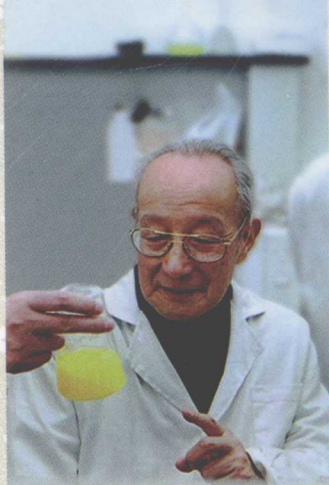




卓越科学家的工作与创新方法系列研究丛书

刘大椿 主编



# 化学大师 徐光宪

朱晶 著

**走近科学大师，聚焦创新方法**  
为你讲述科学大师因创新方法而卓越的力作！

 **中国科学技术出版社**  
CHINA SCIENCE AND TECHNOLOGY PRESS

1562595



卓越科学家的工作与创新方法系列研究丛书

# 化学大师 徐光宪

刘大椿 主编  
朱 晶 著

中国科学技术出版社

· 北 京 ·

## 图书在版编目 (CIP) 数据

化学大师: 徐光宪 / 朱晶著. —北京: 中国科学技术出版社, 2012.1

(卓越科学家的工作与创新方法系列研究丛书 / 刘大椿主编)

ISBN 978-7-5046-5947-7

I. ①化… II. ①朱… III. ①徐光宪—人物研究 IV. ①K826.13

中国版本图书馆CIP数据核字 (2011) 第250895号

策划编辑 郑洪炜  
责任编辑 李 剑  
责任校对 孟华英  
责任印制 王 沛

出 版 中国科学技术出版社  
发 行 科学普及出版社发行部  
地 址 北京市海淀区中关村南大街16号  
邮 编 100081  
发行电话 010-62173865  
传 真 010-62179148  
投稿电话 010-62176522  
网 址 <http://www.cspbooks.com.cn>

开 本 787mm×960mm 1/16  
字 数 210千字  
印 张 12.75  
版 次 2012年1月第1版  
印 次 2012年1月第1次印刷  
印 刷 北京长宁印刷有限公司

书 号 ISBN 978-7-5046-5947-7/K·100  
定 价 26.00元

(凡购买本社图书, 如有缺页、倒页、脱页者, 本社发行部负责调换)  
本社图书贴有防伪标志, 未贴为盗版



科技部创新方法工作专项项目[2008IM020100]

## 编委会

主任 刘大椿

委员（按姓氏笔画排序）

王伯鲁 王鸿生 任定成 刘永谋  
刘海波 吴彤 林坚 高策

# 总序 TOTAL ORDER

刘大椿

科学发现，技术发明，都是创造性事业，它们需要特定的环境条件，更端赖有特定素养的人，但在所有的创造性要素中，最不可须臾忽缺的，就是不与前人和周遭同仁雷同的原始创新。而原始创新，最重要的还是创新方法。

创新方法研究的直接和最终目标，在于正确把握科学思维、科学方法、科学工具的意义和作用，确立科学思维创新、科学方法创新、科学工具创新的具体机制，提高我国科技工作者和公民的科学素养。

呼唤创造性，提倡原始创新，不能不关注创新方法，但切不可抱持一蹴而就、马到成功的浮躁心态，因为，并没有一种放之四海而皆准的、可以清楚总结出来作为规范的所谓创新方法。如果有的话，创新就不在话下，而能把这种创新规范倒背如流、熟练掌握的人，也将是万能的科学创造者了。但这在实际上，不就是等于取消了创新吗？

那么，我们该怎样研究和讨论创新方法呢？

## 从科学方法的规范性研究到创新方法的启发式研究

自近代科学产生以来，世界许多科学家和方法论专家特别关注科学方法的意义和具体运用，近、现代科学史上许多重大科学发现本身就是科学思维、科学方法或科学工具上的创新。

在我国，关于现代科学方法的研究则兴起于20世纪二、三十年代。新中国成立以来，这方面的研究主要又集中在三方面：一是自然辩证法学界对科学方法的研究，二是国内科学家针对特定学科领域进行的科学方法研究，三是译介国外学者关于科学方法的论著。大致上，国内学者关于科学方法的研究比较注重对科学认识逻辑和理论思维方法的研究，侧重于对一些基础性科学研究方法的历史性描述与总结，而对于科学方法的创新性则相对忽视，并且缺乏与科学家具体科研实

实践的紧密结合。

方法之于科学，重要性不言而喻，只是人们未必知道，这种重要性同时还带来了科学家在解决问题、扩展知识的过程中应当遵循某种规范的信念。长久以来，科学被视为人类理性事业的绝对典范，而方法，正是科学取得成功的根本保证。在认识层面，方法规定了获得真知的规则和程序，在实践领域，方法又明确了达至具体目标的途径与工具，于是，人们就将这样的科学方法认定为最佳，而作为规律性知识和实践模式之集中体现的方法程式，自然也就成为人们尽力依循的标准，乃至努力追求的目标。

不仅如此，基于方法与科学之间的直接联系，许多人在一定程度上把科学等价于方法，认为使一种研究成为科学的那种东西，不是这种研究所涉及的事物的本性，而是这种研究用以处理这些事物的方法，如此，就连评判科学的标准也可以约化成方法。相当长期间的科学方法研究，或说科学方法论，就一直试图寻找这样的标准，以期最终能用那些不变的、应绝对遵守的原则和方法来从事科学研究。

然而，这种对方法论标准的寻求和程式化努力，却在20世纪以来的科学演进中变得不复绝对有益。这一时期，人类的认识视野急剧推进，认识背景从以感觉知觉转变为以思维操作为主，科学理论的建构性成分越多，对观察现象与科学事实的理解便越难统一。在这样的背景下，科学方法标准观念的设定日显不着边际，相反，让方法成为活生生的、可以成长的工具或手段的理念则大得人心。

这也就是说，科学事业愈向前推进，方法多元化的发展格局就愈清晰，创新方法研究的重要性也愈发迫切。然而，对于这样一种旨在提示人们寻求科学探究更好途径的创新方法研究，原来那种以制定常则为目的的规范性研究方式已经不够了。如果说此前科学方法论采用规范性研究方式尚能有所斩获，因为规范性研究可满足在认识论意义上对“结构”与“规律”等方面的需要，而如今，想要围绕创新方法的实际运用做些扎扎实实的事情，规范性方式的短处就暴露无遗了。

首先，真正的创新通常是不合逻辑的，围绕创新方法问题，即使能够措辞严谨地给出界定和解释，对于我们切实了解和把握它，实际上也不会有太多具体的帮助。其次，纵然一般方法论规则对于概括和明晰认识规律有一定的必要，但它们的意义也仅限于此，创新方法研究的目的绝不仅仅是为了揭示这些一般性的适用原则。就好比 we 开车到一个地方去，交通规则和驾驶技术尽管都是必要的，但并不意味着我们因此就知道如何选择一条最短的路径到达目的地。最后，一切

科学方法论事先设定的规则，即便不是禁令式的，也只能限于一种消极、机械的表述，并不能结合千变万化的情况而激发出人们积极的创新能力，而后者，恰恰才是创新方法研究为之努力达到的目标。

总之，创新方法研究不是要制定传统科学方法论意义上的普遍的、规范的和确定的常则——在貌似有章可循的指令之下，似乎每个人都能为此做点什么，但实际上却没有谁能最终做出些什么来——我们的研究要竭力避免这样的结果。然而，这也不是说人们只能望“法”兴叹，事实上，创新方法即便不能按照某些规定加以实现，但也绝非凭空而至之事。一种富有成果的创新方法研究，就是要将任何有可能帮助实现创新的异质性因素转化为实际启发创新的内在要素。

对于方法，既可以从规范性意义上去理解，也可以从启发式意义上来理解。当以区别科学方法与非科学方法作为主要目标时，比较流行的是从规范性意义上理解，然而，一旦进入真正科学发现或技术发明的实践层面，规范性意义上理解的科学方法是无法自动带来创新的，一味拘泥于此理解，反而可能导致落后和失败，这时，从启发式意义上来理解的方法就是必要的了。

基于这样一种理解上的区分，传统的科学方法论与当下创新方法研究的目标便易于区别了。传统的科学方法论，其目标是认识论的，即从逻辑上重构科学研究的逻辑过程，是面向过去的解释理论，追求普遍性。当下的创新方法研究则立足于对创新实践有所启发，是面向未来的指导理论，追求启发性。抑或可说，创新方法研究具备一种实用的和直接指向行动的研究目标，尽管它所追求的启发性根本不能达到普遍性的高度——往往只能在某个狭窄领域或具体问题上重复使用，或者仅仅是具有启发意义——但它依然称得上是某种对创新的实质性支持；至于科学方法论，其关于科学过程的认识论重构再完美，对于未来的创新方法实践都只能是基础性的。

作为一种启发式的分析，创新方法研究因此只能是“助成法”而不是“必成法”，“这样必定成功”和“怎么都会成功”都是不合理的设定，正确的理解是“这样较易成功”。基于对创新方法研究定位的这种明确认识，我们就主张用“助发现”作为创新方法研究本身的方法论指导，因为试图建构一种完全确定的、机械的甚至逻辑演算的创新方法体系是不可能的，启发式的创新方法更多是间接的帮助，而不是直接的操作。于此，找到一种能够更好地体现、贯彻“助发现”思想的具体研究方式，从而把那些不容易讲的、但又值得讲的东西彻底讲清楚，就成为我



们的当务之急。这种方式已经找到了，就是创新方法的范例研究方式。

## 为什么选择范例研究方式？

创新方法问题不论如何复杂，如何充满悖论，因事关科学创造性，人类不可能在科学技术实践中盲目地撞大运，所以必定会仔细讨论和审度创新方法。与实践联系十分密切，对方法的研究自然也就是一种实践性较强的研究——它不仅具备一种实用的和直接面向行动的研究目标，而且也需要用丰富生动的实践来加以说明和解释。显然，客观地考察创新方法这样不确定的东西的企图本身，从一开始就包含着一种矛盾：对于今后未可知的结果，谁也无法说出如此这般就是新方法所必须的。换言之，人们即便只是一般地谈论它，也只能在科学发现的事后进行推断或研判。所以，不得不承认，围绕创新方法的任何探讨都无法不限于科学家的实践，只有它们，才是对当前和未来都有深刻意义的重要经验。

说一种研究具有很强的实践性，那就意味着，作为研究者，我们一方面要深入实践，另一方面也要有适当的话语方式接近实践。结合近年来人文社会科学领域这类实践性较强的研究中所出现的叙事转向，我们认为，方法论也同样面临着一个从逻辑的哲学式话语向经验的叙述式话语的转向问题，质言之，坚持扶助、激发和培育等启发式思路的创新方法研究，必须悬置传统的逻辑重建追求，代之以一种类似“解释学循环”的情境性方式。

如果说方法研究就是从科学家的历史经验中选择那种在后来的经验中富有成效并具有创造性的经验，那么，现实情况却是，方法研究的理论进路不等于、且无法替代从方法实践中获取经验的方式，常规的逻辑框架也根本不能将一位科学家进行方法探究的过程或细节叙述详尽。在这种情况下，研究者只有提供一种具有生活语言风格的研究文本，或者说经验的叙事方式，才能改变自上而下的视角，而让读者更深入地走进历史现场，揭示在规范研究下已被过滤掉和被遗忘的真实过程和细节，从而更加接近对创新方法之运用的实质性理解。

就这样，一种经验研究的典型方式——范例研究进入我们的视野之中。这种问世不久就显示出重要价值并风行于诸多领域的研究方式，由于可以提供扎根于实践的具体经验，因此在满足那些极具复杂性、过程性等特点的实践问题的研究



方面有着其他研究方式难以企及的优势。

概而言之，创新方法不是一种传统科学方法意义上的普遍的、规范的和确定的常则，更多的是一种启发式的、助发现的、支持性的东西，至少包括理念上的、逻辑上的、心理上的、制度上的和文化上的各种可重复的“帮助”或“方法”。

启发式的创新方法论追求对未来创新活动的实用性指导，寻找能在一定程度上可重复、可启发和可操作的“方法”。也就是说，创新方法不等于科学方法，科学方法属于创新方法的组成部分，不能把创新方法仅仅作为认识活动或科学方法来研究。

启发式的创新方法论并不指望规范未来的创新活动，相反它恰恰指望在过去轨迹的基础上突破过去。所以，在实际运用中，创新方法必定要出现变形、扭曲甚至倒置的情形，不可能完全地重复。这种不完全重复恰恰是启发式的创新方法论所要求的，即对创新方法的运用不是重复，而是又一次的创新。能够给新的创新以更多帮助的创新方法，就是好的创新方法。

启发式的创新方法坚持扶助、激发和培育的思路，悬置客观性、真理和逻辑的追求，因而不排斥经验归纳法。然而启发式的创新方法论对过去的归纳不是为了重复过去，而是汲取过去的智慧，并以此为基础再创造。所以，这里并不存在经验归纳与未来重复之间的矛盾。并且，从本质上看，启发式的创新方法研究只能走经验研究的道路，而不是走逻辑研究的道路。换言之，经验归纳、总结和一定范围的普遍化是创新方法研究的基本方法，不同于科学方法研究的逻辑重建方法。

在启发式的创新方法论背景下，创新心理研究、创新制度研究和创新文化研究等对创新方法的非逻辑研究当然属于创新方法论的范围。创新心理研究要解决的核心问题是：如何使个体达到最佳的创新心理状态？创新制度研究要解决的核心问题是：如何建构一种使群体达到最佳的创新心理状态的制度？创新文化研究要解决的问题是：如何培育一种激发创新的文化环境？因此，创新方法研究是异质性的、复杂性的，各个分支在主旨、视角以及问题域、应答域上差异很大，启发式的创新方法论不以一个逻辑严整的理论体系为目标，严守帮助创新的实用性诉求。

关于创新方法的最好展示，是回到科学本身。科学范例作为人类进步阶梯上的宝贵足迹，其间蕴藏着很多人所梦想的发现之艺术，它们因独特性地展现了对象世界的经验现实而彰显出自身的杰出性。当研究围绕某个范例的展开，能够结

合具有生活化特征的日常经验情境进行关于科学探究过程的整体性描述时，读者也就进入了一场对这些发现艺术的从头到尾的“边缘参与”之旅。这个过程中，人们即便不是直接经验，也仍然可以对某项发现的具体过程进行一次全面、动态的观摩，若再反复研究，洞察其幽，也就能领会到方法创新的实践诀窍和“秘密”技巧，从而发展出自己的默会知识与能力，所谓细节之处见真章，范例研究的这一点，是其他方式所不能比拟的。

另一个显而易见的成果，还在于范例研究能够给人们指出各种最有希望的途径，我们称之为创新法则指南。纵然一举使人的大脑变聪明并在短时间内实现创新是不可能的，但如果我们起码了解了避免失败的方式，那么是可以取得真正的改进的。再则，从不同的思想途径得以交汇的观点出发，入乎其内，出乎其外，人们便可以用比较自由的视角环视周围，发现前所未有的道路。

此外，范例研究中充满人性的原始材料无疑也是有趣和感人的，这会帮助人们在更近的距离以内，感受科学家的人格魅力，消除多数人头脑中也许存在的对科学家的刻板印象，从而恢复科学的人性形象。与此同时，范例还有助于唤起人们从事创新的巨大激情——了解伟大发现的一个重要后果，就是其他人受到鼓励去追寻更多的发现之艺术，从而源源不断地培养出承继科学事业的后来者，在感召的意义上，范例研究这样的方式将拥有大量的受众。

总之，如果没有具体的范例，关于科学进步怎样取得、科学探究如何进行的概括就将是空洞的，从而谈不上有何启发，人们更是无从体会科学的永恒创新及其人道价值。征之于智慧意义的示范性与美学意义的感召力，我们的研究最终才能从根本上有助于人们对创新方法本质的理解和对科学实践要旨的传承。

## 本课题对创新方法范例的遴选

应该说，最具显示度并易于理解和普及的范例是卓越科学家的创新方法范例，而人以事带，通过对卓越科学家事业、人格、思想的概括和分析，生动而具体地展现创新方法的实际运用和重要作用，也是本课题的着眼点。具体说来，由于国内关于创新方法的研究，较为缺乏与自身文化传统和科研实践结合，学理探讨远远多于范例研究，因而更要结合本国科学方法发展的实际多做工作。作为科

技基础性工作专项项目研究，本课题将遴选的范围圈定在本土（包括华裔）的著名科学人物中间，且以刚刚过去的一百年中的科学家为主。如所周知，我国的学问家和发明家昔日有过辉煌的成就，这种荣光在20世纪后得以复活亦有目共睹，作为整个中国现代科学技术史最重要的时期，20世纪的中国科学技术事业，不仅成果源源不尽地汇入人类文明史册，而且达至这些成果的创新方法也奇光闪耀。

有关范例的选择，本课题具体采取了综合范例研究这一复杂方式，它研究的不是一个而是多个范例。具体而言，所选取的范例涵盖数、理、化、农业、工程、高科技、人文及领军型、领袖型等多种学科和类型的卓越科学家，以图较好地反映创新方法在我国过去一百年最顶尖的科学工作中的关键作用。

应该说，这种做法对于较大程度地提升创新方法范例研究成果的通用性有很大帮助。通用性，即指从范例研究中得出的相关教益完全可以外推到相似的其他情境中。本来，作为一种以特殊体现普遍、以具体反映整体、以少见多的形式，每位科学家的创新方法范例不仅可以看做是他自己的一个独特系统，还可同时展示创新方法的共同特征。而不同范例涉及不同学科领域的创新方法，此种有意为之的差别将使得研究结果的解释性更加引人注目。也就是说，通过对一系列主题相似而内容不同的范例的审视，人们不但可以理解一个单一范例如何展开以及为什么它会如此展开，而且，还可以通过不同类型范例的互相参照和彼此印证，加强研究成果的精确性、稳定性以及有效性。一言以蔽之，多范例的根本意义就在于它提升了研究成果所具有的后见之明。

当然，一旦具体进入到某个范例的研究，这种以人带事的方式很可能因为容易面面俱到而导致与主题的疏离。为此，我们规定，以创新方法为主题展开的范例研究，研究者关注的必须是与创新方法有紧密关联的方面。也许对象、事件、情境因范例不同可能有很大变化，但主要的观察视角在这些范例中必须保持核心地位，创新方法始终站在事实材料的前面。这样的特别强调，将免于造成因关注大量历史细节而淹没课题中最重要的事情，始终不离开创新方法范例研究这个核心。

尽管创新方法的范例研究不能包含所有科学探究和创新方法的事件、历程，研究者中的每一个人也只能对少数范例或者范例的少数成分作出贡献，但随着时间的流逝，通过这种个人贡献的叠加和对范例理解的增进，人们就有可能以一种更深刻的方式达到对科学及其进步方法的把握。开始时那种似乎混乱并且像随意组合的东西，最终将呈现出一种比较有条理的格局，正是这一点，构成了创新方

法范例研究作为一项科学研究的基础。

总之，创新方法范例研究作为一种叙事性的探讨，其目标在于，哪怕通过并不被认为是系统化的努力，也要让人们在某种程度上理解，没有所谓一成不变的创新方法。因此，他们就会接受类似“任何可以解决问题的方法就是好的方法”这样的观点，修正此前关于科学方法的概念框架，从而增大创新发生的可能性。

在对研究思路进行梳理和总结，对卓越科学家的工作和创新方法进行缜密调研的基础上，本课题研究形成了十个子课题，最终推出了当下这样一套多卷本的系列著作，总称之为《卓越科学家的工作与创新方法系列研究丛书》。其中，《范例研究：科学大师与创新方法》是对创新方法范例研究的一个宏观而实际的阐释，突出科学大师的范例如何有助于加深对创新方法的理解，并对范例研究的意义以及范例研究怎么做等问题进行前提性的交代。它在勾勒基本问题的意义上，应是无愧于后续卷本的领衔之作。其余九本都是具体的创新方法范例研究之作。首先呈现给大家的是方正大师王选和育种大师袁隆平、李振声，他们所提供的创新方法范例极具时代感和说服力；相应的两本书是《方正大师：王选》和《育种大师：袁隆平、李振声》。接着是基础学科物理、化学、数学方面的大师，物理选了杨振宁，化学选了徐光宪，数学则选了华罗庚、陈省身、吴文俊三位院士，他们的成就都是代表性的，在创新方法领域亦多有亮点；相应的三本书是：《物理大师：杨振宁》、《化学大师：徐光宪》、《数学大师：华罗庚、陈省身、吴文俊》。再接着是在我国科技发展的举国体制中作出卓越贡献的两类科学家，即两弹一星领军科学家钱三强、钱学森、赵九章，以及战略性领袖科学家王大珩、叶笃正、刘东生，这些院士在自己的专门领域的成就也是首屈一指的；相应的两本书是：《领军科学家：钱三强、钱学森、赵九章》、《领袖科学家：王大珩、叶笃正、刘东生》。最后两本选取的是工程和人文两方面的重要科学家，工程巨匠以当代桥梁大师为范例，人文大师以20世纪上半叶在巨变时代做出奠基性工作的人文学者为范例，写的都是一组人和事；这两本书是：《桥梁大师：辉煌业绩与创新方法》、《人文大师：奠基性研究与创新方法》。当然，本课题所选取的虽然都是有分量的科学家，但肯定不全面，只能算挂一漏万。唯望对科学大师创新方法的范例研究，人们能首肯：“这是有意义的第一步。”倘如此，则所有的付出都可以忽略不计了。

# Contents 目录

总序//刘大椿 .....	I
前言 .....	1
<b>第一章 徐光宪的多彩人生与科学贡献</b> .....	4
<b>一、人生际遇与研究经历</b> .....	4
1. 坎坷的求学经历 .....	4
2. 方向多变的研究经历 .....	7
3. 霞光情缘与学术共进 .....	10
<b>二、《物质结构》与《量子化学》教材</b> .....	12
1. 《物质结构》教材的四大特点 .....	12
2. 《量子化学》教材——理论与方法、入门与研究并重 .....	15
<b>三、量子化学与配位化学研究</b> .....	16
1. 量子化学和化学键理论 .....	17
2. 配位化学 .....	19
<b>四、萃取化学与稀土化学</b> .....	20
1. 核燃料和稀土萃取化学 .....	20
2. 稀土串级萃取理论及其应用 .....	21
3. 科学影响——培育稀土企业 .....	22
4. 稀土生物无机化学与材料化学 .....	24
<b>五、哲学与科学研究方法的思考</b> .....	26
1. 关注科学研究与创新方法 .....	26
2. 在化学之外——化学哲学与科学史 .....	27
<b>第二章 化学哲学的思维创新</b> .....	29
<b>一、哲学物质与科学物质</b> .....	29
1. 哲学物质的自然科学基础 .....	29

2. 质能联系与质能转化 .....	31
3. 物质、能量与信息、信息量 .....	33
4. 化学物质的运动 .....	35
<b>二、对共振论的评论与反思 .....</b>	<b>36</b>
<b>三、科学理论有适用范围 .....</b>	<b>40</b>
1. 实验验证范围有限度 .....	40
2. 量子力学与新旧理论替代 .....	41
3. 科学假设、抽象与事实 .....	42
<b>四、实验与理论关系的多重处理方式 .....</b>	<b>44</b>
1. 实验与理论的新关系 .....	45
2. 由实验推导出理论——稀土配合物的合成、结构测定与 萃取机理 .....	46
3. 通过实验检验与改进理论 .....	47
4. 实验与理论出现矛盾——新理论的提出与检验 .....	49
5. 分子片、原子簇理论指导下的新实验研究与计算 .....	50
<b>小结 .....</b>	<b>51</b>
<b>第三章 学科交叉的方法创新 .....</b>	<b>53</b>
<b>一、从物理学看化学，从化学看物理学 .....</b>	<b>53</b>
1. 独特的课程与教材名称——物质结构 .....	53
2. 从方法论看化学与物理学 .....	54
3. 从认识论看化学与物理学 .....	56
<b>二、计算化学作为理论研究的工具 .....</b>	<b>59</b>
1. 逻辑思维与化学训练 .....	59
2. 利用数学解释物质结构与性能的关系 .....	61
3. 数学计算建立稀土串级萃取理论 .....	63
4. 量子化学研究计算程序开发 .....	65
5. 数学计算推导与检验有机同系能级线性规律 .....	66
<b>三、建立物理模型探索化学结构 .....</b>	<b>67</b>
1. 三中心模型与旋光理论 .....	67
2. 量子/分子力学模型与分子结构 .....	68

小结 .....	69
<b>第四章 串级萃取理论及工艺创新 .....</b>	<b>71</b>
<b>一、稀土元素及稀土分离 .....</b>	<b>71</b>
1. 稀土元素及其特殊性质 .....	71
2. 稀土分离的难点 .....	73
<b>二、串级萃取理论及其应用 .....</b>	<b>74</b>
1. 萃取技术实现镨钕分离 .....	74
2. 皂化萃取体系与恒定混合萃取比新理论 .....	76
3. 串级萃取理论的建立及应用 .....	77
4. 串级萃取理论的计算机模拟、回流启动与三出口工艺 .....	79
<b>三、稀土分离技术拓展与自动控制 .....</b>	<b>82</b>
1. 稀土料液浓缩新方法 .....	83
2. 共错流反萃技术与联动萃取新理念 .....	84
3. 串级萃取理论适用范围的扩大 .....	84
4. 从静态设计到动态仿真 .....	85
<b>四、理论与实践——机理探讨与技术应用并行 .....</b>	<b>86</b>
1. 萃取反应机理与稀土分离 .....	87
2. 模拟实验与扩试 .....	88
3. 新萃取剂及新萃取体系的开发 .....	90
4. 稀土配位特性与稀土功能材料合成及应用 .....	92
5. 合作交流与知识产权保护 .....	94
<b>五、巧借理念、建立模型、虚拟现实 .....</b>	<b>96</b>
1. 数学模型、计算机模拟与萃取工艺设计 .....	96
2. 模型分子与实用萃取剂的获取 .....	99
3. 借鉴回流萃取操作理念 .....	100
4. 神经网络和树结构概念应用于稀土分离 .....	101
小结 .....	101
<b>第五章 分类学的方法创新 .....</b>	<b>103</b>
<b>一、建立自己的知识框架 .....</b>	<b>103</b>



二、多维分类、泛分子与分子片思想 .....	106
三、探索萃取体系与稀土配合物的分类法则 .....	109
四、利用新世纪的中药铺抽屉——化学信息学 .....	111
小结 .....	112
<b>第六章 独特的方法学：方法与工具创新 .....</b>	<b>114</b>
<b>一、关注难题——抽屉中放入问号 .....</b>	<b>114</b>
1. 选题三要素——关注科学前沿、立足基础研究、面向国家目标 ..	115
2. 治学三境界——问题、勤奋与灵感 .....	118
3. 研究须三气魄——信心、勇气与志气 .....	121
<b>二、逆向思维——“倒行逆施法” .....</b>	<b>123</b>
1. 变宏观为微观——从分子水平研究萃取机理 .....	124
2. 变配角为主角——从水的存在状态探讨萃取过程 .....	125
3. 变精确为模糊——纳米尺度与量子化学近似 .....	126
<b>三、应用范围扩大——“四两拨千斤法” .....</b>	<b>127</b>
1. 扩大两项滴定法的应用范围 .....	128
2. INDO法推广应用于含镧系元素化合物 .....	129
3. 类比与稀土的生物学效应 .....	131
<b>四、多种光谱学仪器的使用与改进 .....</b>	<b>132</b>
1. 谱学方法引入溶剂萃取研究 .....	132
2. 综合使用多种仪器 .....	134
3. 仪器与测定方法改进 .....	135
<b>五、实验与计算方法要简单、精确度高 .....</b>	<b>137</b>
1. 放射性同位素跟踪法研究金的反萃 .....	138
2. 极谱测试设备与数据处理方法的改进 .....	138
3. 改进分析与计算方法 .....	140
4. 简单方法制备特殊物质 .....	141
5. 重复实验与多重实验方案 .....	142
<b>小结 .....</b>	<b>144</b>
<b>结语 .....</b>	<b>146</b>

一、徐光宪科学方法的阶段性特征 .....	146
1. 科学方法与研究目标导向：从应用研究到基础研究 .....	146
2. 科学方法与学科特征：从实验研究到理论研究 .....	147
二、徐光宪科学方法的总体特点 .....	148
1. 在探讨化学哲理与基本问题的基础上进行思维和方法创新 .....	148
2. 利用分类学进行思维和方法创新 .....	149
3. 利用数学计算、模型与仪器进行工具创新 .....	149
三、创新方法研究的社会文化进路 .....	150
参考文献 .....	152
附录 .....	168
一、徐光宪大事记 .....	168
二、人名译名及科技名词缩略语对照表 .....	181
后记 .....	183