

● 科学哲学

科学研究纲领方法论与化学的原子论和电子论*

桂 起 权

(武汉大学 人文科学学院, 湖北 武汉 430072)

[作者简介] 桂起权(1940-), 男, 浙江宁波人, 武汉大学人文科学学院哲学系教授, 博士生导师, 主要从事科学哲学与科学思想史研究。

[摘 要] 玻尔的原子模型是现代原子论纲领的核心, 该纲领拥有应付反常情况的一整套策略性措施, 它在化学史上取得了一系列成果。化学键的电子理论是在原子论纲领下的一个子纲领, 而共价键与离子键理论则分别是其富有启发力的辅助假说。纲领方法论是评价化学理论的一种通用的概念框架, 并且它与自然辩证法范式相容。

[关键词] 纲领方法论; 原子论; 化学键的电子论

[中图分类号] N 031 [文献标识码] A [文章编号] 1000-5374(2002)04-0434-06

在我国的化学哲学研究中, 自然辩证法范式一直占支配地位, 并且还受到苏俄哲学家凯德洛夫(B. M. Kedrov)理解方式的强烈影响。1980年代开始偶尔引进用西方科学哲学的观念分析化学的零星案例, 然而系统化的方法本身却被肢解掉了。本文的特点则在于力图表明, 科学哲学是一套可以一贯到底的研究纲领, 它可以适用于化学哲学。文中选取科学研究纲领方法论原理作为代表, 看看它是否能成为分析化学理论的有效的方法论辅助工具。我们所选的案例是原子论和化学键的电子论解释。

—

从科学哲学的观点看, 化学哲学是它的一个专门化的分支, 正像物理学哲学、生物学哲学、经济学哲学、心理学哲学与系统科学哲学等等一样, 都是科学哲学普遍原理在某一特殊领域的具体化。翻阅一下《英国科学哲学杂志》和美国《科学哲学》杂志就可以知道, 最近十几年来, 分科化的科学哲学已日益受到多方面的关注。看来在科学哲学诸分支中物理学哲学首当其冲, 生物学哲学紧接其后, 化学哲学则相对地落后了。另一方面, 号称《化学哲学国际期刊》的英文杂志, 更多是倾向于理论化学而不是哲学。

目前科学哲学已发展成现代哲学中的很有影响的一个学科。科学哲学在初创阶段流派很多、众说纷纭, 后来经过批判性分析, 经过沉淀与整理, 各派的合理成分也即对科学的性质与方法所作研究中的有价值成果, 亦被综合吸收到学科体系的内容中去, 成为其有机整体中不可或缺的组成部分。国内近年来在这方面已有不少论著出版。例如张华夏等所著《自然辩证法概论》, 已将科学哲学与自然辩证法治于一炉。

二

科学研究纲领方法论(简称 MSRP), 是由科学哲学拉卡托斯所首创, 他倍受科学史学家的青睐。这

* 收稿日期: 2001-08-02

种关于科学理论的结构模型的特点在于:一是研究纲领不是单一的理论,而是由某种坚定的信念所支撑的整个理论系列所组成,它是开放的、可变动的,因而具有很大的弹性与韧性,不是轻易可证伪的。二是纲领具有精制的结构,分为“硬核”与“保护带”两层。硬核是不可触动的深层的核心假说与根本信念(例如道尔顿的化学原子论的核心假说是:(1)化学原子不可分割、不生不灭,在化学反应中保持不变;(2)原子的本性取决于原子质量;(3)不同原子以简单整数比相结合即化合。)一切纲领可以说都以它们的硬核为特征;硬核周围有一层必须经受检验压力的由众多辅助假设所组成的保护带。面对反常情况,保护带可以通过自身结构的调整变形来消解反常,用以维护硬核不受侵犯,并促进整个纲领通过内部的理论交替而不断取得发展。(例如由于盖·吕萨克发现气体简比定律,化学原子论面临“半个原子”的佯谬或反常。然而,又由于阿伏伽德罗引进分子说这一辅助假设,成功的消解了反常,捍卫了“化学原子不可分”的硬核)^[1](第219页)。三是研究纲领具有两个主要的方法论规则;反面启发法规则——指示不该做的事,即不得将矛头指向硬核,纲领的根本信念不容放弃;正面启发法规则——指示该做的事,也就是主动地调整保护带、处理可预期的反常的一系列策略性的提示或程序性的指令,包括如何增加辅助假设和改进分析技巧,如何积极解释和预言新事实等。四是保护带的调整的可以朝两个不同方向进行,从而研究纲领就有进步与退化之分。一个纲领如果能产生更多可能得到确证的新预言,并能产生更有启发力的新理论,那么它就是进步的,反之则是退化的。

三

在对现代原子理论和化学键的电子论解释作具体分析之前,有必要先对研究纲领的硬核的非常特殊的哲学性质作出一番解释。硬核是由这样一组陈述所组成,它对所研究对象的根本性质作出断言。它往往是一种思辩性的猜测,一种未经检验的总体的世界图景。硬核就其本性而言,它只是“形而上”的假定、是无形象的抽象本质和规律,而不是直接面对形而下的、有形象的具体事物的,因此靠经验直接检验几乎是不可能的。

研究纲领的正面启发法与硬核之间存在深刻的联系。正面启发法作为策略性的示向原则能提供一系列的提议或暗示来充实研究纲领,为的是使研究纲领能对所研究对象作出合理说明和预言。例如在物理学和化学哲学中,古希腊原子论纲领的硬核原先只是一种关于宇宙本体纯思辩的形而上猜想,然而,由于笛卡尔在其方法论著作中引进了诸如广义的惯性原理、宇宙的运动量守恒原理和粒子相互作用原理等辅助假说的保护带,使原子论纲领逐步生长成羽毛丰满的在科学上富有启发力的研究纲领。正如科学哲学家库恩所注意到的,在笛卡尔之后的大多数科学家都掌握了一种思考的启发性程序,即认为基本的物理和化学定律都必须具体阐明微观粒子的运动及其相互作用^[2](第34页)。原子论纲领的硬核的强大启发力,从道尔顿的化学原子论、普朗克的辐射量子论一直延续到现代粒子物理学,影响极其深远。

正是这样,原子论的正面启发法能引导原子论研究纲领内部特殊理论的产生,每一特殊理论不仅围绕硬核(或思辩性的本体论假定)来建构。换句话说,处在原子论研究纲领底层的有特色的本体论假定(如不可分的基础粒子及其作用那样的总体世界图景),能不断激发出理解由实验所展示的新事态的策略性提示(如启发道尔顿或阿伏伽德罗在研究化学反应时提出化学原子或分子的概念,启发洛伦兹在研究电磁现象时引进电子论。甚至现代科学家玻尔所引进的量子论的原子模型、化学家们的化学键的电子理论等等无不受到原子论核心思想的启示),具体影响在原子论纲领内部的各种特殊理论的建构。

四

拉卡托斯通过物理学和化学案例,论证了新兴研究纲领的内在启发力量和理论上的坚韧性。而应当关注的是,在实验反驳以及竞争对手的压力下,理论还是不断地自我更新。最典型的案例就是玻尔原

子模型从提出到逐步完善的发展过程,以及普劳特假说在无数反常中取得进步的过程。

玻尔的整个纲领是建筑在卢瑟福成果的基础上,并从最简单的关于氢原子的“分层轨道”模型出发的。它由于反对派的理论观点和实验的不断挑战,经过多次修改,发展成为越来越复杂的一组模型(第一个模型 M1 下同)。这个最简单的氢原子模型,由于引进了量子条件,引进了稳定态和能级跃迁的概念,因而不只顺利地说明了原子的稳定性,而且相当满意地解释了氢原子整个光谱系的规律性。然而, M1 模型还是受到了反常事实的挑战。因为在根据玻尔的 M1 不该有氢谱线的地方,却存在着非常像氢谱线的东西。这一反常谱系便是匹克灵与否勒所发现的紫外线谱系,紫外线谱系与巴尔麦谱系有着相同的收敛数。否勒由此推断出能否证玻尔 M1 模型的“证伪假说”。玻尔立即采取对策,他并没有对观察精度提出质疑,而是对其解释性理论持异议,相应地构造出一个“挽救假说”,新模型 M2,即氢离子模型,定性上确实可以说明问题,于是又反败为胜。然而,否勒仍不服输,不久后他发现 M2 的预测值与实验值不符,这样就反驳了 M2 的模型,并由于 M1 与 M2 的连带关系,也削弱了 M1。玻尔引进新的辅助假说,对保护带做出调整变形,构成了玻尔的 M3 模型。也就是说,原先以电子围绕固定不动的原子核旋转的计算太粗糙,应当考虑电子实际上又是围绕公共质量中心旋转的。尽管 M3 取得了一定的成功,但它仍不能解释光谱的“精细结构”,于是又推出了 M4、M5 等模型。索末菲在玻尔理论的发展中做出了进一步的贡献,他既考虑到应该用椭圆轨道代替圆轨道,又考虑电子高速运行时的相对论效应。索末菲及其学派把玻尔最初几种理论模型的许多失败,都转变成了玻尔研究纲领的新胜利。

总之,玻尔的原子论纲领胜利的历史,是新兴研究纲领的进步性和具有充足的内在启发性的明证。一个进步的研究纲领面对实验反驳,面对竞争对手的攻击与压力,不仅能及时提供“挽救假说”,及时消化反常事实,变不利证据为有利证据,而且能积极预测新颖事实,并通过自我更新使理论不断取得进步。

另一个特别成功的研究纲领,是以所有原子都是氢原子复合物的观点为基础的普劳特假说,这是一个在无数反常中进步的研究纲领,并且显然是原子论纲领的一个子纲领。普劳特在 1815 年和 1816 年各发表一篇匿名论文,断言所有的纯化学元素的原子量都是整数(即氢原子原子量的整倍数)。普劳特当然很清楚,反常情况比比皆是,但他说这是因为当时的实验技术靠不住,不足以分离出“纯元素”。

拉卡托斯在分析相互竞争理论与实验之间的多角争斗关系时特别指出,当理论家对实验家的判决不服而提出上诉时,上诉法庭通常不直接审查基本陈述,而是审查据以确立基本陈述真假的那个“解释性理论”。刻画这种上诉程序最有代表性的案例是化学史上从普劳特假说的提出(1815 年)到复活(1911 年)的历史过程,即普劳特派化学家与物理家,与一切不利于普劳特假说的实验证据进行长期的不懈的斗争的历史过程。

拉卡托斯把只考虑“理论”(原子整量论)与“事实”(原子量经常出现小数)直接冲突的模型称作“单理论演绎模型”,而把考虑竞争理论与实验的多角关系的模型称作“多理论演绎模型”。只要理论家对判决表示不服,就会提出上诉,这时我们就必须使用多理论模型。拉卡托斯指出,冲突不是受检理论与实验事实的直接冲突,而是两个高层次的竞争理论即受检的说明性理论(普劳特假说)与藏在事实背后的解释性理论(原子非整量说)之间的矛盾,这样就可以概括出一般的“上诉程序”:代表受检理论(普劳特的原子整量说)一方的理论家,可以要求做出不公平裁决的实验家详细交待实验背后的“解释性理论”,然后理论家(普劳特的后继者)可以用一个更好的理论(比如同位素假说)来取代它,根据这一更好的理论,原先的否定证据(小数)将会反转成肯定证据(因为它只是几个整数取平均的结果)。

早在 1886 年,普劳特的拥护者的克鲁克斯就预言过:“某些现有的原子量不过表现了一个平均值”。普劳特派失败的根本原因是,错误地假定了两种纯元素必定可以用单纯的化学手段分离开来。

在普劳特假说提出之后,差不多隔了一个世纪的 1910 年,卢瑟福学派中的化学家索迪首先提出同位素的概念。他指出,存在着不同原子量、不同放射性但是化学性质完全一样的化学元素变种,它们在周期表中占有同一个位置,因而名为同位素。同位素的发现表明:通常测得的化学元素的原子量,只是该元素的各种同位素按不同比例并存的一个平均值。有了这种新的解释性理论,原子量出现小数的经

验事实, 就仍可以在整量说纲领的基础上得到合理说明。因为每一种单纯同位素的原子量仍是整数!

五

正如拉卡托斯所指出, “没有科学史的科学哲学是空洞的, 没有科学哲学的科学史是盲目的”^[3] (第141页)。同样, 纲领方法论只有与科学思想史的实际材料有机地结合起来才是有血有肉、活灵活现的。

化学键的电子理论, 应当看作化学中的原子论总纲领之下的一个子纲领。原子论纲领拥有一连串具体理论, 如化学中的原子分子论、热学中的分子运动论、洛仑兹电子论, 从普朗克到玻尔的早期量子论、化学键的电子理论等等。其中每一实例都可以看做较大核心纲领即原子论总纲领的一个子纲领。在总纲领与子纲领之间、不同子纲领之间都存在互相启发、相互影响。各自从对方汲取智慧和力量。

从科学思想史上看, 自从电子被发现(1897)后, 经过卢瑟福(1911)、玻尔(1913)等人的工作, 逐步确定了原子的内部结构, 从而使化学家们有可能逐步根据原子与分子中电子的行为合理解释化学物质相互化合的能力, 这样才建立起化学键的电子理论。在这种作为原子论总纲领的子纲领的电子理论建立和发展的过程中, 柯塞尔(1916)、刘易斯(1916)和朗谬尔(1919)等化学家作出了卓越贡献。其实, 在相当长的历史时期内, 化学家们并不了解原子间相互结合的真实机理, 因此一直沿用古老的“化学亲和力”的模糊概念, 它出自“爱的吸引力”的隐喻。直至1812年, 瑞典化学家贝采里乌斯“电子二元说”的提出, 才确立了用电的相互作用解释原子间相互结合的机理的正确研究路线。1852年, 弗兰克兰根据各种元素在形成化合物时相互间总有一定的比例关系的经验事实, 提出了带有量化意味的化合价的概念。1904年, 阿培格在名为《亲和力和原子价》的论文中提出了一个经验规则: 任何元素一般既具有正价又具有负价, 正负价绝对值之和等于8。他称之为“八数规则”, 可惜尚缺乏深层的理论解释。这些都只能归于化学键的古典经验理论的范畴。

1916年对于化学键的电子理论来说, 是关键性的一年。在同一年中, 德国化学家柯塞尔(W. Kossel, 1888—1956)提出了离子键理论, 而美国化学家刘易斯(G. N. Lewis)则提出共价键理论, 两者互为补充。我们可以将他俩研究纲领的硬核塑述如下: (1)电子是原子中很活跃的要素, 电子带有负电, 可以有条件地在原子间迁移; (2)一个原子若得到了过剩的电子则呈负电性, 反之原子若失去电子则呈正电性(以上两点是继承了J. J. 汤姆生1904年的观点); (3)化学原子应分为内部与表面两部分, 原子间相互化合时, 是原子表面的电子起决定作用(这是继承了J. 斯塔克1915年的观点); (4)每种原子都有达到惰性气体般的八电子结构, 趋向稳定的倾向(显然继承了经验性的“八数原则”)。这个研究化学键的电子理论的共同纲领, 是从属于原子论范式下的一个子纲领。

由于柯塞尔的研究主要以极性分子与离子化合物为对象, 刘易斯的研究则首先以非极性分子为重点, 因此同一子纲领产生不同的理论变体。化学键的电子论子纲领在柯塞尔那儿表现为: (1)采用玻尔的原子模型解释化学行为, 用外层电子得失双方的协同说明原子如何结合为分子。(2)参与化学变化的主要是原子中的外层价电子。(3)原子序数等于核电荷数(即莫斯莱定律), 核外电子依次分层排布, 每种原子都有趋向稳定的八电子结构倾向^[4] (第308页)。柯塞尔的理论是富有启发力的, 它十分成功地解释了处于周期表中短周期的两端的、典型金属与典型非金属相互作用的化学行为。如钾原子失去一个外层电子, 达到八电子稳定结构而成为 K^+ 离子, 氯原子得到一个外层电子, 也达到八电子稳定结构, 而成为 Cl^- 离子, 二者靠库仑力结合成稳定的离子化合物KCl等等。然而他对于非离子化合物, 如 H_2 、 Cl_2 等同极分子的“反常”情况却束手无策(而刘易斯则能轻松地对付这些“反常”)。

另一方面, 化学键的电子论子纲领在刘易斯那儿则表现为: (1)每个原子由“原子实”和“外壳”所组成(好比我们把苹果去皮之后称作“苹果实”), 外壳上带负电的电子数目由0变到8, 原子的化学性质也随之变化。(2)原子实所带有过剩的正电荷, 与外壳上电子的负电荷绝对值相等(对中性原子), 该数值就等于该元素在周期表上的族数。(3)原子倾向于具有稳定外壳的八电子结构(电子对称分布在正立方

体诸顶点上)。(4)两个原子的外壳可以部分重叠,即电子可能为两个原子的外壳所共享。

柯塞尔观点的特异性在于强调外层电子得失双方(负离子与正离子方)的协同,刘易斯观点的特异性则在于强调部分外层电子的共享。这正是问题的关键所在。抓住了一个纲领的核心观点,其他许多具体的结论或推论都可以结合具体场境,按其内在逻辑引申出来,这也就是所谓正面启发法的威力。

有人指责刘易斯没有接受玻尔的分层“行星模型”,却采用“八隅体”说明模型,因而背离了物理实在,其实不然。我认为,模型只是对实在的某些真实性质关系的简化和抽象,不能直接混同于实在,即使玻尔模型也并不代表最真实情况,因为后来的量子力学、量子化学都比它更正确。反过来说,刘易斯模型仍从某些角度抓住了真理,正因为如此,他的直觉简捷的电子结构时才能够保留至今。

美国化学家朗谬尔(Langmuir, 1881—1957)继承、充实和发展了刘易斯的共价键理论。他将刘易斯的思想与玻尔原子模型有机结合起来,明确了“共享电子对”的概念,总结出“共价键”的专名,首次提出了“拥有等数电子的分子或基团,具有相似的结构”的“等电子原理”,朗谬尔还用一种新的键型解释了含氧酸的离子结构。这是离子键与共价键相结合的一种中间型。共享电子对只是由一个核单方面提供(或给予),故后人称之为“给予键”,并在结构式中用箭头来表示。如硝酸与硫酸可记为:



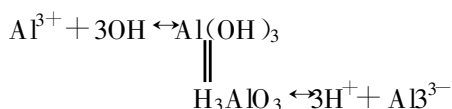
至此,又出现了反常情况。因为实验表明,硝酸中氮与氧的三个键并无差别,而上述结构式却表明它们分属三种键型(离子键、共价键及给予键)。正是为了维护化学键的电子论纲领的核心思想,为了应付用新键型说明含氧酸的离子结构的反常情况,鲍林才主动地调整了化学键电子论纲领的保护带结构,增添了称作“共振论”的辅助假说。鲍林指出,电子对可以在分子的各种可能的构型中迅速移动,从而使电子的分布变得均匀,这一过程称为“共振”。这里,我用纲领方法论解释了鲍林“共振论”之由来。我非常赞同熊汉缙、许健的意见:“共振论不承认极端键型之间的决然对立,而承认它们在一定条件下的相互过渡,这体现了辩证法的思想”^[4](第341页)。我认为,这里还需要用到海森伯与亚里士多德的潜在概念。“潜在是物理实在的新形式”^[5](第11页)。具体说来,硝酸中三种潜在的键型的叠加和快速相互转移等于化学实在的一种新形式。

正如玻尔的早期量子论只是量子力学的前身一样,化学键的电子论也只是现代化学键理论与量子化学的先驱理论和不精确的表现形式,但它的历史功绩却是不可磨灭的。整个说来,从贝采里乌斯的“电化二元说”到化学键的电子论的不同变形,再到量子化学的价键和分子轨道理论的演变,都是在原子论纲领的硬核与正面启发法的引导下,面对反常情况的压力,不断调整保护带结构,自觉进行新旧理论交替所带来的积极成果。

六

必须声明,我认为科学哲学模式与自然辩证法模式两者在一定条件下可以兼容,可以互为文本与解读者,从而按解释学的辩证法实现“视界融合”。在本文中,笔者从科学哲学观点看待化学哲学,认为科学研究纲领方法论是评价化学理论的一种可以通用的概念框架。这并不意味着笔者拒斥自然辩证法。相反,笔者认为,矛盾辩证法是化学领域中极有启发力的研究领域,笔者曾在《场有自然哲学与场有辩证法》一文中^[6](第90-109页)强烈地表明了这一意向。笔者不仅用周易中的“一阴一阳之谓道”和谢林自然哲学中的“阴电与阳电、吸引与排斥以及酸与碱”等“两极性”观念,来阐发氯化钠的离子键中电子一得一失的矛盾辩证法。更以氢分子的共价键为例说明同极分子,因“共享电子对”而出现的“非得非失、亦得亦失”的矛盾辩证法。具体地说,在单质双原子分子中,两个原子会同,谁也不是生电子者,谁也不是得

电子者, 因为没有失也没有得。从另一个意义上说, 两个原子中的每一个既是得电子者(从对方获得), 又是失电子者(向对方贡献), 因为两者共享。还以氢氧化铝这种“非酸非碱、亦酸亦碱”的化学存在物, 说明它的实在性本身, 即究竟作为酸还是作为碱而存在, 完全取决于相对相关的场境与关系。请看下面反应式:



氢氧化铝就是铝酸。在水溶液中, 氢氧化铝可看做铝离子与氢氧根的“对立统一”; 而铝酸又可看做氢离子与铝酸根的“对立统一”。如果加进酸, 它就以碱的面貌出现; 反过来, 如果加进碱, 则它就以酸的身份出现, 如此等等。

[参 考 文 献]

- [1] 桂起权. 科学思想的源流[M]. 武汉: 武汉大学出版社, 1994.
- [2] [美] T·S·库恩. 科学革命的结构[M]. 李宝恒, 纪树立译. 上海: 上海科学技术出版社, 1980.
- [3] [英] 拉卡托斯. 科学研究纲领方法论[M]. 兰征译. 上海: 上海译文出版社, 1986.
- [4] 化学思想史编写组. 化学思想史[M]. 长沙: 湖南教育出版社, 1986.
- [5] [德] 海森伯. 物理学与哲学[M]. 范岱年译. 北京: 商务印书馆, 1984.
- [6] 桂起权. 场有自然哲学与场有辩证法[J]. 台北: 哲学杂志, 1995, (13).
- [7] 桂起权. 科学研究纲领方法论的经济学应用[J]. 经济学家, 1999 (6).

(责任编辑 严 真)

MSRP & Theory of Atom and Electron in Chemistry

GUI Qi-quan

(School of Humanities, Wuhan University, Wuhan 430072 Hubei, China)

Biography: GUI Qi-quan (1940-), male, Professor, Doctoral supervisor, School of Humanities, Wuhan University, majoring in philosophy of science and history of scientific thinking.

Abstract: Bohr's Atomic Model is the core of Modern Atomic Theory's Program which includes a complete set of tactful steps in countering anomalous situations and obtains a series of good achievements; The Electrical Theory of Chemical Bond is a sub-program of the Atomic Theory's program, and the Theory of Covalent Bond and Ionic Bond are the arousing assistant hypotheses respectively; The Methodology of Program is an universal concept's frame in evaluating the Chemical Theory, and it is accord with the paragon of Dialectics of Nature.

Key words: methodology of program; chemistry; theory of atom; theory of electron on the chemical bond.