

从门捷列夫周期律到量子理论

——科学哲学案例研究

桂起权,李继堂

(武汉大学哲学系,湖北 武汉 430072)

摘要:通过对门捷列夫元素周期律的量子理论还原,以及门捷列夫元素周期律的研究纲领和量子理论元素周期律研究纲领之间的转换的研究,显示出门捷列夫学说对量子理论的科学方法论意义。

关键词: 门捷列夫元素周期律;理论还原;科学方法论;量子理论

中图分类号: N031 **文献标识码:** A **文章编号:** 1003 - 5680(2004)01 - 0043 - 04

我们认为,分析哲学家奎因所批判的经验论教条之一严格的还原论和奎因所主张的(完全的)“译不准原理”同样是过分极端的结论。相反,我们坚持“温和的相对主义是驳不倒的”。^[1]还原往往被人们看作是使问题简化和理解贫乏,其实这是不对的。事实上,M 邦格明确表示过,科学理论还原“就是将一种学科的概念、命题和理论用另一种学科的概念、命题和理论来加以理解”,并指出,“还原导致了加深理解”,它“丰富了还原者与被还原者两个领域”。“带来了两个先前的分离开来的研究领域的知识的统一”。^[2]我们正是在这种“加深理解”的基础上找到门捷列夫元素周期律的研究纲领和量子理论元素周期律研究纲领之间的深层联系。

一 门捷列夫元素周期律 还原为量子理论元素周期律

首先,应当明确的是,门捷列夫元素周期律学说是一个科学理论,而不是一般的实验定律。1869年门捷列夫提出化学元素若按照相对原子质量的大小依次排列,则元素的化学性质出现周期性的变化,他称之为化学元素周期律。化学元素周期表是化学元素周期律的表现形式。在和周期表一同发表的论文中,已经包括了周期律在以后几年中才被详细研究的所有重要的论点。这里扼要地提及下列几点^[3]:

1、按照元素原子量的大小排列起来的元素,呈现出明显的性质上的周期性;2、原子量的大小决定元素的特征,正像质量的大小决定复杂物质的性质一样。3、人们应该预料到

许多未知单质的发现,例如,类似于铝和砷的原子量介于65 - 75之间的元素;4、当我们知道了某元素的同类元素以后,有时可以修正该元素的原子量;5、元素的某些同类元素将按它们原子量的大小而被发现。

按照内格爾的区分,科学理论有三个主要部分:(1)一种抽象的演算,它是该系统的逻辑骨架,且‘隐含地’定义了这个系统的基本概念;(2)一套规则,通过把抽象演算与具体的观察实验材料联系起来,这套规则实际上便为该抽象演算指定了一个经验内容;(3)对抽象演算的解释或模型,它按照那些或多或少比较熟悉的概念材料或可以形象化的材料使这个骨骼变得有血有肉。其中第二部分有不同的提法,如坎贝尔的“辞典”,卡尔纳普与内格爾的“对应规则”等。本文采用亨佩尔的划分:(1)内在原理;(2)桥接原理;(3)导出原理。

在一个科学理论内部的内在原理、桥接原理和导出原理的划分,不仅在理论层次与经验层次的关系上成立,而且在高层次理论与低层次理论的关系上也成立,只要把其中的理论层面与经验层面换成“高层次理论”和“低层次理论”就行了。这里的“高层次理论”即内格爾在讲理论的还原时的“从属科学”,“低层次理论”即“基本科学”。前者是“被还原到另一个理论的那组理论或实验定律”,后者是“实验或建议还原的那个理论”。为了不引起混淆,在此借用两套术语分别描述复杂理论内部的理论与经验的关系;以及高层次理论与低层次理论之间(这里的高低是从还原关系而言)的关系。谈到门捷列夫周期律和量子理论与经验事实之间的关系时用

【基金项目】 本文属国家社会科学基金项目 OOBZX015,物理学哲学研究。

【收稿日期】 2003 - 06 - 02

【作者简介】 桂起权(1940 -),男,武汉大学哲学系教授、博导;
李继堂(1967 -),男,武汉大学哲学系博士研究生。

“假说”、“对应规则”、“经验”,谈到门捷列夫周期律和量子理 原理”。详情如下表所示:
论等诸理论之间的关系时用“内在原理”、“桥接原理”、“导出

表 1 门捷列夫元素周期律和量子理论元素周期律内部理论结构

| | 门捷列夫元素周期律 | 量子理论元素周期律 |
|------|--|--|
| 假 说 | 按照元素原子量的大小排列起来的元素,呈现出明显的性质上的周期性 | 化学元素性质的周期性来源于原子电子层结构的周期性 |
| 对应规则 | 门捷列夫元素周期表 | 原子核外电子排布 |
| 经 验 | a. 原子量的大小决定元素的特征;b. 人们应该预料到许多未知单质的发现;c. 当我们知道了某元素的同类元素以后,有时可以修正该元素的原子量;d. 元素的某些同类元素将按它们原子量的大小而被发现。 | a. 元素的金属性和非金属性;b. 元素的电离能、电子亲和能和电负性;c. 元素的化合价 |

表 2 门捷列夫元素周期律、量子理论及量子力学三者关系

| 导出原理 | 门捷列夫元素周期律 | 量子理论:原子核外电子壳层结构理论 |
|------|-------------------|--------------------------------------|
| 桥接原理 | 原子核外电子排布和元素周期表的关系 | 量子充填轨道的原则:a. 不相容原理;b. 能量最低原理;c. 洪特规则 |
| 内在原理 | 量子理论:原子核外电子壳层结构理论 | 量子力学:薛定谔方程 |

值得说明的是,以上二表均是一个简化表,如果从细节着眼,那么各部分都可能会有遗漏并且其间还有交错重叠部分。然而,更重要的是,因简化而达到一种抽象概括的效果,有利于抓住问题的本质。

我们重点讨论门捷列夫元素周期律(简称 MPL)向量子理论元素周期律(QTPL)的还原。按照内格尔夫的区分,理论还原分为同质还原和异质还原,量子理论向量子力学的还原是同质还原,而 MPL 理论向 QTPL 理论的还原是异质还原,从理论上讲同质还原是异质还原的特殊情况。

按内格尔夫的分析^[4]:导出原理要能还原为内在原理需要两个必要的形式条件:

(1)可连接性条件,即 MPL 中的术语能通过 QTPL 中的术语来定义;(2)可推导性条件,即 MPL 中的规律可从 QTPL 中的规律导出。当然这些形式条件的联系可能是:a. 表达式的既定意义之间的逻辑联系;b. 由特意制定的规则产生的约定;c. 是事实的或实质上的联系,即由经验证据来支持的。此外,还原还有非形式条件。MPL 理论被还原为 QTPL 的具体情况如下表所示:

表 3 门捷列夫元素周期律的量子理论元素周期律还原

| 还原条件 | QTPL + 桥接原理 = MPL | | |
|--------|---|---------------------------------|--------------------------|
| 可连接性条件 | 元素的原子序数等于原子的核电荷数 | 原子质量 = 质子质量 + 中子质量 + 电子质量 | 元素原子的顺序按原子质量大小顺序排列 |
| 可推导性条件 | 元素的原子核外电子排布的周期性 | 原子最外层电子的排布方式决定元素的化学性质 | 门捷列夫元素周期律,包括门氏的大胆预见和修正 |
| 形式条件 a | 核外电子各层容纳的电子数目等于层数(n)平方的 2 倍(2n ²) | 电子层数 = 周期数,最外层(或 + 次外层)电子数 = 族数 | 门捷列夫元素周期表 |
| 形式条件 b | 零族元素最外层电子数为 8(或 2)个 | 约定 | 门捷列夫元素周期表中第一族的过渡族,第八族过渡族 |
| 形式条件 c | 电子的发现导致原子结构(元素的原子序数 = 原子的核电荷数)、核外电子排布与门捷列夫周期律的联系 | | |
| 非形式条件 | 门捷列夫周期律还原到玻尔量子理论比还原到普朗克量子假设和量子力学意义更大 元素周期律依然没有被量子理论所代替 | | |

此表说明,从门捷列夫元素周期律还原到量子理论是完全满足内格尔夫的理论还原的两个条件的,并且这是两个充分必要条件。而对这两个条件的细致分析(分为形式条件和非形式条件的各种可能)的确实实现了从门捷列夫元素周期律到量子理论的还原。

二 门捷列夫元素周期律研究纲领和量子理论元素周期律研究纲领之间的关系

前面我们完成了从门捷列夫元素周期律到量子理论的

理论还原,这种还原是在理论层面上进行的,并且严格来说还是属于弱还原,因为“内在原理 + 桥接原理 = 导出原理”中的“=”不是通常意义上的逻辑推导,而是富有门捷列夫元素周期律特色的如图表式思维的逻辑关系,所以这种弱还原又相对较强。这种较强的弱还原还表现在两种理论的研究纲领之间的关系上。也就是说,从上面的理论还原,我们看到两种研究纲领方法论之间的关系。

在另一篇论文中,我们曾经讨论过如何将研究纲领方法论运用于化学中的原子论和电子论。^[5]本文则将同一思路进

表 4 两种元素周期律研究纲领之间的关系

| | 门捷列夫元素周期律研究纲领 | 量子理论元素周期律研究纲领 |
|-----|---------------------------|--|
| 硬 核 | 元素的性质周期地随着它的原子量而改变 | 元素原子结构决定了元素的特征。元素的原子核外电子排布的周期性决定了元素周期律 |
| 启发法 | 门捷列夫元素周期表 | 原子核外电子壳层结构理论及相应的元素周期律 |
| 保护带 | 元素原子量的测定;新元素发现的鉴定;元素性质的判定 | 原子结构模型和量子力学;化学研究的相应实验技术;其它相关学科 |

表 4 说明门捷列夫元素周期律研究纲领和量子理论元素周期律研究纲领的总体情况。门捷列夫元素周期律研究纲领的硬核是:原子量的大小决定元素的特征,正像质量的大小决定复杂物质的性质一样,而且元素的性质周期性地随着它们的原子量而改变。门捷列夫元素周期律和量子理论的元素周期律的研究纲领内部情况,限于篇幅不具体分析。下面我们讨论门捷列夫元素周期律的研究纲领与量子论元素周期律研究纲领之间的关系。从门捷列夫元素周期律到量子理论的理论还原,我们已经看出两者的研究纲领方法论关系密切,从前者到后者无疑是研究纲领的进步,是包括门捷列夫元素周期律和量子理论元素周期律的更大范围的元素周期律的研究纲领方法论中的进步的问题转换。这是整个近代化学转向现代化学的发展历史所证明了的不言而喻的事实。下面具体总结一下其转化过程。

综合表 1,表 2,表 3 和表 4,以及近现代化学发展史,我们知道从门捷列夫元素周期律到量子论元素周期律进行了一系列的“问题转换”。首先是门捷列夫研究纲领的确立,这是因为除前面讲的预测的 3 个元素——镓、铊、锗外还预测了 10 个新元素,除了两个以外全部被证实。同时,他又提出有几对相邻的元素位置应互换一下,以使它们的性质更加符合周期规律,如钴和镍应互换一下,氫和钾也要互换位置,这说明门捷列夫研究纲领将一个反面的证据变成了证实的证据。在这一过程中,他们自己造成了新的反常,但随后又解决了,他们把每一个新的困难都变成了他们纲领的新胜利。

随后,19 世纪与 20 世纪之交,由于物理学三大发现(放射性的发现,电子的发现,X 射线的发现),表面看来,已不能采用诸如在过渡位置处另列一个零族的方法来解决由惰性气体所产生的那样的矛盾一样,来消除现代的元素概念与门捷列夫元素概念及其定义特征(元素在周期系中的“位置”)之间的不协调现象。这种反常的消解是通过如下的“问题转换”实现的:

(1) 研究放射性转化时位移定律的发现,这在科学史上是为了协调放射性科学成果与门捷列夫周期系的研究基础上,由索笛和法扬斯各自独立发现的。位移定律指出: α 辐射时元素在周期系中总是向左移动两个“位置”, β 辐射时总是向右移动一个“位置”。因此,位移定律成为周期律用于放射性现象的一个新的具体的表达方式。的确,“作为位移律基础的中心概念还是那个元素在周期系中‘位置’的概念,这是纲领在理论上的问题转换。而 1918 年,根据位移定律,同时也是根据门捷列夫周期律,或者说根据门捷列夫

的元素定义,发现了镤,这是纲领在经验上的问题转换。并且两种转换都是进步的。

(2) 同位素的发现。同位素是质量不同而在门捷列夫周期系中处于同一位置上的原子。反常现象:20 世纪初,物理学家们感到,根据 α 辐射和 β 辐射的位移定律的需要,在门捷列夫周期系中同一位置上似乎有必要安置几个不同的“元素”。这样看来,除了摒弃门捷列夫的元素定义外,没有任何别的解决困难的办法了。然而人们又发现,同一“位置”上的同位素,除了原子量、放射性不同外,另一些性质竟完全相同(化学性质、光谱性质)。与此同时,发现在非放射性元素中氫也有同位素。为了消解这一反常现象,只有进行纲领的理论问题转换:今后不能再把原子量看作是定义元素的唯一特征了。

(3) 元素序数(的本质)的发现,即是元素在周期系中“位置”号码的发现。这一发现是摩斯莱研究元素的伦琴光谱特征的波长与元素在门捷列夫周期系中“位置”的关系时,计算出与该元素在周期系中的“位置”号码相符合的元素序数。“序数的发现完全证实了门捷列夫对元素周期系中排列的看法是正确的。因此,门捷列夫的基本原理(1)也是正确的。这一原理认为,定义元素的特征是元素在周期系中的位置。”^[6]这种纲领转换是进步的理论问题转换,而这一转换后,完全证实了门捷列夫关于钴和镍、氫和钾的排列预言,这是进步的经验问题转换。

(4) 核电荷的发现。电子的发现和原子核的发现,促使范登布洛夫提出:元素序数 N 等于核电荷值 Z 。核电荷 Z 的概念联结并总结了物理学中最新革命的所有三条发展路线。它解释了位移定律和同位素现象:原子在核电荷 Z 相同时,不管其质量如何,都处于周期系中的同一“位置”(同位素)。同一元素所有变种的 Z 值相等;它解释了元素序数的 N 的发现,核电荷数应等于 N 值,元素性质 Z 的存在从理论上解释了元素性质 N 的存在; Z 的发现回答了电子发现所提出的一个根本问题:一种元素的中性原子的壳内有多少个电子?显然所求电子数应等于 Z 。

可见,核电荷的发现,最终使量子理论的元素周期律研究纲领的提出成为可能。从科学史角度,序数(特征 N),特别是核电荷数(特征 Z)的发现,似乎促进了原子量重要性的最后“衰落”,并且终于取消了它作为定义元素特征的资格。这样的结果是不可避免的。首先是因为证明了化学性质并不直接依赖原子质量,而是从根本上只依赖于原子核电荷 Z (同位性),其次是因为元素在周期系中的排列,一般并不是

根据原子量值,而是根据电荷 Z 值来决定。

从拉卡托斯纲领方法论角度来看,这时门捷列夫元素周期律的研究纲领硬核:元素的性质,周期性地随着它们的原子量而变化,转换成了量子理论元素周期律的研究纲领硬核:元素原子结构决定元素的特征,元素的原子核外电子排布的周期性决定了元素周期律。

在科学史上,从1913年玻尔原子模型到1921年玻尔的《原子结构与元素的物理和化学性质的关系》的报告建立了旧量子论,并在此基础上提出泡利不相容原理、能量最低原理和洪特规则后,关于原子结构的量子理论建立了起来。从而从拉卡托斯研究纲领方法论的角度来看,相应如表4表示的启发法和保护带才建立了起来,最终转换成了量子理论元素周期律的研究纲领。

如上所述,如果把门捷列夫的研究纲领硬核中元素的主要特征,抽象为元素在周期系中的“位置”,那么由于门捷列夫的周期系的框架和量子理论的元素周期系的框架相同,其元素概念的继承性是明显的。事实上这种元素“定义”与一般公理化方法常用的隐定义十分类似,它是门捷列夫根据以周期律为基础的一般元素观建立起来的。作为门捷列夫元素定义基础的是关于元素概念和周期律之间联系的思想。门捷列夫写道:“如果原子的性质是原子量的函数,那么就这个结论来说,化学中已经基本确定的许多概念应该发生变化、发展和修改,因为关于元素的通常的观念是,元素的原子是独立的、独特的和特殊的,以致它们互相不能转化,并且每一个原子都发生自己独立的作用,这种独立作用是由它的本性决定的,现在应该提出的不是关于元素本性的概念,而是关于元素质量的概念,因此,需要进行研究的,不是元素本身所发生的作用,而是一方面把元素的作用与质量上相近的元素的作用相比较,另一方面与属于同族而不同周期的元素相比较。”^[6]这种“定义”当然不是形式逻辑中以种加属差表达的普通定义;它是“通过定律或公理表达”的隐定义的典型例子,在此,则是通过化学元素周期律表达的典型的例子。我们可以换句话说,元素的定义已由“元素的原子量大小决定元素的特征”变为“元素在周期系的位置决定元素的特征”。

从拉卡托斯的研究纲领方法论角度看,这的确是作为启发法的周期表在面对反例时,为了保护硬核中最核心的“元素的性质随……(某种内在次序)周期性地变化”而对硬核中的元素概念作为理论转换,这确实能触及硬核,但却未改变硬核的核心。更重要的是从这种转换中,我们看到门捷列夫元素周期律研究纲领方法论的核心是“元素的性质随元素在周期系的位置而周期性地变化”。正是凭借研究纲领方法论的这一核心,才实现了一系列的进步的理论问题转换和进步的经验问题转换。一直到量子理论元素周期律的硬核出现,这一硬核的核心也可表述为“元素的性质随着原子核外电子排布而周期性地变化”。总而言之,门捷列夫元素周期律研究纲领和量子理论研究纲领之间的关系是,两者的硬核的最基本部分具有同一表述形式:“元素的性质随……周期性地

变化。”

三 门捷列夫元素周期系对量子理论的科学方法论意义

门捷列夫元素周期系实质上是科学史上十分罕见的作为科学哲学中科学方法论研究的绝妙的典型案例。然而,由于种种复杂的社会历史原因,苏俄自然辩证法学者拒斥西方科学哲学,反过来西方学者对俄罗斯亦存戒心。因此,门捷列夫纲领并没有引起科学哲学研究者应有的重视,它并没有像亚里士多德物理学、哥白尼天文学、伽利略近代物理学、牛顿力学、麦克斯韦电磁理论、爱因斯坦相对论和量子力学那样得到很好的对待。鉴于这种历史背景,真正在规范的科学哲学的框架下,利用“包括形式的分析,非形式的概念分析和历史的分析等方法”的工作还几乎没有人去做。正如拉卡托斯所言:“没有科学哲学的科学史是盲目的”。本文正是在这样的指导思想指引下,从科学理论的结构观出发,具体分析门捷列夫元素周期系和量子理论元素周期系的理论结构后,实现了从前者向后者的理论层次的还原,这种理论还原为我们规范地从科学史内部比较门捷列夫周期律研究纲领方法论和量子理论研究纲领方法论打下了基础,终于在理论还原中已初露端倪的门捷列夫元素周期律的特质,在科学研究纲领方法论的合理重建和规范分析下,达到变中不变(研究纲领的问题转换)的效果且很好地显示出来,量子理论元素周期律研究纲领是比门捷列夫元素周期律研究纲领进步的研究纲领,但因两者同属于元素周期系研究纲领,它们有共同的核心,这个核心只有通过上面分析才显示出来。换句话说,门捷列夫元素周期律研究纲领的核心(硬核最内层)在量子理论元素周期律研究纲领中得以保留,这就是:门捷列夫元素周期系的研究纲领方法论内核是“元素的性质随元素在周期系的位置而周期性地变化”。其最核心的方法论是“元素的性质随……而周期性地变化”这种方法论形式。概括地说,门捷列夫元素周期律是能展示科学哲学通用原理的精细结构的绝妙案例。这正是门捷列夫元素周期律的最重大的科学方法论意义所在。

【参 考 文 献】

- [1]江天骧. 哲学评论[M]. 武汉:武汉大学出版社,2001(1).
- [2]张华夏. 解释·还原·整合 - M. 邦格的某些科学哲学观点述评[J]. 自然辩证法研究, 1987(2).
- [3](苏)B. B. 涅克拉索夫. 普通化学教程[M]. 北京:人民教育出版社,1956. 205.
- [4](美)欧内斯特·内格尔. 科学的结构[M]. 徐向东译. 上海译文出版社,2000. 413 - 438.
- [5]桂起权. 科学研究纲领方法论与化学的原子论和电子论[J]. 武汉大学学报(社). 2002(4).
- [6][7](苏)凯德洛夫. 化学元素概念的演变[M]. 北京:科学出版社,1985. 174、140.

(责任编辑 成素梅)