

从元素分析造假漏洞入手严把国外来稿学术质量关

蒋 晓 晖

(中国科学院上海有机化学研究所联合编辑室 Chinese Journal of Chemistry 编辑部, 200032, 上海)

摘 要 为了确保化学类期刊的学术质量,应当杜绝元素分析实验值的造假行为。审稿人和责任编辑对每一个新化合物的元素分析数据都应认真审核。一旦发现造假,则应坚决退稿。

关键词 元素分析;实验值;数据造假;编辑学术把关

Academic quality control over foreign submissions to Chinese Journal of Chemistry through recalculating and checking their elemental analysis data//JIANG Xiaohui

Abstract In order to guarantee the academic quality of chemical periodicals, fabrication of elemental analysis data should be examined and prevented. Once a data fabrication is detected via such a means, the corresponding manuscript should be rejected without any hesitation and the author(s) be included in the black list.

Key words elemental analysis; found value; data fabrication; editor's academic control

Author's address CJC Editorial office of Shanghai Institute of Organic Chemistry, Chinese Academy of Sciences, 200032, Shanghai, China

作为一种 SCI 收录的化学类学术期刊^[1],《Chinese Journal of Chemistry》正越来越多地吸引着国外投稿。我们发现,这些稿件除了英文文字表达较差外,有的还存在着严重的实验数据造假问题。这引起了我们的高度重视,必须严加防范。

1 元素分析造假

对于经分离纯化后得到的一个未知化合物,元素分析是确定其纯度和元素组成,进而辅助确定其分子结构的重要手段之一^[2]。对于稿件中报道的每一个新化合物,都必须进行元素分析或高分辨质谱的量化检测。一般元素分析理论计算值与实测值之间的误差不得超过 $\pm 0.4\%$ ^[3-6]。

根据笔者的经验,一种新化合物,特别是一种油状的新化合物,其元素分析要得到通过往往不是那么容易的,除非是一种可以通过重结晶提纯的固体,否则往往需要反复多次的蒸馏干燥纯化后才能通过;但在一些国外来稿中,表面上看元素分析的实测值却与对应的理论计算值吻合得非常好,有些甚至于好得令人难以置信(比如误差仅为 $\pm 0.05\%$)。特别是当作者把一个新化合物的分子式搞错后,给出的该物元素分析实测值却仍然奇怪地与基于该错误分子式的元素分析

理论计算值很好地吻合。对这种奇怪现象的唯一解释,显然就是这些“实验值”不是真正实测出来的,而是投稿者为了拟合那弄错了的元素分析理论计算值随意捏造出来的。这样一来,这种弄虚作假的拟合也就授我以柄,留下了一个造假漏洞。只要我们不被稿件中“数据良好”的表面现象所迷惑,而是认真地从审核每一个结构式和分子式的正确性出发,重新地计算其元素分析理论值,并与所列的元素分析实测值加以对照,就不难发现这种造假漏洞。既然元素分析数据是如此随意捏造出来的,谁又能相信包括波谱数据在内的其他数据是真实可靠的呢?因此,一旦发现元素分析数据这种弄虚作假的拟合,就应从这一造假漏洞入手,核实后坚决退稿,并将造假者列入黑名单^[7-8]。

2 造假种类

据笔者长期观察,导致元素分析数据这种虚假拟合的元素分析理论计算值出错的情况有以下 4 种。

1) 结构式和分子式都正确,但由于作者粗心大意或不太熟悉,在计算过程中把元素分析理论值算错,而所列的元素分析实测值却仍然与此错误理论计算值很好地吻合。例如,一个简单化合物 1 的示性式为 $\text{HOC}_6\text{H}_4\text{CONHNHCSNH}_2$, 分子式则为 $\text{C}_8\text{H}_9\text{N}_3\text{O}_2\text{S}$, 正确的元素分析理论计算值应为 C—45.49, H—4.29, N—19.89, S—15.18。但作者却错算成 C—43.12, H—5.33, N—17.98, S—16.52, 跟着列出的元素分析实测值为 C—43.35, H—5.17, N—18.25, S—16.30, 即实测值奇怪地不与正确计算的元素分析理论值却与错误计算的理论值很好地吻合。

2) 结构式出错,分子式也跟着出错;尽管接下来的计算过程不错,但得到的理论值仍是错误的,而所列的元素分析实测值却仍然与此错误理论计算值很好地吻合。仍以化合物 1 为例,作者把该化合物的示性式错为 $\text{HOC}_6\text{H}_4\text{CONHCSNH}_2$, 得出对应的错误分子式为 $\text{C}_8\text{H}_8\text{N}_2\text{O}_2\text{S}$, 以及错误的理论计算值为 C—48.97, H—4.11, N—14.28, S—16.34, 跟着列出伪造的拟合实测值 C—49.14, H—4.35, N—14.51, S—16.68。

3) 结构式不错,但由于数错氢原子和(或)碳原子等数而导致分子式出错;尽管接下来的计算过程不错,但得到的理论值仍是错误的,而所列的元素分析实测

值却仍然与此错误理论值很好地吻合。仍以化合物 1 为例,作者把该化合物的分子式错为 $C_9H_7N_3O_2S$,从而得出错误的理论计算值 $C-48.86$, $H-3.19$, $N-18.99$, $S-14.49$,跟着列出的是伪造的拟合实测值 $C-48.52$, $H-3.01$, $N-19.23$, $S-14.75$ 。

4) 对于一系列的同系物,画出的结构式与写出的分子式均不错,前面 1 个乃至几个同系物的元素分析理论计算值也不错;但当进到更高一个同系物进行理论值计算时,往往会漏掉应该追加的某些成分,仍然按前一个分子式那样去计算,从而得到错误的元素分析理论计算值,但所列的元素分析实测值却仍然与此错误理论计算值很好地吻合。例如,笔者在最近审查一篇土耳其的来稿时,发现稿面上每个新化合物包括元素分析数据在内的所有分析表征数据都“挺好”,审核结构式和分子式也没有发现什么问题,但当重新核算这些分子式的元素分析理论计算值时,投稿者造假的马脚终于露了出来。这是一篇关于 3 个新型配体 HL^i ($i=1,2,3$) 及其金属 $Ni(II)$ 、 $Co(II)$ 、 $Cu(II)$ 和 $Zr(IV)$ 配合物合成的报道,所有 2 价金属配合物 ML^i_2 的元素分析数据都没有漏洞,但 3 个 4 价金属 $Zr(IV)$ 配合物 $ML^i_2Cl_2$ 的元素分析理论计算值与写出来的对应 3 个正确分子式 $ZrL^i_2Cl_2$ 均不符。经过仔细分析后发现,原来这些错误的元素分析理论计算值并不是根据写出来的正确分子式 $ZrL^i_2Cl_2$,而是基于分别漏掉了 2 个应追加的氯原子后的错误分子式 ZrL^i_2 计算出来的。可以肯定,这是作者采用批量计算法在从 2 价金属配合物过渡到 4 价者时,只记得将中心金属原子换为 $Zr(IV)$,而忘掉了 2 个起电荷平衡作用的氯离子,从而仍按 2 价金属配合物的格式 ML^i_2 错误地计算该 4 价金属 $Zr(IV)$ 配合物 $ZrL^i_2Cl_2$ 的元素分析理论值。虽然这种遗漏是在不知不觉中发生的,也是人们常犯的一种错误,但问题是作者在这种情况下发现理论计算值与实测值(如果真的实测过的话)严重不符时,首先应该仔细检查一下结构式、分子式及计算过程的每个细节是否出错,而不能随意修改或伪造实测值去迎合这种可疑的理论计算值。

3 造假检测与编辑责任

以上 4 种元素分析造假漏洞中,第 2 与第 3 种通过简单地核查结构式与分子式的正确性便可发现,但第 1 与第 4 种必须通过独立地重新核算元素分析理论计算值才能发现。令人担忧的是,现在认认真真地核算元素分析数据的审稿者越来越少。在这种情况下,稿件的责任编辑应当积极主动地承担起这一重要职责^[9-11]。好在 ChemDraw 等化学软件都附有计算相对

分子质量及元素分析理论值的强大功能,可以大大地节省手工计算的时间和精力。

实践是检验真理的唯一标准,实验则是检验理论假设是否正确的唯一手段。如果元素分析的实测确实过得硬,而且结构式、分子式及计算过程的每个细节也没有问题,实测值与假设产物理论计算值互不相符现象的背后往往隐藏着科学技术的新发现与新发明。这时责任编辑应该清醒地提醒作者要反过来审视所假设产物的正确性,并综合其他实验数据,大胆地提出全新的产物,达到学术创新的目的。日本现代著名金属有机化学家山本明夫正是从元素分析实测值与所假设产物理论计算值始终不符的事实出发,勇敢地推翻了自己原先的假设,并根据该过得硬的实测值提出了人们当时连想都不敢想的、被用作保护性惰性气体氮气参与反应配位的全新固氮钴配合物^[12-13]。红外光谱及后来的单晶 X 线衍射分析等现代手段完全证实了其新假设的正确性。如果他当时仅仅为了尽早发表论文,不去深究元素分析实测值与预想物理论值的相互矛盾,而是简单地根据理论计算值去修改伪造实测值,他就会不但丧失科研职业道德,而且还会犯下一个与钴固氮配合物失之交臂的大错误。

诚然,这种通过重新核算元素分析数据对国外来稿学术质量的把关同样也适用于国内稿件^[7-8]。据来自科研一线的内部人士透露,现在有些学生在做毕业论文时,根本就不送样做元素分析,而是先把理论值计算好,然后再根据这些理论值在误差许可的范围内简单而轻松地填上实测值。对这种严重违反科研职业道德、极不负责的数据造假行为,一旦发现,就应告知其所在单位从严处理^[7-8]。

4 参考文献

- [1] SCI Journal citation reports—science edition [EB/OL]. [2007-06-05]. <http://scientific.thomson.com/products/jcr/>
- [2] Ma T S, Rittner R C. Modern organic elemental analysis [M]. New York: Dekker, 1979
- [3] Notice to authors of papers [S]. J Am Chem Soc, 2007, 129 (1): 16A-24A
- [4] Guidelines for authors [S]. J Org Chem, 2007, 72 (14): 13A-25A
- [5] RSC Presentation of experimental data [EB/OL]. [2007-06-06] <http://www.rsc.org/Publishing/ReSource/AuthorGuidelines/ArticleLayout/sect3.asp>
- [6] 《中国化学》等投稿须知 4.6.6: 化合物表征 [EB/OL]. [2007-06-06]. <http://sioc-journal.cn/chub/tgxzh.htm>
- [7] 中国科学院. 中国科学院关于加强科研行为规范建设的意见 [S]. 2007