

21

世纪高等院校教材·师范类

化学学习论

周青 主编



科学出版社

www.sciencep.com

21 世纪高等院校教材·师范类

化学学习论

周 青 主编

科学出版社

北 京

内 容 简 介

本书基于化学学科的知识特点,以教育心理学理论为基础,以提高化学教育类硕士研究生的教育理论水平和科学研究意识与能力为主旨,对化学学习的基本内容、认知结构、目标、策略、过程、模式、条件进行了系统分析与阐述。全书由 11 章内容构成,突出了“化学学习事实与教育心理学理论有机结合”的特点。以镶嵌式配以大量的案例,通过理论介绍与案例的评析,帮助读者从学习理论的角度认识、理解化学学习的本质与化学学习的机制等。

本书可作为高等师范院校化学教育类硕士研究生的教材,也适合从事化学教育研究和化学教学的相关人员使用。

图书在版编目(CIP)数据

化学学习论/周青主编. —北京:科学出版社,2010. 6

21 世纪高等院校教材·师范类

ISBN 978-7-03-027698-8

I. ①化… II. ①周… III. ①化学-教学研究-高等学校-教材 IV. ①O6-42

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2010)第 094250 号

科学出版社 出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

北京市安泰印刷厂 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2010 年 6 月第 一 版 开本:B5(720×1000)

2010 年 6 月第一次印刷 印张:17 1/2

印数:1—2 500 字数:352 000

定价:36.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换)

前 言

学习是人类最有意义的基本活动,它关系到每个人的生存与发展,也关系到整个人类社会的延续、进步和发展。化学作为一门研究物质及其变化的科学,随着其自身的发展、分化以及与其他学科的相互渗透和交叉,产生了许多新的分支学科和边缘学科,如材料化学、能源化学、环境化学、药物化学、工业化学、生物化学、分子生物学、量子化学、地球化学、宇宙化学等。目前化学已经成为一门中心学科。以化学为中心形成的化学学科群成为现代社会科学技术——第一生产力的重要组成部分,为解决人类社会现在和将来的基本需要起到重要作用。而对于相关学科,如生物、物理、地理等,化学也成为学习这些学科的支架。无论是在基础教育阶段,还是在大学阶段,化学学习的重要性日益凸显,对学生科学素养的培养以及社会科学技术的发展都有至关重要的意义,成为人类学习中的重要组成部分。

化学学习是在特定环境下引起特定行为变化的一种学习,有其自身的特点和规律。对于化学学习,国内外学者做了大量的研究,取得了许多宝贵的第一手资料。这些成果使人们对化学学习过程的认识不断深化,但是也存在以下两个方面的问题:第一,各教育心理学流派在研究教育理论上取得了丰硕成果,如行为主义理论、认知理论、人本主义理论、社会交互理论以及建构主义理论等,然而这些理论没有学科化,教师在实际化学学习及教学应用中遇到较大困难,由于没有将教育心理学的理论与化学学习内容和过程相结合,化学学习的研究成果在化学学习中难以起到有效的指导作用。第二,关于化学学习的研究成果比较零散,不够系统,理论基础比较薄弱。因此,目前的研究仍需要将教育心理学的最新研究成果和理论与化学学科内容相结合,对化学学习的具体过程进行系统、深刻的分析与解释,从宏观与微观层次描述化学学习的主要特点和基本规律,形成一种直接来源于化学学习事实的、能够从整体上描述化学学习过程和揭示化学学习规律的理论,作为化学课程与教学论领域研究的基础。因此,探索和建立化学学习的理论体系就显得极为迫切。

本书将教育心理学的最新研究成果与化学学科学习事实相融合,以案例为载体,系统介绍了化学学习的基本内容、认知结构、目标、策略、过程、模式、条件等内容。全书共分为11章,分别为化学学习的基本内容、行为主义学习理论与化学学习、早期认知学习理论—格式塔—场论以及对化学学习过程的认识、建构主义下的化学学习、化学学习的认知结构及其建构、奥苏贝尔认知同化理论与化学学习、化学学习过程、化学学习目标、新的化学学习模式、班杜拉社会学习理论、学习理论的研究热点。

参加本书编写的主要成员有周青、胡佳妮、赵英敏、申妮、邢丽娟、刘亚转、郭静、徐盼盼、田红、姚林娜、倪俊超、王晓、张小玲、陈伟、杨妙霞。

本书中引用了大量同行的研究成果,由于篇幅所限,未一一列出,在此对这些文献的作者表示衷心感谢。

本书是“陕西师范大学优秀研究生教材资助项目”,在此向陕西师范大学研究生部的领导与工作人员表示衷心的感谢。

本书为国家教师教育“985”优势学科创新平台建设项目前期成果之一,项目编号为 GJ9850102。

由于编者水平有限,书中不妥和疏漏之处在所难免,敬请各位同行与读者批评指正。

编 者

2010年2月5日于西安

目 录

前言

第一章 化学学习的基本内容	1
第一节 化学学科的特点	1
一、化学的定义及研究对象	1
二、化学学科的分类	4
三、化学学科的重大问题	5
第二节 化学知识的分类	8
一、陈述性知识	9
二、程序性知识	14
第三节 化学学科学习的思维和思维方式	24
一、思维的概念	24
二、科学思维的概念及其特点	25
三、化学学习的思维及其特点	25
四、化学学科学习中的特有思维方式	30
参考文献	34
第二章 行为主义学习理论与化学学习	36
第一节 桑代克的刺激——反应学习理论与化学学习	36
一、学习的定义	36
二、桑代克的学习律	39
三、桑代克的学习原则.....	41
第二节 巴甫洛夫条件作用理论与化学用语学习	44
一、条件反射的实验研究	44
二、巴甫洛夫的学习律.....	45
三、条件反射说的发展与评析	48
第三节 斯金纳操作学习理论与化学学习	49
一、学习的定义	49
二、斯金纳操作学习理论	50
三、斯金纳操作学习理论的应用	57
第四节 华生行为主义学习理论与化学学习	60
一、学习的定义	60
二、华生的学习律	60

参考文献	62
第三章 早期认知学习理论—格式塔—场论以及对化学学习过程的认识	64
第一节 格式塔早学习理论与化学学习策略	64
一、格式塔基本观点	64
二、学习律与遗忘律	66
三、学习与顿悟	70
第二节 勒温认知—场学习理论与化学学习	76
一、勒温的基本观点	76
二、勒温关于学习的定义	80
三、勒温的学习理论的发展和应用	82
参考文献	84
第四章 建构主义下的化学学习	85
第一节 皮亚杰的基本观点及其对化学学习认识的启示	85
一、皮亚杰基本观点	85
二、认知发展理论	86
第二节 皮亚杰关于学习的原理	92
一、学习从属于发展	92
二、知觉受制于心理运演	92
三、学习是一种能动建构的过程	93
四、认知冲突是有意义的学习所必需的	93
五、否定是一种有意义的学习	94
参考文献	95
第五章 化学学习的认知结构及其建构	96
第一节 布鲁纳的基本观点	96
一、布鲁纳的知识观与化学知识体系	96
二、布鲁纳的学习观与化学学习	98
第二节 布鲁纳的知觉归类理论和概念获得理论	100
一、布鲁纳的知觉归类理论与化学学习过程	100
二、布鲁纳的概念获得理论与化学概念学习	105
第三节 化学学习的认知结构	109
一、编码系统	110
二、化学学习的认知结构	115
第四节 布鲁纳的发现学习	120
一、“发现学习”的中心思想	121
二、“发现学习”的特征	121
参考文献	129

第六章 奥苏贝尔认知同化理论与化学学习 ·····	130
第一节 奥苏贝尔的有意义学习理论 ·····	130
一、学习的分类·····	130
二、有意义学习·····	132
三、有意义学习的学习原则在高中化学教材编写中的应用·····	138
第二节 先行组织者策略与化学学习策略 ·····	145
一、化学学习策略·····	145
二、先行组织者的概念·····	146
三、先行组织者运用的目的及意义·····	146
四、化学学习过程中先行组织者的分类·····	146
五、先行组织者理论的简评·····	161
参考文献 ·····	161
第七章 化学学习过程 ·····	163
第一节 信息加工理论概述 ·····	163
一、学习的定义·····	163
二、信息储存的方式·····	169
三、西蒙的计算机模拟·····	172
四、奈瑟的认知信息加工理论·····	173
五、加涅的信息加工理论·····	174
第二节 信息加工的过程 ·····	175
一、注意刺激·····	175
二、刺激编码·····	177
三、储存与提取信息·····	177
第三节 化学学习过程 ·····	178
一、化学学习过程的概述·····	178
二、化学知识的学习过程·····	178
三、化学技能的学习过程·····	182
第四节 信息加工学习原理 ·····	187
一、信息流是行为的基础·····	187
二、人类加工信息的能量是有限的·····	188
三、记忆取决于信息编码·····	189
四、回忆部分取决于提取线索·····	189
参考文献 ·····	190
第八章 化学学习目标 ·····	191
第一节 布卢姆的教育目标分类与化学学习目标 ·····	191
一、教育目标的分类·····	191

二、布卢姆教育目标分类学的新发展	195
三、我国化学学习目标分类与布卢姆教育目标分类	198
第二节 加涅的学习理论与化学学习目标	201
一、学习的条件	201
二、加涅的学习结果分类理论	202
三、加涅的累积学习模式	206
参考文献	212
第九章 新的化学学习模式	214
第一节 人本主义心理学概述	214
一、马斯洛的自我实现论	214
二、罗杰斯的自我理论	214
第二节 罗杰斯的学习观与化学学习	215
一、学习的分类	215
二、化学学习	216
三、罗杰斯的学习原则	220
第三节 新的化学学习模式	222
一、情境学习	222
二、探究学习	227
三、合作学习	230
参考文献	236
第十章 班杜拉社会学习理论	237
第一节 影响学习的因素	237
一、学习的先行决定因素	237
二、学习的后继决定因素	238
三、认知因素	240
四、交互决定论	242
第二节 人类的学习	245
一、学习的来源	245
二、学习过程	248
第三节 自我效能感理论	251
一、自我效能感的内涵	251
二、自我效能感的形成因素	251
三、自我效能感的功能	252
四、自我效能感的培养途径	254
参考文献	255

第十一章 学习理论的研究热点	256
第一节 批判性思维	256
一、批判性思维的界定	256
二、化学学科的特点与批判性思维的关系	257
三、在化学教学中要重视批判性思维的培养	258
四、化学教学中批判性思维的应用	260
第二节 认知风格	262
一、认知风格概述	262
二、认知风格的类型及教学策略	264
参考文献	270

第一章 化学学习的基本内容

化学,作为自然科学中的一门中心学科,对于解决人类社会现在和将来的基本需要,有着越来越重要的意义。化学教育不仅可以提高青少年乃至全体公民的科学素养,还可以给予每一个人改善生活质量所需的知识、技能和态度,与社会的发展相适应。化学学习的有效性一直是化学教育研究的重点和热点。化学学习除了与学习者的心理特点、认知水平等因素有关以外,还与化学学科本身的结构特点、内容特点和发展有关。所以在研究有关化学学习的基本理论之前,有必要了解和认识化学学科的基本内容。

第一节 化学学科的特点

一、化学的定义及研究对象

自然科学是研究自然界中各种自然现象或事物的结构、性质和运动规律的科学。因此,自然界的物质形态、结构、性质和运动规律都是自然科学的研究对象。自然科学作为一个体系,包含数学、力学、物理学、化学、生物学、天文学、地球科学等学科。其中,数学是研究数量关系与空间形式的科学;力学是研究力与运动的科学,研究对象是物质的客观运动;物理学是研究物质运动规律及其基本结构的科学;生物学是研究生命现象以及生物与环境之间关系的科学;天文学是研究宇宙中各类天体和天文现象的科学;地球科学是研究地球以及太阳和其他外部因素对地球影响的科学。

那么化学的研究对象是什么?我们可以从化学的定义的演变中了解和认识。

目前,通常把化学定义为研究物质的组成、结构、性质以及变化规律的科学^①。

其实,关于“化学”定义的表述已有很多种,时至今日,仍然没有达成共识。但是,化学的内涵以及研究对象一直在变化和发展着。

普遍认为拉丁语 *chemia*(化学)一词来自希腊语 $\chi\eta\mu\epsilon\iota\alpha$ (*chēmeia*)。对于这个希腊语的含义,历史上发生过不少争论,现主要有两种不同的看法:一种意见认为,该词是由希腊语 $\chi\upsilon\upsilon\omega$ (拉丁文为 *cheo*,意为“铸造”、“倾浇”)或 $\chi\upsilon\mu\omicron\varsigma$ (意为“汁液”、“加液”)演变过来的,起源于早期的冶炼、染色等实用化学工艺活动,原指“浇铸技艺”或“浸液技艺”;另一种意见认为,它不像希腊语,而像是从埃及语“黑色”(拉丁译音为 *khem*)衍生出来的,可能原指“黑化技艺”(埃及炼金术的第一步工序是“黑化”)或“埃及技艺”(古埃及人自称其国为 *Kmt*,意为“黑土”,系指该国拥有尼罗河流域的肥沃

^① 摘自初中九年义务教材《化学》(全一册),人民教育出版社,1999年,绪言

的黑色土壤)。例如,一本在公元 100 年左右写成的书中干脆将埃及称为 Chèmia。

国外有关化学的英文定义有如下表述:

(1) Chemistry is the science concerned with the composition, behavior, structure, and properties of matter, as well as the changes it undergoes during chemical reactions. ①

(2) Chemistry is the science of substances — their structure, their properties and the reactions that change them into other substances (Pauling, 1988).

(3) Chemistry is the science of the composition and structure of materials and of the changes the materials undergo (Ebbing and Gammon, 2007).

(4) Chemistry is the science that investigates and explains the structure and properties of matters. ②

我国出现“化学”一词首见于伟烈亚力主编的《六合丛谈》(1857~1858年),它得自王韬,是来华传教士戴德生(James Hudson Taylor)所创并口授于王韬的。王韬在日记中记载了有关段落:“十有四日,丁未,是晨郁泰峰来,同诣各园游玩,戴君特出奇器,盛水于,交相注,曷顿复变色,名曰化学,想系磺强水所制。”戴德生在《六合丛谈》中还对化学学科进行了简单介绍,通过与“重学”(力学)的对比,解释了“化学”的词义,即研究物质本质变化的学问。我国研究化学哲学的许多专家学者,如廖正衡、乔世德、曾国屏、魏光、徐光宪等,都对化学定义做了一定深度的研究分析和探讨,各自提出了不同的见解和观点。

胡小铭和张艺曾(2006)将国内外一些具有代表性的化学定义筛选出来,以便让从事化学工作的教师对化学的定义有一个更全面的了解和认识,跟踪掌握最新的研究成果和发展动态。现将这些定义列举如下:

(1) 1789年拉瓦锡出版了《化学元素》,将化学定义为“研究元素性质的科学”。

(2) 化学是关于原子运动的科学。

(3) 化学是研究物质性质的学问。

(4) 化学是研究物质在原子-分子水平上的变化规律的科学。

(5) 化学是一门研究物质的组成、结构、性质以及变化规律的基础自然科学。

(6) 化学主要是在分子、原子或离子等层次上研究物质的组成、结构、性能、相互变化以及变化过程中能量关系的科学。

(7) 化学主要是研究物质的分子转变规律的科学。

(8) 化学是研究物质分子及其凝聚态的组成、结构、性质和变化规律的科学。

(9) 化学是研究物理原子、分子、生物大分子和超分子及其凝聚态的组成、结构、性质、化学反应及其规律和应用的科学。简而言之,化学是分子的科学。

① <http://en.wikipedia.org/wiki/Chemistry>

② Chemistry: Concepts and Applications. McGraw Hill Companies, 2005: 3

(10) 化学是研究从基本粒子到生物大分子各层次粒子的质变的科学。

(11) 化学是研究物质的性质、组成、结构、变化和应用的科学。

(12) 化学是研究物质从元素向生命进化过程中的各个物质层次的组成、结构和变化的科学。

(13) 化学是研究分子及其近层次物质性能、构成、演变、应用诸运动规律的科学。

(14) 化学科学是研究原子、分子片、分子、超分子、生物大分子到分子的各种不同尺度和不同复杂程度的聚集态的合成反应、分离和分析、结构形态、物理性能和生物活性及其规律和应用的科学。

(15) 21 世纪的化学是研究原子、分子片、结构单元、分子、高分子、原子分子团簇、原子分子的激发态、过渡态、吸附态、超分子、生物大分子、分子和原子的各种不同维数、不同尺度和不同复杂程度的聚集态和组装态、直到分子材料、分子器件和分子机器的合成和反应、制备、剪裁和组装、分离和分析、结构和构象、粒度和形貌、物理和化学性能、生理和生物活性及其输运和调控的作用机制以及上述各方面的规律、相互关系和应用的自然科学。

(16) 21 世纪的化学是研究泛分子的科学。所谓泛分子主要分为 10 个层次：①原子层次；②分子片层次；③结构单元层次；④分子层次；⑤超分子层次；⑥高分子层次；⑦生物分子层次；⑧纳米分子和纳米聚集体层次；⑨原子和分子的宏观集体层次；⑩复杂分子体系及其组装体的层次。

(17) 2002 年我国著名化学家、北京大学徐光宪院士更提出了很有新意的“化学一维定义、化学二维定义、化学三维定义和化学四维定义”的立体多维概念。

(18) 2003 年，在中国化学会第 7 次全国会员代表大会上，徐光宪院士做了题为“21 世纪是信息科学、合成化学和生命科学共同繁荣的世纪”的报告。报告中指出化学是与信息、生命、材料、环境、能源、地球、空间和核科学等八大新兴或朝阳科学 (sunrise sciences) 都有紧密的联系、交叉和渗透的中心科学。

从化学的定义可以看出：随着时间的推移，化学定义不断延伸，化学的研究对象也在不断地扩大。化学的研究对象有什么特点呢？

(1) 化学研究物质的性质、组成、结构、变化和应用，其基本问题是组成、结构和反应以及它们与物质性质的关系。

(2) 化学研究的对象是泛分子层次，构成泛分子的较低层次的微粒之间的相互作用十分复杂，使其整体的性质各不相同，很难用演绎的方式简洁地描述，这就决定了化学研究的个别化特点。

(3) 在研究方法方面，物理学方法注重分析，在本质上是机械论（或称还原论）的；生物学方法注重整体，在本质上是目的论（或有机体论、自主论）的；化学方法一方面把研究对象分解为若干组成成分，另一方面又把研究对象作为由某些微粒（或部分）组成的、复杂性不同于生物体的系统，来研究其结构，研究实物的相互关系，既有与物理学相似之处，又有与生物学相似之处，但是，化学又具有与物理学和生物学不

同之处,表现出自己的特殊性。

二、化学学科的分类

如果说化学作为一门独立的科学是从波义耳(Boyle)时代开始的,那么到19世纪已有200多年历史。人们一般把化学分为无机化学、有机化学、分析化学和物理化学等四大门类。

19世纪末和20世纪初,由于物理学和化学的研究不断向微观领域深入,化学学科得到了飞速发展。其显著标志就是,各种化学分支学科如雨后春笋,相继诞生,如高分子化学、核化学、现代结构化学、生物化学以及理论有机化学等。这些新学科又相互渗透,彼此交织,使已经形成的化学理论体系再次显得杂乱无序。这种状态吸引着人们不断地探索着新的分类体系。显然传统的四大分类已经不能全面反映当今化学的发展特征与前沿动态。

近几十年来,国内外学者对此进行了不同的分类尝试,然而至今尚各言其说,未获统一。

(一) 美国学者对化学的分类

近几年来,美国化学家琼斯(Jones)就现代化学的分类又提出了新方案。他将整个化学科学分为五大领域:①构成化学;②反应化学;③物理化学;④理论化学;⑤应用化学。

琼斯认为,构成化学主要是研究化学物质的组成、结构和性能,包含了以往结构化学和分析化学的研究内容。如果其研究对象是纯物质,那么构成化学实质上就是结构化学,其任务是找出分子中原子的类型和空间排列以及化学键的种类;如果其研究对象是混合物,实际上就是以往分析化学所研究的内容。他还认为,反应化学是一种制作新型物质的艺术,即使原料在一定条件下进行反应,或者用各种能(如热、光、电等)处理这些原料以制取新物质。他提出,物理化学的任务则是寻求物质的物理性质与化学性质的关系,并揭示分子的接收能量的方式等;理论化学主要是阐释原子形成分子的机理,分子之所以具有某些结构、化学键、能级和反应性能的原因等;应用化学是利用上述四种学科的知识,使原料发生化学作用,制成人们需要的物质。

美国《化学文摘》则将化学分为生物化学、有机化学、大分子化学、应用化学、物理化学及分析化学等五大类。

(二) 其他国家学者对化学的分类

1970年,加拿大《化学》杂志还对化学科学做了其他不同的分类。例如,同样是把化学分为五大类,然而具体内容却有很大差异,如分为:①分析化学;②合成化学;③结构与性能化学;④化学动力学;⑤理论化学(量子化学)。

日本《科技文献速报》则将化学分为物理化学、分析化学、无机化学、有机化学、高

分子化学等五大类。

还有一些学者把化学分成了更多分支学科,如分为六大类:①结构、性能与鉴定化学;②合成化学;③化学动力学;④液态、固态与表面化学;⑤理论化学;⑥核化学。还有人分为八大类:①结构、性能与鉴定化学;②合成化学;③化学动力学;④液态、固态与表面化学;⑤理论化学;⑥核化学;⑦仪器化学;⑧热力学。

(三) 我国学者对化学的分类

山西大学张家治教授于 1983 年提出了一个多层次的化学分类系统。他坚持以物质运动形式作为科学分类的基础,并依据分类的连续性原则和发展性原则,对以往的化学分类进行扬弃与综合,提出了下列分类系统:①无机化学(无机合成、稀有元素、配位化合物和核化学);②有机化学(有机合成、元素有机、物理有机);③高分子化学(无机高分子、有机高分子);④鉴别化学(化学分析测定、仪器分析、分离化学和结构测定);⑤物理化学(热力学、动力学、统计热力学、结构化学和量化);⑥生物化学(分子生物学、光生物化学)。

上述不同的化学学科分类表明,国内外化学界都在努力寻求一个合理的分类方案,以便能对化学科学体系有更系统、更深入的认识。

徐光宪院士曾经指出,正确运用化学分类方法进行合理分类,还可以促进新学科的形成。例如,化学中使用萃取方法虽然已有 100 多年的历史,但其真正的发展是在 20 世纪 40 年代。当时,发展原子能要求高纯度的铀元素,才促进了萃取方法的迅速发展。后来,人们又通过对越来越复杂的萃取体系进行正确的分类,才在 50~60 年代形成了新兴分支学科——萃取化学。这说明,对某些化学研究的内容不断地进行正确分类,深入研究,就可以促进新学科的形成。又如,人们对配位化合物进行分类,把它们分为维尔纳(Werner)型配位化合物和非维尔纳型配位化合物,进而再把维尔纳型配位化合物分为多核配位化合物和原子簇等,从而能够对配位化合物进行分门别类的深入研究,并促成了配位化学分支学科的形成。

三、化学学科的重大问题

在中国化学会第 7 次全国会员代表大会上,徐光宪院士做了题为“21 世纪是信息科学、合成化学和生命科学共同繁荣的世纪”的报告。报告中指出 21 世纪化学学科将面临四大问题。

(一) 化学反应理论(化学的第一根本规律)——建立精确有效而又普遍适用的化学反应的含时多体量子理论和统计理论

对于这一世纪难题,应予首先研究的课题有:

(1) 充分了解若干重要、典型的化学反应的机理,以便设计最好的催化剂,实现在最温和的条件进行反应,控制反应的方向和手性,发现新的反应类型、新的反应

试剂。

(2) 在掌握光合作用和生物固氮机理的基础上,设计催化剂和反应途径,以便断 CO_2 、 N_2 等稳定分子中的惰性化学键。

(3) 研究其他各种酶催化反应的机理。酶对化学反应的加速可达100亿倍,专一性达100%。如何模拟天然酶、制造人工催化剂,是化学家面临的重大难题。

(4) 充分了解分子的电子、振动、转动能级,用特定频率的光脉冲打断选定的化学键——选键化学的理论和实验技术。

(二) 结构和性能的定量关系(化学的第二根本规律)

要优先研究的课题有:

(1) 分子和分子间的非共价键的相互作用的本质与规律。

(2) 超分子结构的类型、生成和调控的规律。

(3) 给体-受体作用原理。

(4) 进一步完善原子价和化学键理论,特别是无机化学中的共价问题。

(5) 生物大分子的一级结构如何决定高级结构?高级结构又如何决定生物和生理活性?

(6) 分子自由基的稳定性和结构的关系。

(7) 掺杂晶体的结构和性能的关系。

(8) 各种维数的空腔结构和复杂分子体系的构筑原理和规律。

(9) 如何设计合成具有人们期望的某种性能的材料?

(10) 如何使宏观材料达到微观化学键的强度?例如,“金属胡须”的抗拉强度比通常的金属丝大一个量级,但还远未达到金属-金属键的强度,所以增大金属材料强度的潜力是很大的。又如,日前高分子纤维达到的强度要比高分子中的共价键的强度小两个数量级。这就向人们提出如何挑战材料强度极限的难题。

以上各方面是化学的第二根本问题,其迫切性可能比第一问题更大,因为它是解决分子设计和实用问题的关键。

(三) 第三世纪难题:生命现象的化学机理——生命化学难题

生命活动的过程,可以用也必须用化学过程来理解。虽然生命过程不能简单地还原为化学过程和物理过程的加和,但研究生命过程的化学机理就是从分子水平了解生命,可以为从细胞、组织、器官等层次整体了解生命提供基础。充分认识和彻底了解人类和生物的生命运动的化学机理,无疑是21世纪化学亟待解决的重大难题之一。例如:

(1) 要了解生命的化学机理,最重要的是了解如何调控。这就是化学生物学的任务:如何用配体小分子的钥匙去打开生物大分子的锁。估计人类有4万个基因,它们表达的蛋白质约有25万种,这就是29万把锁。要找到能激发或抑制这些基因、蛋

白质的配体小分子,就是钥匙,需要 58 万把,才能调控生命,但现在只知道 5000 个,不到 1%。过去,要选一把钥匙(药物)需合成数以万计的化合物。现在用组合化学的方法,可以大大提高筛选比,但还需要合成几千万个新化合物。找到了这些钥匙后,与生物学家、医学家共同合作,人类就可以减少疾病的痛苦,享受 150 岁的天年。

(2) 哈佛大学化学教授 Schreiber 创建化学遗传学,为开创化学蛋白质组学、化学基因组学(与生物学家以改变基因密码来研究的方法不同)奠定基础。

(3) 掌握光合作用、生物固氮作用,以及牛、羊等食草动物胃内酶分子把植物纤维分解为小分子的反应机理,为充分利用自然界丰富的植物纤维资源打下基础。

(4) 人类的大脑是用“泛分子”组装而成的最精巧的计算机。如何彻底了解大脑的结构和功能将是 21 世纪的脑科学、生物学、化学、物理学、信息和认知科学等交叉学科共同解决的难题。

(5) 了解从化学进化到手性和生命起源的飞跃过程。如何实现从生物分子(biomolecule)到分子生命(molecular life)的飞跃?如何制造活的分子(make life),跨越从化学进化到生物进化的鸿沟?美国加利福尼亚州 Scripps 研究所的化学家 Julius Rebek 认为在化学与生物学边界真正开创性的工作是在通过化学手段合成生物系统的努力。他说其中最大的挑战是从“设计图纸合成出活体细胞,以及有生物活性的分子,并重新创造新陈代谢”。他又说:“这是纯化学问题,在取得成功以前,还不会变成生物学。”换句话说,如果化学家得不到支持,未做这些开创性的工作,则生命科学的发展会受到很大的限制。

(6) 研究复杂、开放、非平衡的生命系统的热力学、耗散和混沌状态、分形现象等非线形科学问题。

(四) 第四世纪难题:纳米尺度难题

现在中国、美国、日本等都把纳米科学技术定为优先发展的国家目标。在复杂性科学和物质多样性研究中,尺度效应至关重要。尺度的不同常引起主要相互作用力的不同,导致物质性能及其运动规律和原理的质的区别。

纳米粒子体系的热力学性质包括相变和“集体现象(collective phenomena)”,如铁磁性、铁电性、超导性和熔点等,与宏观聚集态有很大的差异。当尺度在十分之几到 10 nm 的量级,正处于量子尺度和经典尺度的模糊边界(fuzzy boundary)中,此时热运动的涨落和布朗(Brown)运动将起重要的作用。例如,金的熔点为 1063 °C,纳米金(5~10 nm)的熔化温度却降至 330 °C;银的熔点为 960.3 °C,而纳米银(5~10 nm)的熔点为 100 °C。

当代信息技术的发展推动了纳米尺度磁性(nanoscale magnetism)的研究。由几十个到几百个原子组成的分子磁体表现出许多特性,如量子隧穿效应、量子相干效应等。纳米粒子的比表面很大,由此引起性质的不同。例如,纳米铂黑催化剂可使乙烯催化反应的温度从 600 °C 降至室温。又如,电子或声子的特征散射长度,即平均自由