出发，而是从已经比较成熟的理论出发，也就是从一般出发；在演绎中，先是将已有的物理学理论和定律应用来解释或处理个别的经验事实，如热力学理论扩展到化学领域的首次尝试，是霍斯特曼将热力学方程（克拉佩隆方程）与氯化铵热分解化学反应平衡联系起来，量子力学理论扩展到化学领域的首次尝试，是海特勒、伦敦用薛定谔方程研究氢分子的化学键，继之扩大应用范围，并提出补充假定或新的概念，推导出新的关系式，得出具有特殊性质的结果。因此，化学理论的演绎体系的形式，是从一般出发，经过个别，达到特殊。作为演绎出发点的是理论，这种演绎体系可以称为理论演绎体系，它与假说演绎体系具有类似之处，都是从一般性原理出发；与假说演绎体系又有不同，理论演绎体系中的理论是在其他领域中，主要是在物理学中已得到实验检验过的，而假说演绎体系中的假说或原理，有的是尚待证明的，有的虽然有一定的经验事实为基础，但它本身在该体系中是不能

证明的。物理学的演绎体系多表现为假说演绎体系，而化学中的演绎体系多表现为理论演绎体系。

3. 化学理论的功能

化学理论在化学认识中有重大意义，它具有解释和预见的功能。解释是对已有事实作出的说明，预见是对未知事实的提示，解释说明过去和现在，预见指向未来。从逻辑学来看，无论解释还是预见，都是演绎，都是从理论到事实的认识过程。

化学理论的这两种功能是与化学理论的本性密切联系的。化学家建立化学理论，首先是为了解释化学事实，其次是为了指导以后的认识，预见新的事实。如果化学理论不具有这种功能也就失去了理论的意义。

化学理论的解释功能和预见功能有两个显著特点：

第一，解释和预见在一些化学理论建立过程中是相互联系、相互渗透的。以门捷列夫发现周期律为例，首先为了解释元素之间的关系才去研究元素及其性质，并对已知元素的资料进行比较和分析，元素周期律的发现又是和预言新元素分不开的，如果不留出空位（未发现的元素），门捷列夫就难以将已有元素排列有序，完成周期律的发现。认识这个特点具有方法论意义，它启发人们，在从事化学理论研究的时候，当然首先着眼于解释已知事实，但同时要与预见相结合，这是一种重要方法。正如这里说的门捷列夫的发现所显示的，他在研究元素之间的关系时，试图将已有的化学元素的资料系统化，这实质上是力图用统一的原理（原子量和化学性质的关系）解释化学元素之间的关系，在此过程中也提出了预见，如修改一些元素的原子量，留出一些空位，这正是发现元素周期律、组成元素周期系的重要方法和重要条件之一。

第二，解释和预见功能在一些化学理论建立过程中似乎是从分化到综合发展的。有些化学理论在它建立之初或建立过程中，既表现了解释功能又表现出了预见功能，门捷列夫发现周期律、建立周期性理论是这样，道尔顿建立原子论也是这样（既解释了已知的化学经验定律又预言了倍比定律），可是有些化学理论在建立之初，主要表现出解释功能，没有表现出预见功能，至少预见功能表现得不明显；随着理论的发展和日益趋向成熟，预见功能也随之产生和增大，从而使理论具备了解释和预见的综合能力。化学热力学建立过程中，主要表现为解释。当化学热力学理论基本建立，一些基本关系式确立以后，具有了明显的预见能力，依据判别式可以判断一个化学反应能否自发发生以及进行的限度。量子化学理论在初创时期可以说只有解释能力，对氢分子处理结果仅仅说明了为什么在两个氢原子之间可以形成化学键，面对复杂的分子体系，甚至连解释都解释不太清楚，更不必说预见了。在一个时期，一些实验化学家常常以此为据，责难理论化学家的理论计算，认为算了半天与实验事实符合得不好，说明计算没有什么意义，或者提出“请你算一算某某分子的结构该是什么样子，该如何合成”，这些问题对理论化学家来说是免为其难的。可是量子化学的发展表明，量子化学理论的预见和指导能力随着理论的发展而不断增强，正如我们前面已经指出过的，在当代，量子化学加电子计算机，已经能对分子的性质进行计算了，量子化学理论的预见和指导能力越来越明显地显示出来了。认识这一点也具有方法论意义，它启发人们，从理论的功能及其关系方面来思考，理论具有解释能力，也具有预见和指导能力，在预见和指导能力未充分显示的时候，往往是理论发展尚

处于初级阶段，尚不够成熟的时候，不能因暂时不能预见和指导，或预见和指导能力暂时表现不明显而否定它具有这种能力，更不能由此否定理论本身。相反，一种理论具有解释能力，说明它具有一定意义，应当进一步研究和探索，发展理论，只有在进一步研究和探索中，才能对理论本身进行鉴别，它或者需要修改、补充、发展，从而显示出预见和指导能力，或者理论本身是错误的，从而加以否定，另寻他途。

第十章 化学中的符号

化学中的符号，即化学符号，是作为一门科学的化学所不可或缺的一个组成部分，是化学的一种重要工具，它对化学认识的发展，无论是过去、现在和将来，都具有非常重要的意义。

化学家几乎每日每时都在使用化学符号，并已经习以为常。就是这种习以为常的化学符号，不仅是符号学的研究对象，而且也是化学哲学的研究对象。什么是化学符号，它是怎样产生和发展的，它有什么特点和功能，有什么哲学意义，如此等等，都值得进行深入研究，迄今为止，对这些问题研究的还很不够。在这一章中，我们试图对化学符号所涉及的一些重要问题，进行一些探讨和说明。

一、化学符号的历史演变

1. 古代炼金术符号

炼金术是化学的原始形式，炼金术符号是化学符号的原始形式。炼金术符号是一种图形符号。众所周知，语言是一种符号体系，文字也是一种符号体系。就世界各民族文字的发展来看，最早产生的是图形文字。图形文字也叫图画文字，或称象形文字，其特点是以图表形，是以实物记事逐步发展而来的。图形文字所用的图形，好像是一幅图画，但它不是艺术品，而是记事和表示事物的一种形式。例如，用两条波纹曲线表示水，用点堆积而成的点阵表示沙，波纹曲线和点阵，直观地看都是图形，或者说是图画，是最简单的图画，然而它们都不是以艺术品的面目出现的，而仅仅是表示或标记水和沙的记号，因此，它们都是符号。炼金术符号就是从这种图形文字中产生和发展起来的，这里说的水和沙的图形，也就是炼金术使用的符号。

炼金术符号，是炼金术士们为了记述、表示自己的炼金操作和经验而采用的符号。炼金术符号具有个体性和偶然性，尚缺乏通用性和规范性。每个炼金术士所用的符号都不相同，同一个炼金术士对同一事物也可能有不同的符号，炼金术士所用的符号只有他们自己知道是什么意思，最多传授给他们的徒弟，这种符号对别人而言好像是一种密码。

除了图形符号以外，在古希腊遗留下来的炼金术著作中，已开始用希腊字缩写作为炼金术符号；而且，在其后来的发展中，还产生了由基本符号组合成的复合符号。

2. 近代化学符号的产生和发展

随着化学的发展，单纯用语言描述显得太繁琐、太不方便了，古代炼金术符号又不易解读，而且也极不统一，这就要求建立适合于新时期化学的符号体系。

1787年，哈森弗拉兹（J·H·Hassenfratz）和阿德特（P·A·Adet）试图用几何图形加字母的方法建立符号体系，例如，他们用几何图形表示非金属，用几何图形（如圆和三角形）中加词首字母表示金属和化合物等。这套符号，由于构成要素不统一，显得繁复和笨拙。

1808年，道尔顿在建立化学原子论的同时，发表了用原子符号表示的元素表，并分别标出了它们的原子量。其中，氢、氮、碳、氧、磷、硫、汞等用不同的圆形图形表示，铁、锌、铜、铅、银、铂、金用圆内加英文字母表示；复杂原子即化合物，如水、氨、氧化氮、甲烷等，则用简单原子的符号组合在一起的方法来表示。道尔顿认为这些化合物都是二元的，也就是说，水由1个氧原子和1个氢原子构成，氨由1个氮原子和1个氧原子构成，氧化氮（他称为亚硝气）由1个氮原子和1个氧原子构成，甲烷（他叫做油田气）也是由1个碳原子和1个氢原子构成，如此等等。于是，他分别用相应的图形符号表示出来，参见下图：

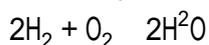
如果我们不去注意组成上的错误，单就他所提出的化学符号表示法来看，道尔顿首先提出了简单原子的符号，然后以简单原子符号为基础，通过组合的方式表示复杂的化合物，这一点与现代化学符号表示方法在基本精神上是一致的。但是，道尔顿提出的简单原子的符号没有统一的规则，有的用圆的图形，有的在圆中加字母，这样，有多少种简单原子，就得设计出多少种图形或图样。

1814年，贝采里乌斯在将化学元素名称拉丁化的基础上，提出采用化学元素拉丁名称的开头字母表示元素，用元素符号的组合表示化合物。这就是说，某种元素名称的开头字母就是该元素的符号，元素符号的组合或加合就构成相应的化合物的符号。为了表示化合物中每种元素的原子数目，在相应的元素符号右上角用阿拉伯数字标出，凡未标出者即为1个原子。后来，李比希和波根道夫(J·C·Poggendorff)建议将上标方法改为下标方法，由此形成了近代化合物符号表示法，此种方法一直沿用至今。贝采里乌斯还用他自己制定的化学元素符号和由化学元素符号组成的化学式，进一步写出了化学反应式。道尔顿曾经用他提出的原子图形符号写出了化学反应，例如，氢和氧化合成水，表示成：



后来，贝采里乌斯依据对水的组成的新认识，用符号写出反应式： $2\text{H} + \text{O} = \text{H}_2\text{O}$

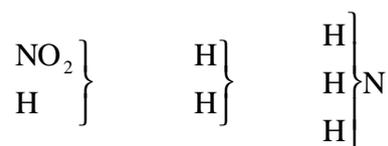
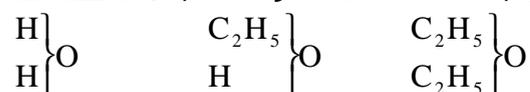
随着化合物的组成由上标法改为下标法，化学反应式的符号表示方法也发生了改变，例如，氢和氧生成水的反应，用化学符号表示成为：



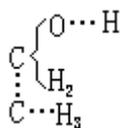
从上述可知，贝采里乌斯不同于前人的主要之点在于，他制订了化学元素符号的统一规则（即用元素的名称的开头字母作为该元素的符号），规定了化合物的符号表示方法，进而用化学元素符号组合成的化合物符号写出了化学反应式。这反映了化学符号发展的基本过程，形成了化学中符号化的三部曲：元素的符号化，化合物（或分子）的符号化，化学反应的符号化。

随着化学的发展，特别是有机化学的发展，化学从研究组成过渡到研究组成之间的相互关系，进而过渡到研究组成之间的结合顺序和相互作用，也就是过渡到研究化学结构。关系和结构都涉及分子中原子之间的相互结合。于是，如何用符号表示这种结合，就成了化学符号研究中面临的新课题。

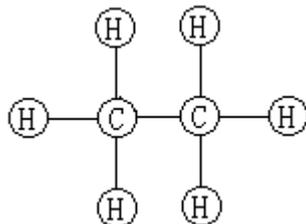
在类型论中，用“}”号表示联结，例如：



库帕进而提出，用“...”表示化学结合，并与“{”或“}”符号结合使用，例如：布朗(A·C·Brown)又提出用“—”符号表示原子之间的结合，例如：



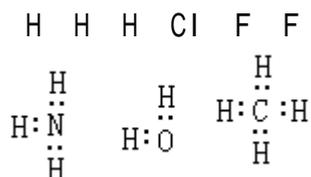
后来，元素符号与“—”符号结合，形成了分子结构的符号，“—”符号奠定了价键符号的基础，直到现在仍然被广泛使用着。



3. 现代化学符号

早在 19 世纪下半期，在阿伦尼乌斯建立了电离理论以后，化学家们对酸碱的认识深入了一步，用离子理论解释酸和碱。于是，在氢或氢氧组成的基团右上角标上“+”或“-”（正号和负号）作为正、负离子的符号。

1923 年，路易斯在《价以及原子和分子的结构》中改进了对电子对键的表示方法，他提出用“ $\cdot\cdot$ ”表示化合物中原子之间的化学键，“ $\cdot\cdot$ ”相当于化学结构式中的短线“—”。例如：



在这些表达式中，每一个“ $\cdot\cdot$ ”符号都相当于原先的“—”，它代表一对电子，表示由一对电子形成的化学键。“ $\cdot\cdot$ ”符号较之“—”符号，更形象、更直观地表示出了化学键的物质载体，同时“ $\cdot\cdot$ ”在一定程度上表示出了“—”符号所代表的含义，表示出了“—”符号的实质。在这个意义上说，从“—”到“ $\cdot\cdot$ ”，标志着科学认识的进步和深化，同时，“ $\cdot\cdot$ ”可以说是符号的符号，即“—”符号的符号。

就在同一年，即 1923 年，西奇维克（N·V·Sidgwick）想到，既然共享电子对可以构成原子间的化学键，那么由一个原子提供一对电子与另一原子共享，也应当能够形成化学键，他将这种键叫做“配键”，并用箭头“ \rightarrow ”表示。

在量子化学理论中，也有一套符号，除了数学符号以外，由于历史的原因，物理学家们把角量子数 $L=0, 1, 2, 3, 4$ 的电子分别叫做 s, p, d, f, g 电子，相应的原子轨道也分别称为 s 轨道, p 轨道, d 轨道, f 轨道等，并由核算起，分别标上阿拉伯数字，表示成 1s, 2s, 3s, ..., 2p, 3p, 4p... 等轨道，这些都是量子化学中不可缺少的符号。

现代化学一方面继承了近代化学的符号体系，另一方面又随着化学的发展增加了新的符号。尽管如此，仍然不能完全满足化学的需要，仍然有一些问题，现有的符号不能满意地表示出来。

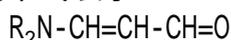
迄今为止，化学中的符号表示法基本上是从贝采里乌斯那里继承下来的。在贝采里乌斯时代，化学家们研究的分子比较简单，或它本身是复杂的

但人们认为是简单的。化学家们采用的符号表示法基本上可以表达分子的组成、结构、性质及化学反应。可是，由于化学分析技术和方法的发展，特别是现代仪器分析的发展和晶体结构分析方法的发展，对许多固态无机化合物的结构和性质获得了新认识，原有的符号表示方法就显得不够用了。例如，像 NaCl，CdS 或 CuI 等分子式既不能说明它们的结构特征，也不能告诉人们是否还存在其他变体。类似的化学符号体系（分子式），就连实在固体中的配位关系都没有表示出来。正是基于此种情况，不少人曾经试图将贝采里乌斯的符号表示法经过改进应用于固体化学领域，例如，尼格列（Niggli）最先将 SiO_2 写成 $\text{SiO}_{4/2}$ ，其意思表示 SiO_2 型式中所有 O（超石英除外）每个与 2 个 2Si^{4+} 桥接；NaCl 可写成 $\text{NaCl}_{6/6}$ ，表示每个 Na 为 6 个 Cl 所围绕，每个 Cl 也为 6 个 Na 所围绕。这样的符号表示法称为官能度构型。即使如此，官能度构型也不能表现固体化合物的全部复杂情况，因为固体化合物的真实情况是极其复杂、极其多样的，人们的认识越深入揭示的化合物的真实面貌越令人吃惊，原有的符号表示法越显得贫乏，难怪有的化学家企盼着“何时能有贝采里乌斯式的一代新人崛起”？！

符号表示法在有机化学中同样也遇到了挑战。在有机化学结构理论建立初期，价键结构符号表示法（化学结构式）曾使化学家们感到十分满意。但是，曾几何时，这种符号表示法就发生了困难。例如，凯库勒提出的苯的价键结构式：

键结构式： 它主要满足了碳的四价学说和苯的组成 (C_6H_6) 的要求，但是，

它不能解释进一步的实验事实，如苯分子中六个 C—C 是完全等同的，并不像单双键结构式所表示的那个样子；苯分子很稳定，不像双键表示的烯类化合物那样活泼；它容易发生取代反应，也不像烯类化合物容易发生加成反应。基于这些实验事实，鲍林用共振来解释，现代理论用大 π 键来说明，大 π 键如何用简单符号或符号体系来表示？我们在现代有机化学教科书中看到的是图形表示，而非简单符号表达。与此相联系，在一些存在双键的化合物中，电子对发生转移改变了化合物的性质，例如，劳瑞（T·M·Lowry）在 1923 年首先注意到这种现象，可用下式表示：



转移的结果使 $\text{R}_2\text{N}-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}=\text{O}$ 变成了 $\text{R}_2\text{N}=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}-\text{O}$ ，在这种解释中，伴随着新的弯曲箭头符号；在共振论解释中用共振符号“ \longleftrightarrow ”来表示。弯曲箭头符号，在现代有机化学教科书中仍然可以看到。

在现代量子化学中，除了引入了量子力学符号（大多是数学符号）以外，如何用传统的化学符号表示分子的结构，应当说是个没有解决的问题。只要翻开有关的量子化学教科书就不难发现，传统的元素符号、组成和结构的符号表达式不见了，代之出现的是轨道符号和由轨道符号组成的复杂图形，如氢分子的能量曲线图，电子云分布等密度曲线图，轨道示意图和能级图，等等。

总之，近代化学所留传下来的符号仍然继续被使用着，同时由于现代化学的发展提出了新的要求，化学家们又陆续创造了一些新的化学符号。随着化学的发展，化学符号也将会继续变化和发展。

4. 我国的元素命名和符号的引入

我国古代的化学工艺起源很早，并达到了较高水平，我国的炼丹术产生的也很早，并对阿拉伯乃至欧洲的炼金术产生了影响。但是，近代化学却没有在我国诞生，近代化学所使用的化学符号，也没有在我国创造出来。近代化学知识及其符号，是从西方引入我国的。

直到 19 世纪初，我国还没有什么科学的化学书籍，翻译过来的也似凤毛麟角。1867 年上海江南制造局设立翻译馆，由英国传教士傅兰雅口译，徐寿执笔翻译西方化学书籍。由于西方的拼音文字和我国的方块汉字，在造字原则上有着重大区别，在翻译元素时需要确定命名原则。徐寿确定了以下原则：中文已有名称的仍采用旧名，如金、银、硫等化学元素；中文中没有现成名称，创造新名，其方法是，取西文名中的第一音节，以相同读音的汉字加偏旁构成新名，如元素 Calcium，第一音节发丐音，则取丐，它是金属元素，加偏旁金字，组成钙；音译和意译兼用，如养气（现名为氧气）、轻气（即氢气）等，是依其性质意译的；有机化合物按音译，如苯（Ben-zole）当时译为“偏苏里”，甲苯（Toluene）当时译成“多路阿尼”。此外，还规定了一些词尾或词头的统一译法，如词尾—ne 译成“尼”，—l 译成“里”，词头 me- 译成“迷”等。后来，到 19 世纪后期 20 世纪初期，还有一些学者也从事翻译工作，创造一些元素和化合物的汉字名称。总起来看，在中华人民共和国建立以前，元素命名缺乏统一的原则，致使一些化学名词混乱。中华人民共和国成立后，中国科学院编译局编辑出版了《化学物质命名原则》，“总则”中指出，元素定名用字，以谐声为主，会意次之，但应设法避免同音字；在“元素”篇中规定，元素的名称用一个字表示，在普通情况下为气态者从气，液态者从水，固态者金属元素从金、非金属元素从石。依据这些原则，一些元素名称从国际通用的元素名称第一音节音译，相应的化学符号也从该元素的外文字母，如锂，其第一音节为 Li-，译成锂，符号为 Li；氢、氯、氧等元素，遵循会意原则翻译，氢源于轻，从气，写成氢。在我国，元素符号的引入与元素的定名是同时进行的，元素名称的翻译是引进元素符号的基础，在翻译和定名的同时也就引进了元素符号。

下面，列出一些化学元素符号、《化学鉴原》中的元素名称和现行名称对照表：

化学元素符号	《化学鉴原》中名称	现行名称
Ag	银	银
Al	铝	铝
As	砷	砷
Au	金	金
Ba	钡	钡
Bi	铋	铋
Br	溴	溴
C	炭	碳
Ca	钙	钙
Cd	镉	镉
Ce	铈	铈

Zr

锆

锆

1900年，由杜亚泉主编的自然科学杂志《亚泉杂志》创刊，介绍了十几种化学元素，下面列出其中的8种，见下表：

《亚泉杂志》元素			现在的元素表		
符号	名称	原子量	符号	名称	原子量
Be	铍	9.08	Be	铍	9.013
Ar	氩	39.70	Ar	氩	39.944
Sc	钪	44.01	Sc	钪	44.96
Ge	钼	72.30	Ge	锗	72.60
Prd	镨	143.5	Pr	镨	140.92
Gd	钆	156.1	Gd	钆	157.26
Tu	铥	170.7	Tu	铥	168.94
Yb	镱	173.0	Yb	镱	173.04

这8种元素是实际存在的，其中有6种元素的译名至今沿用，其元素符号也与现在采用的符号相同。

5. 化学符号发展的辩证法

化学符号是从语言符号派生出来的，化学符号的演变和语言的发展相联系。炼金术符号起初与象形文字密切相关，有的炼金术符号本身就是一种图画文字（即象形文字），如用波纹曲线表示水，以形去描摹对象；后来，有的炼金术符号演变为表意符号，符号本身不是直接描摹对象，而是间接地表示某种事物；在古希腊已出现了用希腊文名称缩写而成的符号，接近拼音文字，或者说，炼金术符号与拼音文字建立了联系。所有这些都说明，炼金术符号与文字的发展相适应，从相应的文字中演生出相应的符号。

从化学符号的演变史来看，炼金术符号的基本特征是图形，似象形文字，可以认为属于图形符号范畴；近代早期的化学符号，以几何图形为特征，好像是表意文字，可以认为是表意符号；从贝采里乌斯开始，化学元素符号直接从拼音文字中演生出来，使化学符号字母化；现代化学发现，以字母为基础的符号体系不能满足化学的需要，不得不以各种形式的图形作补充，这好像是向图形符号的复归。但是现代化学中应用的图形，已经不是象形文字阶段那样的图形符号了，它已经摆脱了直接描摹对象的直观性和形象性的形式，而成为高度抽象的图形符号，它们本身既是直观的，又是抽象的，是直观和抽象的统一。

从符号本身来看，起初是单个的符号；继之出现了符号的组合，我们将其称为组合符号；在组合符号的基础上，发展为符号体系。这种从个别符号到个别符号之间的组合，再从组合到体系的发展过程，在化学符号发展史的每一个阶段不断地重演，也就是在不同水平上重复。

二、化学符号的符号学研究

符号学是以符号或记号为研究对象的一门科学，符号学通常要研究符号、符号的构成、符号的功能等等。化学符号的符号学研究，就是从符号学的角度研究化学符号的有关问题，如什么是化学符号，它的基本要素是什么，它是怎样构成的，化学符号有什么特点和功能等。

1. 什么是化学符号

化学符号是一种科学符号，或者说，化学符号作为一种符号系统是科学符号系统中的一个子系统，科学符号又是一般符号中的一种形式。因此，要说明什么是化学符号，应当首先说明什么是符号，什么是科学符号。

什么是符号？符号学家们对此提出了种种解释。一般地说，符号是指代另一种事物的某种事物。符号是某种事物或某物，是物质性的东西；它作用于人们的感观，能够被感知；作为符号的某物是另一种事物的代替者，是标记另一事物的。所以，符号是标记物，是标记其他事物的。

就以城市中的交通标志牌为例来说明。禁止停放自行车的牌子上，可以画一辆自行车和不让停放的标志。直观地看，那是一幅由自行车和不准停放记号构成的图，它是一种现实的物，人眼可以看到它，基于交通法规的有关规定，人们看到它知道这是不准停放自行车的意思。换句话说，依据约定或规定，这种标志意味着不准停放自行车，这种标志牌就代表这样一种事物。

人类生活在符号世界中，人们周围充满着各式各样的符号，人们的生活离不开符号，需要符号。众所周知，人们之间的交往离不开语言和文字，从符号学观点来看，语言是符号系统，文字是标记语言的，是书写的语言，它也是符号系统。人类除物质生活以外还需要精神生活，而精神生活自然离不开语言和文字，同时也离不开各种各样的艺术。艺术，按照苏珊·郎格的见解，它是人类情感符号的创造，也离不开符号，或者说，艺术品本身就是一种符号系统。京剧中的脸谱，美术中的线条、色彩等构成的整体，都意味着什么、蕴含着什么、代表着什么，都具有符号的性质。人类的社会生活中还有各种信号系统，发出和接收信号。信号（Signal），除去信息传递过程中的信号（它只是意义信息的物理载体），在一般符号学中也都可以被看作为符号。例如，古代烽火台升起的狼烟表示有紧急情况，发生了敌人侵犯事件；学校中的铃声指代上课或下课，军队中的军号声，可以表示紧急集合、宿营、冲锋等行动，城市中的红绿灯的变换意指允许通行或禁止通行，火车站的信号旗以不同状态指示火车可以进站、出站或禁止进站、出站，船舰航行中的航标灯指示航路，旗语或灯语也都表示一定的含义，如此等等，所有这些信号都是标记物，意味着什么，或者说与意指相关。人类生活中需要各式各样的记号，离不开记号，自觉或不自觉地使用着记号。记号（Sign）也就是符号，如古人结绳记事，不识字的人划痕、画线或画图表示一定意思，也就是用记号记事，这种记号是一种标记物，是指代另一种事物的事物。记号在一些情况下又被译成指号，手指指向是一种特殊的指号，它表示什么东西在哪里，在这种情况下，指号也就是所指对象的记号。美国哲学家莫里斯（C·W·Morris）在《指号、语言和行为》一书中，以有机体的行为作为出发点讨论了“指号”和“符号”的区别与联系，例如，“一个人可以把他的脉搏解释为他的心脏状态的一个指号，或者把某些感觉解释为他需要食物的

一个指号；这样的一些指号只是信号而已；但是，他因此而说出的话——当这些话作为这样一些信号的替代物的时候——却是符号”。在这里，他同时涉及了符号和信号的区别。应当指出，符号、信号、指号，这三者是有区别的，但是，在一般符号学的意义上，可以不考虑它们之间的区别；在一定意义上，可以将它们看作是同义的，当然，只能在一定意义上是这样。

作为标记物的符号，它是物的标记，有其形式也有其内容，是形式和内容的统一。语言、文字、图形、色标、手指姿势等，都是记号，是符号赖以存在的形式；这些记号之所以成为符号，总要意味着什么，代表着什么，表示着什么，一句话，指代一定的意思、含义，这就是符号的内容。符号的内容，也就是符号的含义，是人为约定的。从这点出发，可以将符号与迹象、征候、症状等区别开来。迹象，如冒烟是着火的迹象，消防人员在瞭望塔上看到某处浓烟升起，怀疑那里可能发生火灾；又如打猎者在深山老林中追寻某种野兽，看到爪印即意味着看到了这种野兽的踪迹。征候是预示某种现象的现象，如燕子低飞、天气闷热，预示着将要下雨，燕子低飞和闷热现象是预示下雨这种现象的征兆，这就是征候。症状是疾病的迹象，如高烧是某种疾病的症状，医生综合各种症状判断病源。迹象、征候、症状等，虽然也是指代另一种事物的某种事物，但是，某种事物和另一种事物之间的关系不是人为约定的，而是一种现象间的因果性关系，是自然的关系。因此，不能与符号划等号。迹象、征候、症状，可以看作是信号，如燕子低飞是将要下雨的信号，发现爪印是野兽走过的信号，发烧是生病的信号，在这种意义上，符号和信号是有区别的。换句话说，人为约定的信号是符号，而自然关系中的信号不是符号。

人为约定性是符号的重要特征，人为约定表明主体——人在符号中的作用。我们所说的符号，都是人能够感知的，人为约定的或规定的。作为符号的标记物，必须能够为人所感知，否则就不能作为符号。人们通过听觉器官或视觉器官或触觉器官，感觉到某种标记物，如语言、文字、图形等，人们不能感知的物，不能作为标记物，也就不能成为符号。例如，通常的文字，识字人可以感知，对这些人来说，文字是符号和符号系统，盲人看不见文字，对盲人来说，通常的文字不能作为符号，而能为他们所感知的是盲文，盲文作为特殊的文字才能成为他们使用的符号。能够被感知，这只是某种物成为符号的必要条件，但不是充分条件。某种物能够代替他物成为符号，除了能够被感知以外，还必预约定或规定它表示什么，没有这种约定或规定，或者虽然作了约定或规定，而有人不知道或不懂得这种约定或规定，对他们而言，都不能成为符号，不起符号的作用。不识字的人，感觉到了字形，不解其意，他就不知道看到的文字说明了什么。一个不懂交通规则的人，面对交通标志，虽然看到了它，但不解其意，交通标志对他就不起符号的作用，不能成为符号。

作为一般性的符号，可以是社会约定的或规定的，也可以是个人约定或规定的，社会约定或规定的符号，可以作为社会交往的工具，个人约定或规定的符号，只能作为个人记事的工具。

符号的形式和内容使符号分成相互依赖和不可分离的两个部分：能指和所指。符号的形式，即标记物，也就是符号本身，如交通标志本身是能指，

符号的内容，如交通标志表示的禁止通行，就是该标志符号的所指。正如符号和符号的含义是人为约定的一样，符号的所指和能指的关系也是人为约定的。能指和所指之间的关系是对等关系，而不是前后相继的关系。在这个意义上，也可以将符号与迹象区别开来。交通标志的所指和能指是规定好了的，交通标志即意味着某种规定，而迹象，如爪印与兽行，先有兽行才留有爪印。

在简略地说明了什么是符号以后，进一步说明什么是科学符号。科学符号可以有两种理解，一种是广义的，包括语言符号和文字符号在内的科学符号，另一种是狭义的，指除语言和文字以外的科学符号，我们是在后一种意义上讨论科学符号的。在这种意义上，可以把科学符号理解为科学概念、科学定律或科学推论的共同标记物，也就是通常所说的表达科学概念、科学定律或科学推论的标志物或代码。

科学概念的语言形式是语词，在语言学中叫做词，是可以独立运用的最小单位。如数学中的正弦、余弦、微分、积分等，是数学中的概念，它们的语言形式是这些可以独立运用的最小单位，所谓能够独立运用，就是能独立成句或能单独回答问题。如问“这是什么三角函数？”答：正弦。能单独成句或能单独回答问题的是词，而正弦这个词又是数学中（三角学）的一个基本概念，正弦这个词是语言或文字符号，它表示为“以一锐角的直角三角形对边和余边之比”，前者作为后者的标记或代表者，这是以语言符号表示或标记事物的情形。当余弦这个概念用 \sin 来代表时， \sin 即成了“正弦”这个概念的标志或代码。同样道理，物理学中的长度、质量、时间、力等概念，直接的语言形式是“长度”、“质量”、“时间”、“力”等这些词，词的思想内容就是概念，而这些概念又可以用相应的记号（或量符）来标志和表达，如用 l 表示长度，用 m 表示质量，用 t 表示时间，用 F 表示力。化学中的氢、氧、氮、碳等，作为语言形式，是词，作为概念，它们表示这些物质的单质，而在化学中又可以用 H 、 O 、 N 、 C 等符号来代表、来标记。这些实例说明了什么呢？这些实例说明，我们所说的（或通常理解的）科学符号，是一些代码，一些记号，通过长期使用逐步规范化而成为科学家共同使用的标记物。用这些标记物可以表示概念，而概念的语言形式是语词，语词也是符号，因此，在上述意义上理解的科学符号，可以说是代替语言符号的符号。

科学符号除了可以标记科学概念以外，还可以标记科学定律、关系、推论等。如数学中的 $=$ ， $>$ ， $<$ ， $+$ ， $-$ ， \times ， \div 等，分别代表等于，大于，小于，不等于，加，减，乘，除等；物理学中， $F=ma$ 表示牛顿第二运动定律， $F=F_1+F_2$ 表示同一直线上二力的加成；化学中 $C=C$ 和 $C-C$ 分别表示碳碳之间的双键结合和单键结合；生物学中的 A 代表腺嘌呤， G 代表鸟嘌呤， C 代表胞嘧啶， T 代表胸腺嘧啶， U 代表尿嘧啶，基于这些符号可以组成三联体密码子，如 GCA ， GAA ， GGC 等。科学推论可以通过语言符号的形式进行，也可以通过科学符号的形式进行，如 $a=b$ ， $b=c$ ， $a=c$ 。数学物理科学中的解题过程，是进行科学推论的过程，这种推论已经符号化了。

通过上面的简略分析可知，通常所说的科学符号，实质上是科学语言的符号，也就是借助于代码、量符、记号等表示语言或文字要表达的内容。它们与科学语言符号的区别在于，科学符号的基本形式不是语词或语句，而是代码、量符、记号或由代码、量符等组成的系统。

化学是科学中的一门基础学科，化学符号是科学符号中的一个类别。化

学符号，正像科学符号一样，是一种标记物，或共同标记物，是表达化学概念、化学关系和化学过程的标记物，它的形式是一些简单的字母符号和标志符号。化学元素符号，是字母符号。H是个字母，在英文中，它代表“Hydrogen”一词，在俄文中，它代表“Водород”一词，在汉语中，它代表“氢”；N是个字母，在英文中，它代表“Nitrogen”一词，在俄文中代表“Азот”一词，在汉语中则代表“氮”这个词。从概念的语言形式上看，同一种元素在不同国家有不同的语言形式，也就是有不同的词，但是，不同国家对于同一种元素却用同一的字母符号来标记。元素符号是化学界（乃至整个科学界）所采用的共同标记物。由此可以看出，化学语言符号和化学符号是不同的，化学语言或文字，各个国家之间可以根本不同，对氢元素，俄文中称为“Водород”，在英文中叫 Hydrogen，而在汉语中则发“q ng”（汉语拼音）音，用氢这个词表示；化学符号，各个国家是通用的，都用 H 来标记。

除了化学元素符号以外，化学中还有许多标志符号，例如一条短线“—”表示原子之间的结合，即化学键，两条短线“=”表示双键，三条短线“≡”表示叁键；箭头“→”代表反应方向，“↑”表示反应中放出气体，“↓”表示反应中有沉淀生成，H...O 表示氢键，如此等等，这些都是标志符号；在化学式中的数字，1、2、3...，也属于标志符号，它们以下标（即标在有关元素符号下方）方式表示分子或化合物中的原子个数。此外，化学中还广泛应用着数学的、物理学的以及其他科学的符号，在此不一一列举。

无论化学符号还是科学符号，都是符号，它们都具有符号所具有的特征，它们都是代替另一物的某物，它们的意义都是人为的，是约定或规定的。但是，应当看到，化学符号与一般符号相比，范围要狭窄的多，限制要严格的多。化学符号基本上指的就是元素符号和标志符号，而符号，作为一般符号学研究的符号，则远远超出了这个范围，如上面所述，不仅包括语言符号，还包括信号、指号等等。化学符号与一般科学符号相比，它仅仅是化学这门科学中的符号，虽然化学中的符号不限于化学所特有的符号，但就其基本内容而言，化学中的符号，或者说化学符号，毕竟有其自身的特点，有其特殊性。

2. 化学符号的构成和分类

化学符号是一种书写符号。作为一种书写符号，必然有其形，有其名，有其义。例如，化学元素符号 H、N、O 等，标志符号 \sim 、 $=$ 、 \equiv 等，各有各的形状，各有各的名称，同时各有各的含义（即规定它们所表示的意思）。化学家们见其形，可以呼其名，并可以解其义，这三者的统一才能使化学符号成为化学符号，才能起到标记和交流的作用。其中，尤以形和义至为重要，形是义的载体，义是形的内容。如果只有形没有义，形变成了纯粹的形，那么，H、N、O、 \sim 等，仅仅是笔划或线条，不代表什么，不表示什么，也就不成其为化学符号；没有形，义失去了载体，义也就成了虚无缥缈的东西了。

一个化学元素符号，如 C 或 H，有形、有名、有义，是形、名、义的统一体。化学元素符号是化学中的基本符号，是化学符号系统中的基本要素。由化学元素符号可以组合成化学复合符号或符号系统。正象由词语组合成语言需要依据一定规则一样，由基本符号组合成复合符号或符号系统，同样也需要依据一定的规则。这种规则是什么呢？在语言学中是语法，而在化学符

不同，例如，“+”号，写在元素符号右上角，表示带正电荷，从而与元素符号一起成为阳离子的标志符号，在反应式中写在反应物和反应物之间，产物和产物之间，表示什么物质与什么物质发生化学反应，生成了什么产物和什么产物，或者在反应式中与热量写在一起，又能表示化学反应中的放热效应。标志符号不能单独使用，只能与元素符号、组成符号等结合起来使用，而元素符号则可以独立应用，元素符号与标志符号相结合，可以演生出形形色色的复合符号，构成组成符号、分子符号、结构符号、构型符号等复杂的化学符号系统。由此看来，依据构成原则对化学符号的分类，可分为元素符号、组成符号等类型，是以前一种分类（分为元素符号和标志符号）为基础的。无论怎样分类，元素符号都是化学中的基本符号，以元素符号为基础，加上标志符号，依据特定的“语法”，形成或组合成化学符号的各种形式，构成整个化学符号系统。

3. 化学符号的特点和功能

化学符号与科学符号和符号有共性，化学符号作为科学符号中的一种形式，它具有科学符号所具有的特征，如约定性和规范性，简单性和国际通用性等。这里所说的约定性和规范性，系指化学符号和科学符号都是约定俗成的，是人为设定的，无论是形和义都是如此；但是，经过实际应用和历史发展，一旦约定下来，就成为化学界和科学界共同遵循和使用的，成了规范。简单性系指科学符号的要素要尽可能简单，否则难以普遍采用；同时，又为国际通用的，这就是国际性。这些都是科学符号所具有的特征。一般符号也是约定俗成的，也具有一定规范性，同时也具有简单性，但是，有些符号可能是一个国家通用的，未必是国际通用的，在这个历史时期是通用的，在另一个历史时期未必是通用的。

化学符号与科学符号和符号相比较，还有其特点。化学符号的特点是与化学元素符号是化学中的基本符号这一点密切联系在一起的。化学元素符号是从元素的拉丁文名称转化而来的，也就是由其首位字母或加上第二个字母而构成的。元素符号与元素的拉丁名称相联系，这一点使它既具有人为性，即人为规定的，又在很大程度上减少了任意性，增加了确定性。化学元素符号不像其他科学中的一些符号那样，某个符号在此范围内表示这个概念，在彼范围内表示那个概念，化学元素符号自规定之日起，就被确定下来了，C表示碳元素，H表示氢元素，N表示氮元素，……虽然有个别元素符号，如H，在化学中表示氢，在数学中表示哈密顿算符，在热力学或化学热力学中表示热焓，但是，这只是个别现象，而且在化学范围内，更准确地说，在化学元素范围内，H表示氢是确定的，化学家这样看，其他科学家也这样看。在物理学中，情况要比在化学中复杂一些。例如，m是质量的符号，又是米的（长度单位）符号；I是电流符号，又是冲量符号；A是安培（电流单位）的符号，又是放射性活度的符号，如此等等。诚然，这些情况并不违背符号的单义性，因为它们各自是在不同范围内使用的，而且结合上下文人们不难判断出某个符号代表什么。但是，在物理学这同一门科学中，一个符号在这个范围内标记这个，在那个范围内标记那个，毕竟出现了复杂性。正因如此，在一些学科中，常常在具体叙述科学内容以前，先要规定各种符号的用法。在化学中，化学元素符号没有这个问题，用不着特殊的规定。这是化学符号的第一个特点。

化学元素符号，形和义是国际上统一的、通用的，无论是哪个国家，C 这个符号都表示碳元素，H 这个符号都表示氢元素，毫无例外；然而元素的音（即发音）是各不相同的，元素所使用的语词（概念）也是各异的。如前面所举的例子，H 这个符号所代表的元素，英文中为 Hydrogen，俄文中为 Водород，汉语中为氢（发 q n 音）。因此，元素符号的形和义与音和概念，表现出了统一性和多样性，形和义是统一的，音和概念是多样的。

化学元素符号代表的是元素实体，符号本是抽象的，而它的所指却具有具体性，人们看到 H 想到氢单质——氢气，看到 O 想到氧气，很具体很实际。从这点来看，化学元素符号表现了抽象和具体的统一，形是抽象的，义是具体的。

化学元素符号作为基本化学符号，可以依一定规则构成各种复杂的化学符号，如刚刚讲过的，组成符号，分子符号，结构符号……从而可以表示化学中的复杂的现象和关系。这些是化学符号所特有的，就像化学语言、化学概念有其自身的特点一样，化学符号也带有明显的化学特征，它们是化学的，标以“化学的”，是名实相符的。

化学符号具有多种功能，在化学中起着重要的作用。

化学符号是标记物，是代替另一事物的某种事物，而且它代替语言、文字来标记某种事物。标记，即标志、记号之意，标记是某种事物的标志、记号，实质上是以记号的形式表达出来。因此，化学符号首先和主要的功能是表达、表示，它能够把化学元素、化学组成、化学结构、化学构型、化学构象、化学反应等表达出来，标示出来。语言是表达思想的工具，语言具有表达、表示的功能，化学语言无疑也具有这种功能，同样，化学符号也具有这种功能。化学符号在表达和表示思想方面比语言要简单、明确和精确，因而显得优越；而且，所要表达的思想越是复杂，化学符号的优越性显得越是突出。一个分子结构式所表达的内容，若是用语言符号，需要一大段话或一大段文章，不仅显得繁复，而且往往不够明确和精确。诚然，也应当指出，化学符号的这种优越性是有限的，对于一些复杂的结构、构型和反应，化学符号不能完全表达出它们的思想内容，有时还需要必要的文字说明作补充。

化学符号作为化学语言的一种形式，一种特殊形式，如同语言一样，也是思维的工具。化学家们的思维离不开概念，而化学符号可以替代概念，化学家们可以利用化学符号进行思考和推理。由于化学符号具有简明性，化学家借助于化学符号进行思考的过程中，也具有简明性。化学符号还有可操作性，可以组合和拆分，操作化学符号的过程也是化学家进行思考的过程，这样，化学符号作为一种可操作性工具，有利于化学家将抽象思维和化学符号的具体操作有机地结合起来。

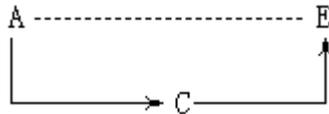
化学符号作为一种共同标记物，具有通用性，因而具有交流化学知识的功能。各国化学文献使用的文字不同，化学符号却相同，不同国家的化学家语言不通，化学符号相通，这就为化学知识的交流提供了便利。

三、化学符号的哲学研究

1. 符号和映象

符号是一种标记物，作为一种物，它是客观的，是能够作用于人们的感观引起感觉的东西。例如，禁止行人通行的交通标志，它可以用“禁止行人通行”的文字表达，也可以用某种图形表示，我们着重分析后一种标志物。当行人看到画有图形的交通标志牌时，立即在头脑中产生了该图形引起的感觉，形成了一种思想上的图象，用反映论的术语来表达，我们说该图形作用于人的感观引起了感觉，产生了该图形的映象。映象是对物的反映，反映与被反映者具有相似性。这时，该图形引起的思想上的映象，还仅仅是该物的映象，如同其他物体作用于人们的感观引起的感觉一样，仅此而已。我们用 A 代表标志物，用 C 代表该物 A 在思想中引起的感觉，它们的关系为 A → C。

由于该交通标志牌设置在特定的场所——例如，城市中的某个路口，这构成了该物的环境背景，又由于已知的交通规则，于是在 A 引起感觉 C 的同时，立即产生联想——标志牌的图形是“禁止行人通行”的意思，后面这个意思用 E 来表示。这样，形成了如下联系：



在这样的联系中，A 代表 E，A 是 E 的标记物，也就是说，A 是 E 的符号。虚线表示 A 和 E 的联系（即 A 代表、表示或标记 E）不是直接的，而是间接的，实际的联系用实线表示，是通过 C 建立起来的。

这个简单图示说明：代表或标记对象 E 的符号 A，并不是直接由对象 E 决定的，因此，符号 A 可以代表 E、标记 E，但不能反映 E，不是 E 的映象；作为符号的 A 与它所代表、标记的对象 E 的关系，是以 C 为中介的，是通过主体而建立的，A 和 E 的关系是主体假定的，是主体（采用符号的人群）约定或规定的，所以，A（符号）和 E（符号所标记的事物）之间，可以是相似的，也可以不是相似的，甚至根本就没有相似性，这就是说，符号作为一种物质形式与它所代表的事物之间的联系，不是自然的，而是人为的，是任意的和假定的。所以，符号和映象是不同的。

但是，通过主体的约定，当看到 A，联想到 E（如“禁止行人通行”），这时 A 即代表了 E（“禁止行人通行”），也可以说 A 中包含了一定的内容（“禁止行人通行”），A 的含义即是 E。实际上，人们使用符号，特别是在科学中运用科学符号，将符号作为事物的标记的同时也就赋予了它一定的含义。符号不等于符号的含义，符号的含义又是借助于符号表达出来的，是以符号作为物质外壳而存在、而显示的。从这点来说，符号不单单是代替另一物的某物，而是具有含义的，含义是意识中的东西。“语言符号和非语言符号的含义乃是我们的意识（它基本上是对客观现实和人的活动、实践的各种形式的反映）中发生的和借助于符号在交往过程中被表达的各种映象”。符号通过它的含义与反映、映象发生联系。*

人们利用符号或科学符号的实际过程，不是先规定符号再赋予它含义，

而是相反。人们在实践和认识中，产生了某种映象，或者说产生了某种需要表达出来的思想，如要向行人表示“这里禁止通行”，于是将这种要表达出来的思想、映象本体论化，转化为某种图形标志，这就是符号。因此，在规定了标记物的同时，也就规定了标记物所要表示的含义。反过来，符号才能成为某种事物的标记，成为认识工具。从化学历史来看，先有了关于化学的实践、实验、认识，才产生了应用符号的需要，才采用了符号，并逐步使符号统一化、规范化。所以，实际过程从根本上说是这样的：符号所代表的物所形成的映象，本体论化为符号物，反过来符号又成了它所代表物的标记。

2. 化学符号和化学映象

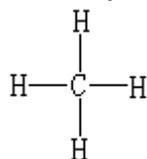
化学符号是化学客体的代替物，是化学客体的标记，化学映象是化学客体（组成、结构和过程）在思维中的反映，化学思想模型是化学映象的一种具体形式。我们讨论化学符号和化学映象的关系，着重讨论化学符号和化学模型的关系，或者反过来说，我们以化学符号和化学模型的关系为例，可以说明化学符号和化学映象的关系。

化学符号和化学模型都是化学客体的代替物，因为模型在科学认识过程中是被研究客体的代替者。那么，这是不是说化学模型也是化学符号呢？这两者之间有什么区别和联系呢？

我们已经知道，化学符号，如同科学符号或一般符号一样，它与化学客体之间的关系，不是相似关系，或者确切地说，可以不是相似关系，而作为一种思想或理论模型的化学模型，与化学客体（即原型）之间具有相似关系，就其认识论特征而言，实质上是原型的反映，是原型在思想中的映象。

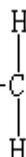
化学基本符号，即化学元素符号，与它所代表的元素之间的关系，没有相似性，化学元素符号是化学家们约定的，仅仅是以字母符号代表元素、指称元素。诚然，化学家们在实践和认识中感觉到需要用某种记号表示化学元素，才想到用各种可能的记号去代表元素，最终选择了化学元素的名称的首位字母作为元素的符号。显然，化学元素符号只能标记、指称相应的元素，它们与元素客体之间没有相似关系，因而，不能作为化学元素的模型。元素符号就是元素符号，而不是元素的模型。

然而，由基本化学符号——元素符号组成的复合符号，情况变得复杂了。由元素符号构成的分子式、结构式、构型式、构象式和反应式等，都可以从两方面加以考察。仅以结构式为例来说明。例如，甲烷分子的结构式：

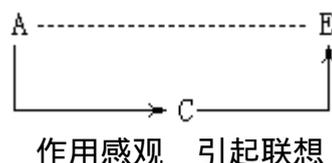


从一个方面来分析，它是由基本符号（化学元素符号）和价键符号构成的化学结构符号，我们同样也可以像分析符号那样进行分析。作为一种符号，它是一种标记物，即一种图形，它是客观的，可以作用于人们的视觉器官引起感觉的东西，人们一看到它，立即在头脑中引起了感觉，产生了这个图形的

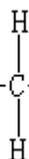
形象了，如上面所表示的那样： $\text{AH}-\text{C}-\text{H}$ 作用于感观 C（在头脑中产生



了这个图形的映象。如果看到这个图形的是一个完全不懂化学的人，他所看到的仅仅是这样一个图形，并不知它为何物，更不知道它代表什么、表示什么。相反，如果看到这个图形的是一个懂得化学的人（在化学或其他文献中看到这个图形——环境背景；它具有化学结构理论素养——相当于前面说过的交通规则），当看到这个图形 A，引起了映象 C 时，立即联想到“甲烷分子的结构”，我们用 E 表示，于是，形成了一种符号过程：



A 通过 C (主体) 与 E 发生联系， $\text{AH}-\text{C}-\text{H}$ 成了甲烷结构的标记，也就是甲烷分子结构的符号。



是甲烷分子结构的符号。

我们还可以从另一个方面进行分析，这个图形不仅仅作为甲烷分子结构的标志，而且它具体指出了甲烷分子的原子组成和原子之间的相互结合（以价键符号表示的）、原子之间的关系，它在一定程度上反映了甲烷分子的实际情况，或者说，它是甲烷分子结构在平面上的投影。在这个意义上，这个图形（即结构式）又是客观的甲烷分子结构的反映，是甲烷分子的结构模型，对这个模型进行研究能够得到关于现实的甲烷分子的结构知识。

综合上面两个方面的分析可知，分子结构式，当它作为指代、标记、表示化学客体的工具时，它是化学符号；当通过这种符号把化学客体标志出来，成为研究对象时，化学结构式就不再仅仅是化学结构符号，而转化为化学模型了，即转化为以结构符号的形式表现的化学结构模型了。我们知道，作为模型，通过实验和理论研究，不断得到修改和发展，使其越来越逼近现实的原型。如从平面结构模型发展为立体结构模型，就向现实原型逼进了一步，从立体结构模型到构象分析模型，又向现实原型逼进了一步。模型向原型的逼进，标志着认识的不断深入。但是，模型终究是模型，它是原型的反映，而不是原型本身。模型和原型，具有相似关系，随着认识的深入，相似的程度不断提高；但是，模型和原型不能等同，它们之间的关系不是相等的关系，绝对同一的关系。化学符号却不具有这种关系。化学符号，一般地说，只是指称、表示化学客体，与化学客体不必然具有相似关系。然而，正如在这里分析所表明的，由于分子结构式、构型式、构象式、反应式等，都具有两重性质，它们一身二任，从一个角度看是化学符号，从另一个角度看，又是化学模型，或者说具有化学模型的性质，因此，这种化学符号与其所代表的客体之间，虽然是标记与被标记的关系，却同时具有相似性，在它代表、表示出化学客体的同时，给人们提供了关于客体的知识。

应当指出，在化学中，分子式、结构式、构型式、构象式、反应式等，固然具有模型的性质，过去在化学和化学哲学文献中，多半强调的也是它们的模型性质；通过上面的分析可知，这类化学式，首先是一种符号，首先有符号的性质，如果看不到这一点，化学结构模型等，作为一种理论模型，就无从获得直观表现，就失去了表现形式。以结构式表示的化学结构模型，实质上是化学结构理论模型的符号形式，是这种模型的符号化。符号化的模型，

没有符号如何能存在呢？因此，当我们分析分子式、结构式、构型式等等形式的时候，一方面应当看到它们的形式方面，它们是符号形式，另一方面应当看到它们的内容方面，它们是客观的化学对象的反映，是客观原型的模型。在这个意义上可以认为，化学分子式等，作为形式，是符号；它们的内容是反映，具有模型的性质，内容又与符号的含义相联系，或者说，化学结构符号等借助于其含义与化学模型相联系。

应当强调指出，当我们注意化学符号与化学模型之间的联系的时候，也不应当抹煞它们之间的区别，不应当在化学符号与化学模型、或化学符号与化学映象之间划等号，否则将会与符号论相混同。下面我们就来讨论化学符号和符号论的关系问题。

3. 化学符号和符号论

我们已经反复指出，化学符号作为化学对象或过程的代替物，与化学对象或过程并不要求形式上的相似，建立和使用化学符号的化学家也并不企求使化学符号同被标志的对象在形式上相似。例如，化学家们使用 H 作为氢的符号，他们决不认为氢元素的原子在形式上就像 H 这个符号那个样子，他们

只是用 H 代表氢元素的原子。同样，化学家们用 $\begin{array}{c} \text{H} \\ | \\ \text{H}-\text{C}-\text{H} \\ | \\ \text{H} \end{array}$ 代表甲烷，在他们

的心目中，这个式子只是象征性地表示甲烷分子中原子的结合和相互位置，其中，H 和 C 仅代表氢和碳的原子，“—”表示相互之间的结合；因此，这个式子决不意味着氢原子就像 H 那个样子，碳原子具有 C 的样式，原子之间真的有一根线相连。事实上，随着化学的发展，化学家们对原子之间的相互结合的作用的理解，不断变化，不断深化，在量子化学中，特别是在分子轨道理论中，对这种相互结合的作用（即化学键）的理解，远非一条线“—”所能充分表达的。在这个意义上，化学符号本身，或者确切地说化学符号的物质形式同它所代表和表示的元素、分子等化学客体之间的联系，是任意的或假定的，不是由化学客体本身的性质所决定的；也正是在这个意义上，化学符号只能标记或代表化学客体，而不能反映化学客体，化学符号不是化学客体的映象。但是，化学家们基于化学实践和认识，在创造化学符号的同时，也就规定了化学符号的含义，化学符号的含义与化学对象相联系，它由化学对象所决定并反映化学对象。

我们知道，人们的感觉、知觉、表象等等，是人脑对外部世界的反映，基于感觉、知觉、表象等等，进一步抽象，形成的概念、定律和理论，也都是对客观对象和过程的反映，是客观对象和过程在思想中的映象。正如列宁在《唯物主义和经验批判主义》一书中所指出的，感觉是客观世界，即世界自身的主观映象，我们表象的对象和我们的表象有区别，后者是前者的反映。在谈到物质概念时，列宁在同一本书中指出，物质是标志客观实在的哲学范畴，这种客观实在是人感觉到的，它不依赖于我们的感觉而存在，为我们的感觉所复写、摄影、反映。这些说明，标志客观实在的概念、范畴和定律等，它们的形式是主观的，内容是客观的。如果把感觉、知觉、表象等视为符号，把概念也看作为符号，把定律和理论当作符号构成的体系，实际上也就是把映象和符号等同起来，将会造成理论上的混乱。

列宁在《唯物主义和经验批判主义》一书中专门对所谓感觉符号论进行了分析和批判。列宁指出，把感觉叫做外部现象的符号，否认感觉和它们所代表的物之间有任何相似之处，这是不可知论的观点，是感觉符号论或象形文字论。什么是象形文字论或感觉符号论呢？所谓象形文字论，就是一种认为人的感觉和表象不是现实的物和自然过程的复写，不是它们的模写，而是记号、符号、象形文字等等的理论。依据这种理论，人们关于物的表象，只能是客体的符号和天然标志，人们关于物的感觉不过是符号，不过是某种任意的标志，这种标记和被标记的物的世界是完全不同的。

显然，感觉符号论或称为符号论，把符号与映象混同了，试图用符号代替映象。我们已经知道，符号不须同它代表的东西有任何相似之处，如果感觉、表象、概念等不是现实对象的映象，而只是同现实对象没有任何相似之处的符号，那么外部的现实对象是否存在就成疑问了，而且对外部对象的认识也就成问题了。

化学家，特别是理论化学家，在现代化学研究中，离不开化学符号，也离不开其他科学符号，尤其是数学符号。在一定范围内，理论化学家的工作，似乎直接同符号打交道，利用化学的、物理学的和数学的符号进行构思、推理和运算，许多时候还要利用计算机进行计算，输入和输出，总之，理论化学家直接面对的几乎是符号的世界。在这种情况下，常常会遇到两个问题：第一个问题，在他们采用符号进行构思、推理和运算的时候，怎样认识化学概念和理论，它们仅仅是符号还是对化学对象及过程的反映。在化学史上，一些化学家尽管处处使用着原子、分子概念，但不认为原子和分子是客观存在的，这在实质上是把原子、分子概念当作了符号。这个历史经验应当记取，以免重犯类似的理论错误。第二个问题，对符号的含义如何进行解释。利用符号进行构思、推理和运算，目的是为了揭示规律，直接表现为如何理解和认识一些符号的物理意义。正是在这点上，也就是在怎样认识一些符号或符号体系的物理意义的问题上，经常发生分歧，也常产生歧义。例如，海特勒和伦敦根据对 H_2 的计算结果，注意到氢分子键能的大部分是由交换积分做出的贡献（日本物理学家苏基纳算出了交换积分的准确数值），于是用电子交换解释成键的原因。他们认为，正是由于电子以一定频率从一个原子到另一个原子作同步跳动，才使两个氢原子结合成氢分子。后来，量子化学家们指出，交换概念不是真实的物理图象，而是与一定的近似处理方法相联系的，只是对数学模型的一种解释。无论解释的是否正确，无论作出怎样的解释，人们总得对采用的符号（包括数学符号和公式）和利用符号所得结果作出解释，否则，仅仅是一些符号或数字，不知道它们表示什么，意味着什么，人们的研究也就失去了意义。对符号及利用符号进行推理和计算所得结果进行理论解释，实质上是要揭示隐藏在符号及其结果背后的含义。在这方面，现代化学已经取得了长足进步，但是，仍有许多问题需要进行深入探索，而且，为了深入认识化学规律，还不得不常常求助于经验和半经验的方法。

