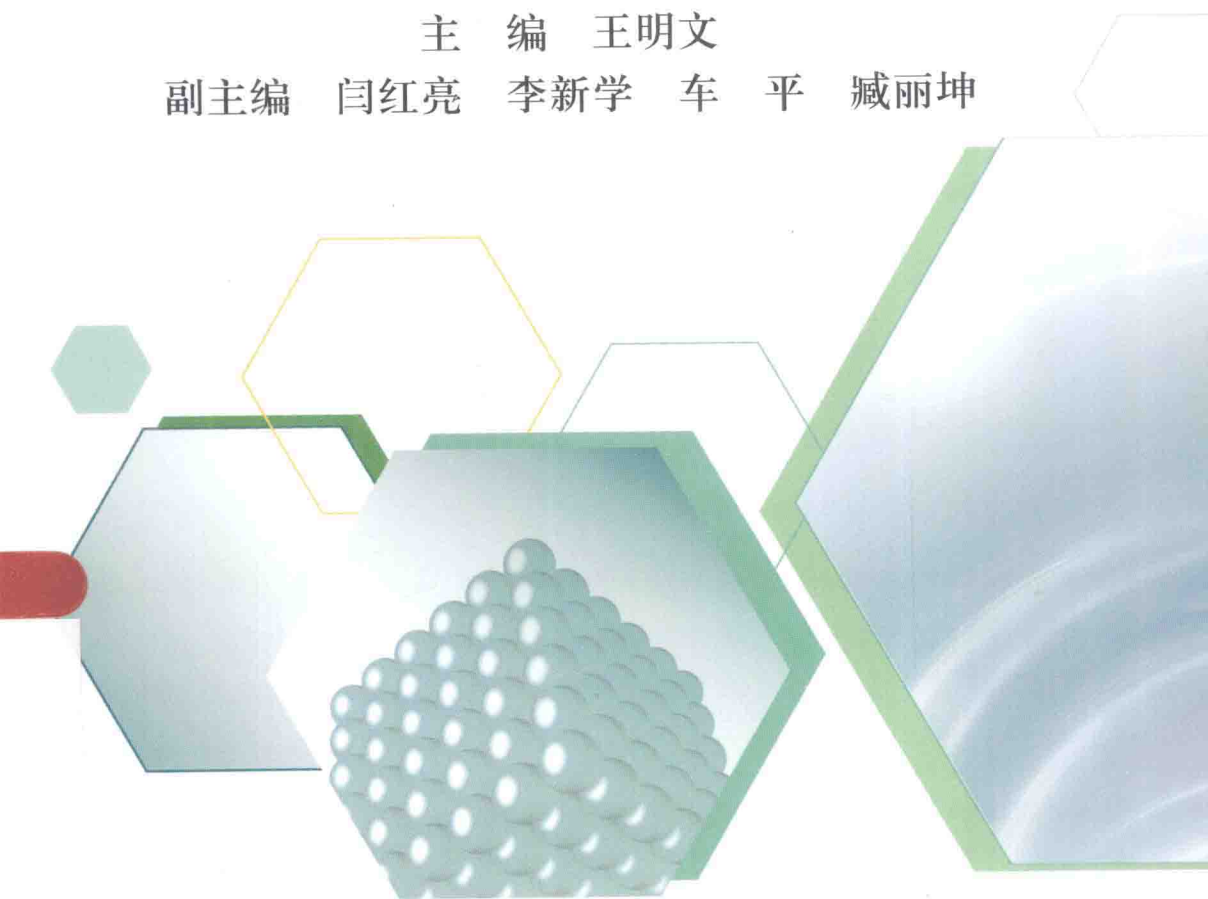


普通化学简明教程

主 编 王明文

副主编 闫红亮 李新学 车 平 臧丽坤



科学出版社

普通化学简明教程

主 编 王明文

副主编 闫红亮 李新学
车 平 臧丽坤

科 学 出 版 社

北 京

内 容 简 介

本书是普通高等学校非化学化工、非冶金材料类工科专业化学公共基础课教材。

全书简明扼要,除绪论外,理论部分主要内容集中为4章,包括化学反应的基本原理、溶液化学、电化学和微观物质结构,应用化学部分不再独立成章。本书适用于少学时的普通化学教学。本书通过“化学家史话”介绍在化学某领域作出杰出贡献的科学家,以“化学新知”的方式开阔学生的视野,提高学习兴趣。

本书不仅可以作为高等学校本科生化学公共基础课教材,也可供自学者、工程技术人员以及高中化学教师参考。

图书在版编目(CIP)数据

普通化学简明教程/王明文主编. —北京:科学出版社,2014.8

ISBN 978-7-03-041513-4

I. ①普… II. ①王… III. ①普通化学-高等学校-教材 IV. ①O6

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2014)第 176128 号

责任编辑:陈雅娴 / 责任校对:李 影

责任印制:徐晓晨 / 封面设计:速底书装

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>

北京科印技术咨询服务公司 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2014年8月第 一 版 开本:B5(720×1000)

2014年8月第一次印刷 印张:15 1/2 插页:1

字数:327 000

定价:39.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换)

前 言

普通化学是非化学化工、非冶金材料类工科专业必修的一门化学公共基础课。它是构筑全面发展的现代工程技术人员的知识结构、能力结构以及素质教育的重要组成部分,也是学习有关专业知识的基础。

由于普通化学是一般工科学生大学阶段重要的化学课程,也可能是唯一一门化学课程,因此应介绍化学最基本的基础理论、基本知识,以及与化学密切相关的社会热点、科技发展、学科交叉等方面的知识,使学生具有一定的化学素质和知识水平,建立化学的思维方式,培养用化学方法解决实际问题的综合能力。

目前出版的《普通化学》一般包括理论化学、应用化学两部分。应用化学部分包括化学与能源、环境、材料、信息、生命和健康等多个方面,这部分在教学时一般为选学内容。本书出繁入简,理论化学部分集中为4章,应用化学部分不再独立成章,部分基本知识和应用问题与理论有机结合,故称之为《普通化学简明教程》,适用于工科院校少学时的普通化学教学。

绪论和附录由王明文编写,第1章由闫红亮编写,第2章由李新学编写,第3章由臧丽坤编写,第4章由车平编写。全书由王明文任主编并统稿。

本书的编写得到了教育部本科教学工程“专业综合改革试点项目”经费和北京科技大学教材建设基金的资助。李文军教授和东北大学王林山教授审阅全稿并提出了宝贵的意见和建议,在此表示感谢!

由于时间紧迫和编者的水平有限,疏漏及不妥之处请读者批评指正!

编 者

2014年5月

目 录

前言

第 0 章 绪论	1
0.1 化学发展简史	1
0.2 化学的定义与分支	3
0.3 化学的三大特征	4
0.4 现代化学的发展趋势和前沿领域	7
0.5 普通化学课程	10
本章小结	10
第 1 章 化学反应的基本原理	12
1.1 化学热力学基本概念	12
1.1.1 系统和环境	12
1.1.2 相	13
1.1.3 理想气体状态方程与分压定律	13
1.1.4 状态和状态函数	15
1.1.5 过程和途径	16
1.1.6 化学计量数与反应进度	16
1.1.7 热力学标准状态	18
1.2 化学反应中的能量变化	18
1.2.1 热力学第一定律	18
1.2.2 化学反应的反应热	19
1.2.3 反应标准摩尔焓变的计算	22
1.3 化学反应方向的判断	27
1.3.1 自发反应	27
1.3.2 熵变与自发反应	29
1.3.3 吉布斯自由能及其应用	32
1.4 化学平衡原理	37
1.4.1 标准平衡常数	37
1.4.2 标准平衡常数的应用	41
1.4.3 化学平衡的移动	43
1.5 化学反应速率	47
1.5.1 化学反应速率的概念	47

1.5.2 浓度与反应速率的关系	48
1.5.3 温度与反应速率的关系	51
1.5.4 化学反应的活化能与催化剂	53
本章小结	59
复习思考题	60
习题	62
第2章 溶液化学	67
2.1 稀溶液的依数性	67
2.1.1 溶液的蒸气压下降	67
2.1.2 溶液的沸点上升和凝固点下降	69
2.1.3 渗透压	71
2.1.4 电解质溶液的依数性	73
2.2 酸碱质子理论与酸碱平衡	75
2.2.1 酸碱质子理论	75
2.2.2 弱酸弱碱的解离平衡及 pH 的计算	76
2.2.3 酸碱的平衡移动与缓冲溶液	80
2.3 配位平衡	82
2.3.1 配合物的基本概念	82
2.3.2 配离子的解离平衡	87
2.3.3 配离子平衡浓度的计算和平衡移动	87
2.4 沉淀溶解平衡	89
2.4.1 多相离子平衡和溶度积	89
2.4.2 溶度积与溶解度的关系	90
2.4.3 溶度积规则与沉淀的生成	91
2.4.4 沉淀的溶解	93
2.4.5 沉淀的转化	94
本章小结	97
复习思考题	99
习题	100
第3章 电化学	104
3.1 氧化还原反应相关的基本概念	104
3.2 电化学电池	105
3.2.1 原电池中的化学反应	105
3.2.2 原电池的热力学	108
3.3 电极电势	110
3.3.1 标准氢电极和甘汞电极	110

3.3.2 标准电极电势	111
3.3.3 电极电势的能斯特方程	113
3.4 电化学的应用	117
3.4.1 氧化剂和还原剂相对强弱的比较	117
3.4.2 氧化还原反应进行的方向	119
3.4.3 氧化还原反应进行的程度	121
3.4.4 难溶化合物、配合物的形成对电极电势的影响	122
3.5 实用电化学	124
3.5.1 化学电源	124
3.5.2 电解与电镀	126
3.5.3 电化学腐蚀与防护	132
3.5.4 电化学腐蚀过程的特殊利用	139
本章小结	142
复习思考题	143
习题	144
第4章 微观物质结构	148
4.1 原子结构	148
4.1.1 原子组成	148
4.1.2 微观粒子的特性及其运动规律	148
4.1.3 原子核外单电子运动	153
4.1.4 多电子原子电子结构及周期律	159
4.1.5 元素基本性质的周期性变化	165
4.2 共价键和分子结构	170
4.2.1 价键理论	171
4.2.2 杂化轨道理论	177
4.2.3 配合物的价键理论	182
4.3 晶体结构	186
4.3.1 晶体的结构特征	186
4.3.2 金属键理论与金属晶体	187
4.3.3 离子键理论与离子晶体	189
4.3.4 离子极化与键型变异	193
4.3.5 原子晶体和混合型晶体	197
4.3.6 分子间力与分子晶体	199
4.3.7 晶体结构对物质性质的影响	207
4.3.8 晶体缺陷与非整比化合物	209
本章小结	214

复习思考题	215
习题	216
主要参考书目	220
附录	222
附表 1 国际相对原子质量表(1997)[$A_r(^{12}\text{C})=12$]	222
附表 2 法定计量单位	223
附表 3 一些基本常数	224
附表 4 常见物质在 $T=298.15\text{ K}$ 时的标准热力学函数	224
附表 5 某些物质在 $T=298.15\text{ K}$ 时的标准摩尔燃烧焓	229
附表 6 常见弱酸弱碱的解离常数(298.15 K)	229
附表 7 某些配离子的标准稳定常数 $K_f^\ominus$ (298.15 K)	231
附表 8 一些物质的溶度积 $K_{sp}^\ominus$ (298.15 K)	233
附表 9 标准电极电势	235

第 0 章 绪 论

0.1 化学发展简史

化学是一门古老而又年轻的科学。化学史是人类在长期的社会实践中对获得化学知识的系统的历史回顾。化学历史的发展大致可以分为如下三个时期：

(1) 古代及中古时期(17 世纪中叶以前)。主要特点是以实用为目的,化学知识来源于具体工艺过程的经验,主要包括炼丹术、炼金术以及医药化学的萌芽。

由野蛮进入文明是从用火开始的,燃烧这种化学现象为一系列化学变化如制陶、炼铜、染色、酿造等提供了条件。

关于物质变化的本源及其规律的追溯,无论在东方还是西方均有假说提出,如中国的阴阳五行之说,认为物质都是由金、木、水、火、土五种基本物质组合而成,而五行则是由阴、阳二气相互作用而成的。在古希腊有类似的四元素说,即万物是由火、土、水、气四种元素组成。德谟克利特(希腊语:Δημοκριτο,公元前 460 年—公元前 370 年或公元前 356 年)提出原子论假说。

化学实验的雏形来自于中国的炼丹术和阿拉伯的炼金术。中国炼丹术盛于秦汉,公元 7~9 世纪传入阿拉伯,形成炼金术(alkimiya, al 是阿拉伯语冠词, kim 和 kimiya 语音类似于中国字“金”和“金液”的语音)。炼金术再传入欧洲,成为 alchemy,即现在化学一词 chemistry 的来源。

16 世纪,欧洲工业生产推动了医药化学的发展。在中国,炼丹术也逐渐被本草学取代。明代李时珍撰写的《本草纲目》全书达 190 多万字。同时期的宋应星所著《天工开物》详尽记录了当时的手工业和化学生产过程。

总之,这一时期的特点是实用性、经验性和零散性,化学还不能称为一门科学。

(2) 近代化学时期(17 世纪后半叶到 19 世纪末)。摆脱经验哲学的束缚,引入正确的科学研究方法大大推动了化学的发展。例如,培根(F. Bacon, 1561—1626)指出:“一切知识来源于感觉,感觉是可靠的。科学在整理感性材料时,用的是归纳、分析、比较、观察和实验的方法。”

这一时期还可以分为前、后两个时期,前期至 18 世纪末,是近代化学的孕育期。1661 年,玻意耳(R. Boyle)首次提出科学的“元素”概念:“元素是由某些不由其他物质所构成的原始的和简单的物质或完全纯净的物质,它们是用一般方法不能再分解的更简单的物质”,“化学的对象和任务就是要寻找和认识物质的组成和性质”。这明确地表明要把化学看成认识自然的一门学问。对此恩格斯给予高度的评价:“是玻意耳把化学确立为科学。”当然,现在元素的定义以原子结构为依据,元素是具有相同核

电荷数(质子数)的同一类原子的总称,而玻意耳的元素实际上是单质。1777年,拉瓦锡(A.-L. de Lavoisier)提出燃烧氧化学说并推翻燃素学说,“把过去建立在燃素学说基础上倒立着的全部化学正立过来了”(恩格斯语)。拉瓦锡把量的概念引入化学实验中,证明了化学过程中的物质不灭定律,被誉为“定量化学之父”。

化学家史话

拉 瓦 锡



安托万-洛朗·德·拉瓦锡(A.-L. de Lavoisier, 1743—1794),法国伟大的化学家,生于巴黎的一个律师之家,曾有一段时间想承父业,在马萨林学院获得法律硕士学位。由于爱好自然科学,在这方面具有广博知识的他,最后决心专门从事化学研究。曾向法国科学院提交了大量的实验研究报告,著有《化学概论》等著作。

1777年在论文《燃烧通论》中提出新的燃烧氧化学说,否定了燃素学说,带来了一场“化学的革命”。拉瓦锡通过精确的定量实验,证明物质虽然在一系列化学反应中改变了状态,但参与反应的物质的总量在反应前后都是相同的,即化学反应中的质量守恒定律。拉瓦锡与他人合作制定出化学物种命名原则,创立了化学物种分类新体系。这些工作特别是他所提出的新观念、新理论、新思想,为近代化学的发展奠定了重要的基础,因而后人称拉瓦锡为“近代化学之父”,也被誉为“定量化学之父”。拉瓦锡之于化学,犹如牛顿之于物理学。

基于氧化说和质量守恒定律,1789年拉瓦锡发表了《化学概论》这部集大成著作,定义了元素的概念,并对当时常见的化学物质进行了分类,使得当时零碎的化学知识逐渐清晰化。在该书中的实验部分,拉瓦锡强调了定量分析的重要性。这种简洁、自然而又可以解释很多实验现象的理论系统完全有别于燃素学说的繁复解释和各种充满炼金术术语的化学著作,很快产生了轰动效应并受到年轻化学家的欢迎,与玻意耳的《怀疑派的化学家》一样,被列入化学史上划时代的作品。

1768年,年仅25岁的拉瓦锡当选为法国科学院院士,同年成为一个包税人,承包国家税收。1789年法国爆发资产阶级革命,1793年法国国民议会发布命令,逮捕所有包税人,拉瓦锡被捕入狱,1794年5月8日被推上断头台。

后期是近代化学的发展期。1811年,阿伏伽德罗(A. Avogadro)提出分子假说。1827年,道尔顿(J. Dalton)建立原子论解释定比定律和倍比定律。1869年,门捷列夫(Д. И. Менделеев)提出元素周期律而集大成。与此同时,苯的六元环结构和碳的四面体结构的建立使有机化学得以发展,热力学的引入可从宏观角度解决平衡问题。

总之,这一时期是一个大发展的阶段,化学实现了从经验到理论的重大飞跃,真正被确立为一门独立的科学,传统的四大基础化学分支无机化学、分析化学、有机化学、物理化学相继建成,化学工业大规模出现,如制酸、制碱、合成氨、染料及有机合成工业。

(3) 现代化学时期(20 世纪以来)。X 射线、放射性和电子这三大发现打开了微观世界的大门,化学家能够从微观结构的角度和更深的层次上研究物质的性质和化学变化的根本原因,可以知其所以然。

现代化学百余年是一个丰收期,化学理论、研究方法、实验技术以及应用等都发生了深刻的变化。高分子化学、材料化学、核化学、量子化学、仪器分析等新的分支学科相继建立,生物化学、环境化学、元素有机化学、药物化学等边缘和交叉学科破土而出。化学与生物、地质、能源、材料、环境等学科之间的联系越来越密切。

0.2 化学的定义与分支

化学与数学、物理等同属于自然科学基础课,是培养大学生的基本素质课程。化学是在原子、分子层次上研究物质的组成、结构、性质及其变化规律的科学。另有一种简单的表述:“化学主要是研究物质的分子转变规律的科学。”化学的研究对象是物质的分子,是“实体”(不包含物理学上的场),分子的转变是指化学运动,不是热运动或机械运动,转变的规律则包含所有转变过程中的规律,如组成、结构对性质的影响等,“主要”二字明确指出化学主要研究对象和其他科学有明显区别,但“次要”问题也可能涉及,赋予化学定义一定的灵活性。

化学在发展过程中,依照所研究的分子类别和研究手段、目的、任务等派生出许多分支学科。除传统的无机化学、有机化学、物理化学和分析化学四个基础分支学科外,又发展衍生出高分子化学、核化学和放射化学、生物化学等新的分支。1967 年,美国的 *Chemical Abstracts* (化学文摘)把化学分为五大部分,再细分为 80 类:①生物化学(1~20 类);②有机化学(21~34 类);③大分子化学(35~46 类);④应用化学和化学工程(47~64 类);⑤物理化学和分析化学(65~80 类)。《中国大百科全书(化学卷)》(1989)把化学分为七大部分:无机化学、有机化学、物理化学、分析化学、高分子化学、核化学和放射化学、生物化学。

无机化学是研究无机物的组成、结构、性质和无机化学反应与过程的化学。无机物种类繁多,包括在元素周期表中所有元素的单质及其化合物。从现代科学发展史看,一种新化合物的制得及其特性的发现往往导致一个新的科技领域的产生或一个崭新工业的兴起。例如,固体无机化学中 InP 的合成开始了 III~V 族化合物半导体的应用; Y_2O_3 、 ZrO_2 及 $\text{Na-}\beta\text{-Al}_2\text{O}_3$ 的合成兴起了固体电解质的研究以及钠-硫高能蓄电池、耐高温燃料电池的开发应用; LiNbO_3 晶体的制得促进了现代非线性光学的发展;红色荧光粉 $\text{Y}_2\text{O}_3:\text{Eu}$ 的发现推动了彩色电视机的发展等。

分析化学是测量和表征物质的组成和结构的学科。随着生命科学、信息科学和计算机技术的发展,分析化学进入一个崭新的阶段,不只限于测定物质的组成和含量,而且要对物质的状态(氧化还原态、各种结合态、结晶态)、结构(一维、二维、三维)、微区、薄层和表面的组成与结构以及化学行为和生物活性等做出瞬时追踪、无损和在线监测等分析及过程控制。仪器分析技术飞速发展,观察原子、摆布原子、芯片

分析实验室、原位 XRD 结构分析等技术纷纷实现。

有机化学是研究碳氢化合物及其衍生物的化学,也称“碳的化学”。目前已知的化合物有 2400 多万种,其中无机物不到 20 万种。世界上每年合成的新化合物中 70% 以上是有机化合物。有机化合物直接或间接地为人类提供大量的必需品。

物理化学是研究所有物质系统的化学行为的原理、规律和方法的学科,是化学学科以及在分子层次上研究物质变化的其他学科的理论基础,主要包括化学热力学、化学动力学、结构化学和量子化学等。化学热力学的基本原理是化学学科的普遍基础,可根据热力学函数来判断系统的稳定性、变化的方向和程度。热化学、电化学、溶液与胶体化学都是化学热力学的组成部分。化学动力学研究化学反应的速率和机理,分子束和激光技术的应用使其研究由宏观转入微观超快过程和过渡态。量子化学和结构化学是从微观角度研究化学的“左右手”,借助现代先进测试手段和超高速计算机技术,化学走向实验和理论并重的时代。

高分子化学是研究高分子化合物的结构、性能与反应、合成方法、加工成型及应用的化学。高分子是人类物质文明的标志之一。塑料、纤维、橡胶三大合成材料以及形形色色的功能高分子材料对提高人类生活质量,促进国民经济发展和科技进步作出了巨大贡献。

0.3 化学的三大特征

1. 特征一:化学已经成为自然科学基础学科的中心

“化学是中心科学”的说法是英国科学家、诺贝尔奖获得者罗宾森(R. Robinson)提出的,科学技术发展的历史证明这一说法的正确性和科学性。中国科学院上海有机化学研究所吴毓林、陈耀全先生指出“此中心的涵义是指化学是面向物质变化的科学”。世界是物质的,而物质是由原子和分子组成的。世界上的万事万物都在运动、发展、变化,变是绝对的,不变是相对的。从这一意义上说,化学所研究的对象涉及自然界的所有物质,与自然科学的方方面面都有联系,从而处于自然科学的独特地位。

从科学的层次看,数学、物理是上游,生物、医药和社会科学是下游,化学是中游,因此化学是承上启下的中心科学。

化学向其他学科的渗透趋势进一步加强,化学与生物学、材料的交叉领域大有作为。化学的发展已经并将会进一步带动和促进其他相关学科的发展(图 0-1)。

信息、能源、材料是 21 世纪的三大热点问题。化学将会在解决能源这一人类面临的重大问题方面作出贡献。新型催化剂使煤、天然气和煤层气的综合利用为期不远,大规模、大功率光电转换材料的研制使太阳能、氢能等新型能源得以利用,燃料电池的研究实现电动汽车的实用化,从而改变人类能源消费方式,提高人类生态环境的质量。材料科学的发展中化学必将发挥关键作用。化学将不断提高基础材料如钢

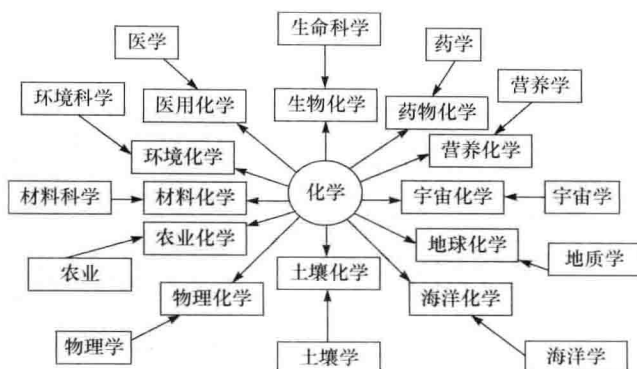


图 0-1 化学与多学科形成的交叉学科

铁、水泥和通用有机高分子材料及复合材料的质量和性能,并将继续创造各类新材料,如电子信息材料、生物医用材料、新型能源材料、生态环境材料和航天航空材料等。

化学在提高国民生活质量方面发挥着重大作用。例如,研制高效肥料和高效农药、开发新型农业生产资料,治理土地荒漠化、干旱及盐碱地以解决粮食短缺问题,开发新药提高人类健康问题,环境污染治理问题等均需要化学的方法和手段。

可见化学与人类衣食住行、能源、材料、国防、环境保护、医药卫生、资源利用等密切相关,是一门有关社会迫切需要的实用科学(图 0-2)。

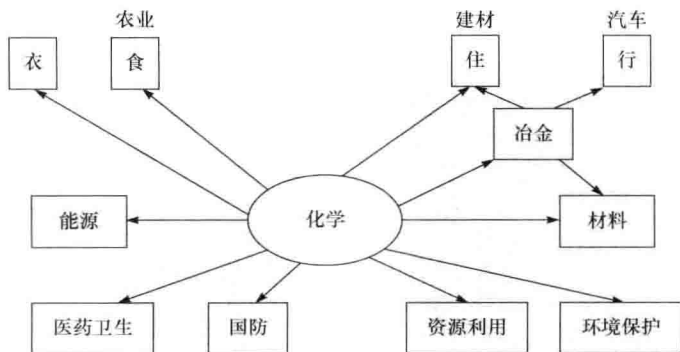


图 0-2 化学是一门有关社会需要的实用科学

2. 特征二:化学是一门以实验为基础的科学

化学起源于人类的生产劳动。例如,我国古代在冶炼、染色、制盐、酿造、造纸、火药以及炼丹术等方面的发展直接推动了化学的发展。反过来化学也促进了上述行业的进步。

现代分析测试仪器是我们眼和手的延伸。借助于电子显微镜(扫描电子显微镜

SEM、透射电子显微镜 TEM、原子力显微镜 AFM) 可以直接看到原子乃至操纵原子(图 0-3)。

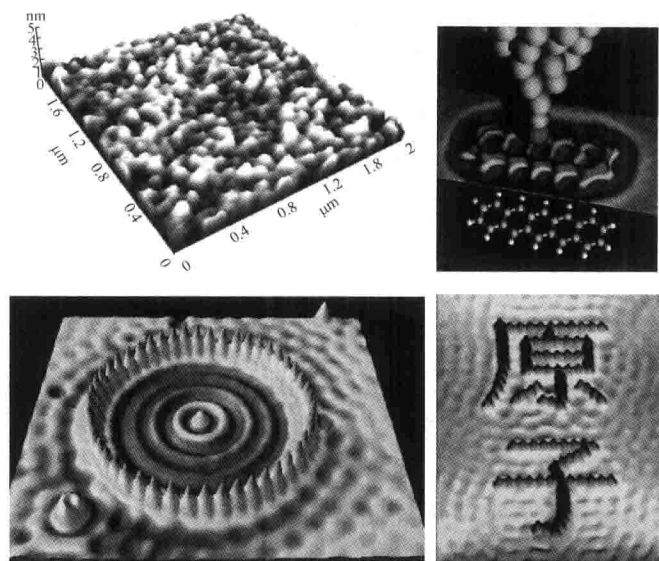


图 0-3 原子力显微镜测量材料表面、化学键与操纵原子

借助 X 射线衍射技术(粉末衍射、单晶衍射)可以测定物质结构, 获知原子和分子的排列堆积信息(图 0-4)。此外还包括色谱技术(气相色谱、液相色谱、离子色谱等)、红外、核磁共振、紫外-可见、荧光、差热热重分析等现代化手段。

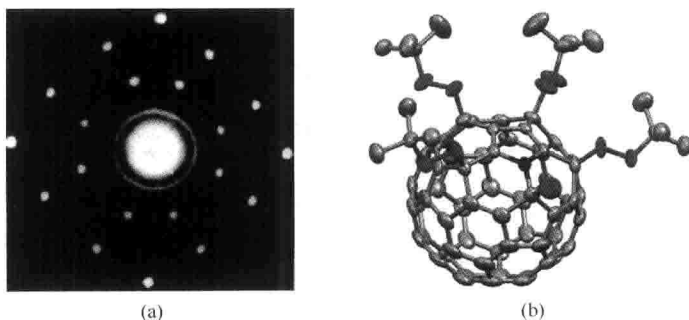


图 0-4 C_{60} 衍生物的单晶衍射图(a)和结构(b)

量子力学和计算机技术的发展产生的计算化学分支使我们在化学的研究上可以“两条腿走路”, 实验与计算并举, 并且互相促进。

3. 特征三: 化学的主要任务是创造新物质

化学是研究物质变化的科学, 原料通过化学反应而得到生成物, 创造了新分子、

新的化合物和具有特殊性质的新材料。化学元素周期表中有 100 多种元素,以这诸多的元素及其衍生物为基础,化学工作者以几乎每 10 年品种数翻一番的速度发现和创造新的化合物。在这 100 年中,在美国的 *Chemical Abstracts* 上登录的天然和人工合成的分子和化合物的数目已从 1900 年的 55 万种,增加到 1999 年底的 2340 万种,2001 年已增加到 3200 万种。迄今,有机和无机化学物质 2400 余万种,生物序列 4800 余万条。没有其他的自然科学能像化学那样制造出如此众多的新分子、新物质。这些新分子、新物质都是当今人类社会赖以生存的物质宝库,已经或正在满足着人们的物质需求,以及包括经济、文化、科技、教育在内的社会需求。

从诺贝尔化学奖的获奖情况也能看出化学与经济的关系。1901 年,诺贝尔化学奖开始颁发,到 2005 年,已颁发了近 100 次,1901~1945 的 45 年中,德国获得 16 人次,英国、法国各获得 6 人次,而美国仅获得 3 人次。1945 年以前化学研究的中心是在以德国为中心的欧洲国家,其突出代表是德国。1945 年以后,美国就有 40 多人次获奖,比欧洲国家获奖人次的总和还多,说明了 1945 年以后,世界化学研究的中心已转移到美国。此外,1945 年以前只有 10 个国家获奖,而 1945 年以后获奖国家增加到 16 个,这也反映了化学研究与开发的地区向多极化发展。

0.4 现代化学的发展趋势和前沿领域

我国著名化学家徐光宪先生指出,21 世纪化学面临的挑战有:创造和识别泛分子,其中包括发展合成和分离的新方法。例如,组合化学与药物合成、模板合成、相转移合成、水热合成、芯片合成,DNA 转录为 mRNA,mRNA 翻译为蛋白质,识别生命体内数以亿万计分子的功能,解释生命现象的化学机理,推动生命科学的发展,都涉及物理化学、理论化学和计算化学的内容。

1. 合成化学

合成化学的发展是未来化学发展的基础,21 世纪合成化学将进一步向高效率和高选择性发展;新方法、新反应以及新试剂仍将是未来合成化学研究的热点;手性合成与技术将越来越受到人们的重视;各类催化和选择性合成研究将会取得更大进展;化学家也将更多地利用细胞来进行物质的合成。随着生物工程研究的进展,通过生物系统合成所需要的化合物的目的能够很快实现,这些研究成果将使合成化学呈现出崭新的局面。

2. 基于储能及能量转换的化学反应

高效储能与能量转化的研究是人类社会研究的重点和热点。这方面的工作包括:常规能源、核能、太阳能、生物能、氢能、燃料电池、锂离子电池、镍氢电池、其他新

能源及其关键材料的研究,高效储能及其能量转化机理研究;能量的转换与储存技术,清洁能源技术,工业与生活垃圾等废弃物的能源资源利用技术等。

太阳能的光电转换虽早已用于卫星,但大规模、大功率的光电转换材料的化学研究则才开始。太阳能光解水产生氢燃料的研究,已引起人们的关注和重视;随着石油资源的近于枯竭,人们加强了对燃烧过程的研究,了解燃烧的机制;燃料电池及其催化剂的研究;高效储氢材料设计与研究等。这些方面的化学反应过程及机理研究,不仅推动化学学科的发展,也是人类充分利用自然资源的关键和需要。

3. 绿色化学与循环经济

绿色化学将成为 21 世纪化学的重大变化。它要求化学反应符合“原子经济性”,即反应产率高,副产物少,而且耗能低,节省原材料,同时还要求反应条件温和,所用化学原料、化学试剂和反应介质以及所生成产物均无毒无害或低毒低害,与环境友好。绿色化学及其新化学途径要求得到选择性高、生产环境友好的产品,并且经济合理。绿色化学的主体思想是采用无毒无害的原料和溶剂。

绿色化学是与生态环境协调发展的更高境界的化学,它要求化学家重新考虑化学问题,从源头上消除任何污染。绿色化学过程不排出任何废物的化学反应(原子经济性),对解决环境污染具有重大意义。

4. 化学计算与设计反应

化学涉及研究新物质的合成方法、分子设计、探索化合物的微观结构与性能等工作。利用其研究的成果、数据以及化学计算技术,可以创造特定性能的物质或材料。分子团簇和原子、分子聚集体等的研究与现代计算机技术、生物、医学等相结合,能获得多角度、多尺度、多层次的研究突破。21 世纪的化学工作者将更普遍地利用计算机辅助进行化学反应优化设计,通过计算机评估浩如烟海的已知反应,从而选择最佳合成路线,制得目标化合物。我们有望让计算机按照所设定的方式去解决材料、生物、环境、生命、能源与资源等现代科学问题。

5. 纳米尺度与纳米化学

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,引起主要相互作用力的不同,导致物质性能及其运动规律等原理方面质的区别。从化学、生物或物理学角度看,纳米级的微粒由于其表面原子或分子所占比例超乎寻常的大而性能变得不同寻常,研究其特殊的光学、电学、催化性质以及特别的量子效应已受到重视。借助 STM/AFM 等技术进行单分子化学的研究,能观察在单分子层次上的许多不同于宏观的新现象和特异效应,对这些新现象和新效应的揭示可能会导致一些科学问题的突破。纳米尺度体系的热力学性质,如铁磁性、铁电性、超导性和熔点等与

粒子尺度有重要的关系。例如,当粒子尺度在 0.1~10 nm 的量级,处于量子尺度和经典尺度的模糊边界中,此时热运动的涨落和布朗运动将起重要的作用。

6. 活性分子及其运动规律认识

21 世纪的化学不仅要面对简单体系,还要面对包括生命体系在内的复杂系统。充分认识和了解人类和生物体内活性分子的运动规律,无疑是 21 世纪化学亟待解决的重大难题之一。如何实现从生物分子到分子生物的飞跃?如何跨越从化学进化到生物进化的鸿沟?人类的大脑是用“泛分子”组装成的最精巧的“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面对的难题。

7. 学科的渗透与交叉将使化学的发展面临更多的机会与挑战

化学向其他学科的渗透趋势在 21 世纪会更加明显。更多的化学工作者会投身到研究生命、材料的队伍中,并在化学与生物学、化学与材料、化学与能源等的交叉领域大有作为。化学必将为解决基因组工程、蛋白质组工程中的问题以及理解大脑的功能和记忆的本质等重大科学问题作出巨大的贡献。

化学的发展已经并将会进一步带动和促进其他相关学科的发展,同时其他学科的发展和技术的进步会反过来推动化学学科的不断前进。研究单分子中的电子过程与能量转移过程,探讨分子间的作用力和电子的运动,描述相关现象的慢过程,跟踪超快过程等的研究,将有助于化学工作者不断地汲取数学、物理学和其他学科中发展的新理论和新方法,在更深层次揭示物质的性质及物质变化的规律。

面对 21 世纪社会发展的需求和新技术、新科学的召唤,化学的用武之地将更加广泛,其中心科学的作用将更加突出。

(1) 创造新材料。新材料既是新技术革命的三大支柱之一,又是能源技术、信息技术和生命科学的物质基础。

(2) 发展绿色化学。全球环境的恶化赋予化学工作者开发绿色化学义不容辞的责任。

(3) 开发新能源。环境问题与能源问题是密切相关的。当今世界的能源结构分布、能源消耗与储量比较都显示出现有的化石能源是不可能持续很久的。在开发新的无污染的燃料电池、利用太阳能发电及其开发新的储能系统,以及在制氢并解决和开发安全、高密度储氢的方法及研制过程中,化学必将发挥核心作用。

(4) 揭示生命的奥妙。生命体系中的化学问题研究仍将是科学研究的前沿。以利用化学理论、研究方法和手段来探索生物医学问题的生物无机化学正在形成。有迹象表明,生物无机化学将成为未来 20 年或更长一段时间内的重要前沿学科方向之一。