

庆祝唐敖庆教授执教五十年 学术论文专集

高等学校化学学报编辑部编

吉林大学出版社
1990年

庆祝唐敖庆教授执教五十年 学术论文专集

高等学校化学学报编辑部编

吉林大学出版社
1990 年

庆祝唐敖庆教授执教 50 年学术论文专集
高等学校化学学报编辑部编

吉林大学出版社出版 (长春市解放大路 85 号)	吉林大学出版社发行 长春市新华印刷厂印刷
开本: 787×1092 毫米 1/16	1990 年 5 月第 1 版
印张: 16.625	1990 年 5 月第 1 次印刷
字数: 422 千字	印数: 1—1000 册
ISBN 7-5601-0485-1/060	定价: 10.00 元



唐毅庆

庆祝唐敖庆教授执教五十年学术论文专集

目 录

热烈庆祝唐敖庆教授执教五十年(代序)	徐光宪	(1)
中国理论化学的奠基人唐敖庆教授——执教五十年纪实		(5)
附录 1 唐敖庆教授年表		
附录 2 唐敖庆教授论著目录		

量 子 化 学

Noether 原理在化学中的应用——轮烯 σ -迁移的反应选择

.....	吴本湘 孙宏伟 赵学庄	(27)
超球谐 3λ 系数的计算	文振翼	(33)
Woodward-Hoffmann 规则与环卡宾的异构化	邓从豪 王秉泽	(38)
H+H ₂ 及其同位素反应在 SLTS 势能面上的变分过渡态理论研究	居冠之 杨玉伟 邓从豪	(43)
光化周环反应中的非绝热跃迁	何福城 李象远	(51)
分子中电荷分布的原子电荷及原子多极矩模型	严继民	(57)
反应途径和模式选择反应的量子化学研究	赵成大 王荣顺 陈 彬 傅 强	(62)
前线杂化轨道在研究 S _N 2 反应中的应用	曹 阳 王友良	(68)
单取代咪唑光敏氧化机理的从头算研究	马思渝 丁燕波 傅孝愿	(73)
掺杂激光晶体 Nd ³⁺ : MLa(MoO ₄) ₂ (M=Li, Na, K) 的配位场理论分析	游效曾 王建军 戴安邦	(79)
关于直链式重复单元共轭体系的 HMO 本征方程的分解问题	杨忠志	(83)
选键化学的新希望——局域模振动态的光谱研究	朱清时 张宝书 钱海波 马月仁 李 丽 张存浩	(90)
多光子电离光谱和激发态分子碰撞传能的倾向规律 ...	沙国河 张存浩	(96)
CASSCF/MRCI 研究——BaH 分子的第一激发态	戴树珊 马忠新	(101)
硝胺及其甲基衍生物的从头计算研究(Ⅱ)——硝胺和它的同位素衍生物 的谐性力场和振动光谱	范康年 肖鹤鸣 李永富	(105)
用定域分子轨道方法研究环丙烷的成键性质	田安民 杨 捷 鄢国森	(111)
原子分子中吸引与排斥的特点及其化学效应	潘道瞿	(117)
重叠模型多重散射 X _α -自洽场方法对 XBS(X=H, F, Cl, Br, I) 系列分子的 研究	孙家鍾 郁 飞 刘韩星	(123)
HCNO 光化转化为 HNCO 的理论研究	刘若庄 于建国 沈德林	(128)
直接自洽场从头算(DSCF)研究	吴国是 顾宪章	(131)

双层点电荷配位场(DSCPCF)模型在二角场稀土配合物中的应用	杨 频 范英芳 王越奎	(137)
(Z)-1,1-二氯-2,3-二苯基-3-(4-甲氧基)-苯基-环丙烷分子结构的X射线 衍射、量子化学和分子力学研究	李 笃 及新华	(143)
H ₃ A—X≡Y 的几何优化和电子结构的 6-31G 基组从头计算	王志中 沈尔忠	(149)
部分同谱问题——共享±√2 能级的苯型烃分子	江元生 于微舟	(153)
蒽醌类抗肿瘤化合物与 DNA 作用的量子化学计算研究	嵇汝运 陈凯先 吴吉安	(161)
阵列双臂激光光纤传感法(MLFS)研究化学动力学及分子动态学	古 正 王守文 傅鹤鉴	(167)
d ^N 离子在四角场中的基矢及有关矩阵元	沙昆源	(171)
簇络分子轨道成对定理及其应用	张乾二 王银桂 余亚雄	(176)
氨、甲胺、二甲胺、三甲胺与卤素的电荷转移配合物的量子化学研究	余敬曾 倪 健	(182)
分子环境中的 Hartree-Fock 原子轨道	黎乐民 肖 力	(187)
Morse 势能函数的改进及相应的双原子分子振动转动本征值问题	李前树 胡旭光	(193)
固氮酶活性中心结构模型的新设想	刘春万 林振阳 杨晓飞	(198)
病理化学过程的电子结构理论(I)——氧合血红素释氧过程中电子结构 的变化	陈志行 云逢存 张亚拉	(204)

高分子物理化学

互穿网络聚合物的结构同力学性能间相关性的研究(I)——互穿网络聚 合物的大形变粘弹性理论	宋名实 钟 阳	(208)
聚合反应动力学的图形方法(IV)——键接异构对阴离子型聚合反应产物 的分子量分布的影响	颜德岳 胡孝东	(215)
A _a 与 B _a 、C ₁ 型缩聚反应在热固化过程中的溶胶凝胶分配	王逢利 高俊刚	(221)
溶液中高聚物分子的交叠和缠结 ...	金春山 孙淑莲 王淑云 崔香淑	(225)
氨基树脂固化过程的溶胶凝胶分配研究	汤心颐 刘凤岐	(230)
液晶聚芳酯与尼龙 6 共混物的研究	王霞瑜 熊前政	(235)
高分子反应的母函数方法	陈欣方 唐敦庆	(240)
用于先进复合材料热塑性树脂基体的研究	吴忠文 郑玉斌 曹俊奎 于笑梅	(245)
加聚反应动力学与扩散模型	沈家骢 杨梅林	(250)
期望跻身于世界先进之林	《高等学校化学学报》编辑部	(256)

Special Collection of Academic Theses in Celebration of Professor Tang Aoqing's Teaching and Researching for Five Decades

Contents

Celebration of Prof. Tang Aoqing's Teaching and Researching for Five Decades—An	
Article in Lieu of the Preface	Xu Guangxian (4)
Professor Tang Aoqing—the Founder of Modern Theoretical Chemistry in China	
—— The Record of Actual Merits of Professor Tang's Teaching and Researching for Five Decades	(10)
Appendix I : Professor Tang Aoqing's Biographic Sketch	
Appendix II : Contents of Professor Tang Aoqing's Publications	

Quantum Chemistry

Application of Noether's Theorem in Chemistry—The sigmatropic Reaction Selection	
Rules of Annulenes	Wu Benxiang, Sun Hongwei, Zhao Xuezhuan (32)
Calculation of the 3λ Coefficients for Hyperspherical Harmonics	
.....	Wen Zhenyi (37)
Woodward-Hoffmann Rules and Isomerizations of Cyclic Carbenes	
.....	Deng Conghao, Wang Bingze (42)
Variational Transition State Theory Study for the Reaction $H+H_2$ and Its Isotopic	
Analogues on the SLTS Potential Energy Surface	
.....	Ju Guanzhi, Yang Yuwei, Deng Conghao (50)
Nonadiabatic Transitions in Photochemical Pericyclic Reactions	
.....	He Fucheng, Li Xiangyuan (56)
A Model of the Atomic Charge and Atomic Multipole Moments of the Charge Distribution in Molecules	
	Yan Jimin (61)
The <i>Ab Initio</i> Study on the Reaction Paths and the Mode-Selective Chemical Reactions	
.....	Zhao Chengda, Wang Rongshun, Chen Bin, Fu Qiang (67)
The Application of Frontier Hybridized Orbitals in Studies of S_N2 Reactions	
.....	Cao Yang, Wang Youliang (72)
The <i>Ab Initio</i> Study for the Reaction Mechanism of Photosensitized Oxidation of	
Monosubstituted Imidazoles	Ma Siyu, Ding Yanbo, Fu Xiaoyuan (78)
Analysis of Ligand-Field Theory and Stark Sublevels in Doped Laser Crystals Nd^{3+} ;	
$MLa(MoO_4)_2(M=Li, Na, K)$	You Xiaozeng, Wang Jianjun, Dai Anbang (82)
On the Factoring Problem of HMO Eigenequations of Straight Chain Conjugate Systems with Repeating Units	
	Yang Zhongzhi (89)

New Prospect of Bond-Selective Chemistry——the Spectroscopic Study of Local-Mode
Vibrational State

- Zhu Qingshi, Zhang Baoshu, Qian Haibo, Ma Yueren, Li Li, Zhang Cunhao (95)
- Propensity Rules in Collisional Energy Transfer from Excited Molecules as Studied by
Multi-Photon Ionization Spectroscopy Sha Guohe, Zhang Cunhao (100)
- Studies on CASSCF/MRCI Method——the First Excited State of BaH Molecules
..... Dai Shushan, Ma Zhongxin (104)
- Studies on Nitramide and Its Methyl Derivatives with *Ab Initio* Calculations(II)
——The Harmonic Force Field and Vibrational Spectra of Nitramide and Its Isotopic
Derivatives Fan Kangnian, Xiao Heming, Li Yongfu (110)
- Research in the Bonding Behaviour of Cyclopropane by Using Localized Molecular Orbital
Method Tian Anmin, Yang Jie, Yan Guosen (116)
- Some Peculiarities of the Attraction and Repulsion in Atoms and Molecules and Their
Chemical Effects Pan Daokai (122)
- Application of Improved Overlapping Muffin Tin- X_α Method to XBS($X=H, F, Cl, Br$)
Molecules Sun Jiazhong, Yu Fei, Liu Hanxing (127)
- A Theoretical Study on the Photochemical Conversion of HCNO into HNCO
..... Liu Ruozhuang, Yu Jianguo, Shen Delin (130)
- Studies on the Direct SCF Approach of *Ab Initio* Calculation
..... Wu Guoshi, Gu Xianzhang (136)
- Application of Double Sphere Coordination Point Charge Field Model to the
Dihedral Field of Rare Earth Complexes ... Yang Pin, Fan Yingfang, Wang Yuekui (142)
- Studies on Structure of (Z)-1,1-Dichloro-2,3-Diphenyl-3-(4-Methoxy) Phenyl-
Cyclopropane Using X-Ray Diffraction, Molecular Orbital Calculation and Molecular
Mechanics Li Du, Ji Xinhua (148)
- Ab Initio* Calculations of $H_3A-X\equiv Y$ Molecules Wang Zhizhong, Shen Erzhong (152)
- On Subspectral Problem——Benzenoid Hydrocarbons with Common Eigenvalues $\pm\sqrt{2}$
..... Jiang Yuansheng, Yu Weizhou (160)
- A Study of the Ways of Binding of Antitumor Anthracyclines with DNA by Means of
Quantum Chemical Calculations Ji Ruyun, Chen Kaixian, Wu Jian (166)
- A Method of Matrix Laserfibroma Sensor(MLFS) for Studying Chemical Kinetics and
Molecular Dynamics Gu Zheng, Wang Shouwen, Fu Hejian (170)
- The Basic Vectors of d^N Ions in Tetragonal Field and Matrix Elements Related
..... Sha Kunyuan (175)
- Pairing Theorem and Its Application for the Cluster Skeletal Molecular Orbitals
..... Zhang Qianer, Wang Yingui, Yu Yaxiong (181)
- Quantum Chemistry Study on Charge Transfer Complexes of Ammonia, Methyl Amine,
Dimethyl Amine and Trimethyl Amine with Halogen Molecules
..... She Jingzeng, Ni Jian (186)
- Orbitals of an Atom in Molecular Environment Under Hartree-Fock Approximation

.....	Li Lemin, Xiao Li	(192)
The Improvement of Morse Potential Energy Function and the Vibration-Rotational Problem for Corresponding Diatomic Molecules		
.....	Li Qianshu, Hu Xuguang	(197)
New Assumption on the Active Centre Models of Nitrogenase		
.....	Liu Chunwan, Lin Zhenyang, Yang Xiaofei	(203)
Electronic Structure Theory of Chemical Reactions in Pathology(I)——The Change of Electronic Structures of Oxyhemoglobin in the Oxygen Release Process		
.....	Chen Zhixing, Yun Fengcun, Zhang Yala	(207)

Physical Chemistry of Macromolecules

Studies on the Relationship Between the Network Structure and the Mechanical Properties for Interpenetrating Polymer Networks(I)——The Theory of Viscoelasticity for Interpenetrating Polymer Networks at Large Deformation		
.....	Song Mingshi, Zhong Yang	(214)
Graphic Method of the Kinetics of Polymerization Reaction(IV)——The Effect of Positional Isomerism on the Molecular Weight Distribution of the Products from Anionic Polymerization		
.....	Yan Deyue, Hu Xiaodong	(220)
Sol-Gel Distribution of Model Condensation Polymerization of A_n with B_n , C_1 in the Thermosetting Reaction		
.....	Wang Fengli, Gao Jungang	(224)
The Overlap and Entanglement of Macromolecules in Solution		
.....	Jin Chunshan, Sun Shulian, Wang Shuyun, Cui Xiangshu	(229)
Sol-Gel Distribution in Curing Process of Amino Resins		
.....	Tang Xinyi, Liu Fengqi	(234)
Studies on Blends of Nylon 6 and a Thermotropic Liquid Crystalline Polyarylester		
.....	Wang Xiayu, Xiong Qianzheng	(239)
Generating Function Method of Polymerization		
.....	Chen Xinfang, Tang Auqing	(244)
Studies on the Polymer Matrix Used for Composites		
.....	Wu Zhongwen, Zheng Yubin, Cao Junkui, Yu Xiaomei	(249)
The Kinetics and Diffusion Modeling of Addition Polymerization		
.....	Shen Jiacong, Yang Meilin	(255)
Try to Rank among the Most Advanced Scientific Journals in the World		
.....	Editorial Department of Chemical Journal of Chinese Universities	(258)

热烈庆祝唐敖庆教授执教五十年(代序)

中国化学会理事长 徐光宪

岁月流逝,光阴荏苒,唐敖庆同志从1940年在西南联大化学系执教并从事科学研究以来已经50年了.他在新中国成立后不久,于1949年11月在美国哥伦比亚大学以突出优秀的成绩获得物理化学博士学位,辞谢了导师及其他老师真挚的挽留,冲破了美国政府设置的重重障碍,于1950年1月回到刚刚解放的新中国,在北京大学化学系任教授.1952年院系调整时,北大、清华、燕京三校的理科集中于北大,唐敖庆教授从全国大局出发,响应国家号召,主动要求离开条件最优越且有深厚感情的母校,到吉林大学的前身——东北人民大学去艰苦创业,先后担任副校长、校长和名誉校长.直到现在,还在担任国家自然科学基金委员会主任的繁重工作之余,以七十多岁的高龄,每年暑假抽暇到吉林大学讲授理论化学的最新进展,每周达12小时,比中年教授每周的任课时间还多,同时还指导多名博士研究生,并始终战斗在科研第一线.

几十年来,唐敖庆同志以他杰出的才华、丰富的教学科研经验、忘我的献身精神,与吉林大学的同志们共同艰苦奋斗,把学校办成全国著名的重点大学之一.在科学研究和培养人才方面,他是我国理论化学的奠基人.敖庆同志是一位具有远见卓识、造诣精深、蜚声国内外的科学家,他始终以赶超世界先进学术水平为己任,科学研究取得了卓越的成就,在配位场理论方法、分子轨道图形理论、高分子反应统计理论等方面获得国际领先的研究成果,两次获得国家自然科学一等奖;他也是一位德高望重、诲人不倦、功绩卓著的教育家.他一贯重视多层次地培养专业人才,特别是把培养高水平的学术领导人,作为自己对国家最重要的贡献,他主持的两届以学术前沿重大课题为研究方向的学术讨论班,为某些基础学科高级专门人才的培养,提供了基本上可以立足于国内的重要实践经验;为全国培养了一批具有国际水平的理论化学学术带头人.他在这方面的功绩,将和他在科学上的贡献一样,载入我国高等教育和化学学科发展的史册.

1986年初,作为国家科技体制改革的重要决策之一,国务院决定成立国家自然科学基金委员会.唐敖庆同志受命出任主任,在很短的时间内,组建领导班子,抽调得力干部,执行中央方针政策,制订了各项规章制度,提出“依靠专家,发扬民主,择优支持,公平合理”的十六字评审原则,聘请全国知名专家学者近500人,组成40余个学科评审组,在十分紧迫的时间内,当年就受理1万多项基金申请,从中评选出3千余个优秀项目给予资助.4年多来,基金委的工作已在

全国科技界赢得了声誉，大家认为基金项目资助的金额虽然不多，但获得批准是很光荣的，因为它是严格公正择优选出来的。

教庆同志现任中国科协副主席，1982年他当选为中国化学会第21届理事会理事长，对科协和中国化学会的发展做出了积极的贡献。他对学会的工作十分关心，几次对我说，化学会要继承担任理事长长达十年之久的杨石先先生树立的优良传统，团结全国化学界，为发展祖国的化学事业而共同奋斗。他自己也为维护化学界的团结、树立优良的学风和会风、提高我国的化学学术水平做出了贡献。为了发扬民主，使学会领导工作永远朝气蓬勃，他与卢嘉锡、严东生、钱人元4位第21届理事长联合倡议，执行理事长每人担任1年，不得连任，为学会工作开创了一个很好的先例。在此纪念他执教五十年之际，我受化学会第22届常务理事会的委托，特向唐教庆同志表示热烈的祝贺和衷心的感谢。

我和唐教庆同志相识已有42年。42年来他始终是我的良师益友，在我重要的人生转折点上，都曾给我深刻的影响和热情的帮助。

我于1947年底赴美自费留学，先在圣路易城的华盛顿大学研究生院读了一学期，尽管所选4门课程都得A，但仍得不到下学期的T.A.，而面临辍学的危险。当时教庆同志的同学王瑞骥已在华大获Ph.D.。经他和教庆同志的推荐，我转到哥伦比亚大学研究生院暑期班来“试读”。

唐教庆入哥大一年后就以名列榜首的优异成绩，通过博士资格考试，并被校方授予一枚象征可打开科学大门的金钥匙，深受导师的器重和同学们的爱戴。这是他为中国人争得的荣誉，大大提高了中国研究生在哥大化学系的地位。

哥大的助教有两种，一种是University Assistant，另一种是Department Assistant。其差别是前者可免交学费，并正式列入教员名录，而后者则否。在1948年的暑期试读班的80余名同学中只有我一人获得University Assistant，这是与唐教庆的影响和他对我的具体帮助和推荐分不开的。这样不但解脱了我面临辍学的经济困境，还达到了我转入第一流大学的目的。这是唐教庆同志在我一生中的一个重要转折点给我的巨大帮助。

他对我第二个更为重要的影响和帮助是在政治思想方面。教庆同志在西南联大时就曾参加进步学生运动，他在纽约有几位思想进步的同学，经常到他的寓所来聊天，他的寓所因而被戏称为“唐氏茶馆”。我到纽约时，正好与他同寓的彭少逸同志要离开纽约，他就邀我和他同寓。久而久之，我受教庆同志和他的朋友们的思想影响很深，后来知道他们这些志同道合的同学有一个叫做“新文化学会”的组织，名称取自毛主席在《新民主主义论》中谈到的新民主主义文化，不久我也被吸收参加“新文化学会”以及“留美科学工作者协会”等进步组织。

当时哥大有一个国民党控制的“哥伦比亚大学中国学生会”，为消除国内解放战争节节胜利的政治影响，扬言要开展一系列“拥蒋崇美”活动，他们在1948年的圣诞节前租了Wordorf旅馆要举办所谓救济哥大中国同学的慈善舞会。我们认

为这是对哥大中国同学的侮辱，便发起近百人的签名要求取消这个舞会，但舞会组织者不予理睬，于是我们发起组织新的“哥伦比亚大学中国同学会”，推荐在同学中威望最高的唐敖庆同志任主席，展开了针锋相对的斗争，并取得完全的胜利，参加我们同学会的会员达到200多人，而“学生会”被迫解散。

“哥大中国同学会”成立后，“唐氏茶馆”的生意更加兴隆了，后来又称为“兴隆茶馆”。我们和新文化学会、留美科协 and 留美基督教青年会等一起组织了许多活动，如1949年10月在纽约河边教堂(Riverside Church)附近的国际学生公寓举办了庆祝中华人民共和国成立大会，请当时的美洲华侨日报总编辑唐明照同志做形势报告，向联合国发了签名通电，要求驱逐已被中国人民唾弃的国民党代表，接纳新中国的代表；发起慰问解放军的“一人一元劳军运动”，以及请老舍同志做有关鲁迅的学术报告，放映第一部新中国的电影等。

当时敖庆同志还不是党员，但和一些地下党同志过往甚密。他深知新中国迫切需要大批知识分子，便积极开展工作，团结留美中国同学，使他们对共产党领导的新中国有所了解，尽可能争取他们回到新中国参加社会主义建设。当时敖庆同志和他主持的哥大中国同学会和中国留美科学工作者协会、留美基督教青年会等组织一起，在促使留美学生回国过程中确实起了积极的带头作用。

回国以后，敖庆同志在政治和业务上对我的影响和帮助也是十分巨大的。他对朋友是如此，对学生更是注意教书育人，以自己的言行影响学生和他的研究集体。1978年10月，他在上海参加中国化学会年会期间，曾接受采访，当记者谈到：“上海有不少中青年科学工作者得到您的帮助”时，他爽朗地说：“那是我应该做的。我也是在老师的悉心培养下成长起来的。这次来参加化学年会的化学界老前辈杨石先教授、黄子卿教授，都是我的老师。”他还打了一个比方说：“有西藏大高原才有喜马拉雅山，有喜马拉雅山才有珠穆朗玛峰。科学的发展有一个积累提高的过程，我们年令大一点的科学工作者，就要发扬甘为人梯的精神，做铺路石子，为实现四个现代化多做一些打基础的工作，应该支持和培养中青年科学工作者们，让他们奇峰突起”。他一直认为学术领导人，应该有志气有抱负，为了使我国不落后于国际上科学飞速发展的形势，乃至跻身于世界先进行列，必须善于观察和随时把握住国际学术发展的新动向，选择有开拓性的新课题，以革命者勇往直前的精神带领自己的研究集体，向科学前沿进击。

在庆贺敖庆同志执教五十周年之际，我衷心地祝愿他健康长寿，继续指导我国的理论化学向前发展！

1990年3月12日于北京大学

**Celebration of Prof. Tang Aoqing's Teaching and
Researching for Five Decades**

——An Article in Lieu of the Preface

Xu Guangxian, *Chairman of the Board of Directors of Chinese Chemical Society*

中国理论化学的奠基人唐敖庆教授

——执教五十年纪实

唐敖庆教授, 1915年11月18日出生于江苏宜兴, 他是中国卓越的教育家、科学家。现任国家自然科学基金委员会主任, 吉林大学名誉校长, 吉林大学理论化学研究所名誉所长, 中国科学院学部委员、主席团成员, 国务院学位委员会委员, 第三届中国科学技术协会副主席, 第21届中国化学会理事长, 《高等学校化学学报》主编, 国际量子分子科学研究院院士, 《国际量子化学杂志》编委等。他是中共十大、十一大、十二大代表, 第二届、第三届全国人大代表, 第六届全国政协委员, 第七届全国政协常务委员。

一

唐敖庆自幼勤奋好学, 在家乡读完初中, 迫于家庭经济困难, 未能升入高中而考入免费的无锡师范学校。入学不久, “九·一八”事变发生, 激发了他的爱国热情, 曾参加赴南京请愿团。自此以后更加关心国家大事, 阅读进步书刊, 其中有邹韬奋主编的《生活》杂志和高尔基的小说等。他为筹集上大学费用, 师范学校毕业后到本县凌霄小学教书。1936年以优异成绩考入北京大学化学系。“七·七”事变, 日寇全面侵略中国, “华北之大竟放不下一张平静的书桌”, 于是随校南迁, 辗转数千里先在长沙临时大学学习。1938年临时大学迁到昆明, 改名为西南联大, 他在化学系继续学习, 1940年毕业, 留校任教。

抗日战争胜利后, 于1946年, 唐敖庆和王瑞骥、李政道、朱光亚、孙本旺等年轻学者, 作为助手随同当时我国知名学者化学家曾昭抡教授、数学家华罗庚教授、物理学家吴大猷教授赴美考察原子能。尔后, 唐经推荐留在哥伦比亚大学攻读博士学位。入学后他就紧张地奔走于化学系与数学系之间, 顽强地进行学习, 为攀登理论化学高峰进一步打下了坚实而深厚的基础。他的考试成绩, 在哥伦比亚大学化学系二百余名研究生中名列前茅, 因而获得大学荣誉奖学金, 并被推选参加两个荣誉化学会。在哥伦比亚大学学习后期, 随着国内革命形势的迅速发展, 校内的三百多名中国留学生中发生了明显的政治分歧。国民党控制的“哥伦比亚大学中国学生会”, 为消除解放战争胜利消息的影响, 扬言要以中国留学生的名义开展一系列“拥蒋崇美”的活动。这时唐敖庆已第一次读到《新民主主义论》, 真诚接受书中以质朴无华的语言道出的令人信服的真理: 只有革命, 中国人民才有出路, 只有社会主义才能救中国。他旗帜鲜明地与一部分志同道合的同学, 通过各种途径进行宣传活 动, 使更多的中国留学生, 正确认识祖国正在发生翻天覆地的变化。从而不断地粉碎了由国民党特务分子导演的一连串政治丑剧, 并在斗争中

成立了进步的学生组织“哥伦比亚大学中国同学会”，唐敖庆当选为第一任主席，与“中国留美科学工作者协会”等进步组织一起，于1949年10月在纽约国际学生公寓举办庆祝中华人民共和国成立大会。请了解国内情况的人士讲祖国的形势，发起“一人一元劳军运动”，慰问人民解放军。在通过论文答辩获得博士学位之后，急于归国报效新中国的心情再也按捺不住了。唐敖庆婉言谢绝了导师真挚的挽留，冲破重重阻力，终于在1950年初踏上了祖国的大地。从此，年富力强的唐敖庆，如鱼得水，开始了自己献身社会主义建设事业的光辉历程。1950年在北京大学化学系任教授，1952年调东北人民大学（吉林大学前身）化学系任教授，1956年任吉林大学副校长，1978年任吉林大学校长，1986年初调任国家自然科学基金委员会主任至今。

回国四十年来，唐敖庆教授以他在培养人才、学术研究方面的卓越成绩，成为蜚声国内外的教育家和科学家，是五、六十年代回国工作的2500名旅居海外的专家学者中的杰出代表。

二

1952年全国高等学校院系调整时，唐敖庆响应国家的号召，放弃了北京优越的工作和生活条件，到长春支援东北高等教育事业，与无机化学家关实之教授、物理化学家蔡镗生教授、有机化学家陶慰孙教授一起通力合作，率领来自燕京大学、北京大学、清华大学、交通大学、浙江大学、中山大学、复旦大学、金陵大学和东北师范大学等校的7名中年教师和11名应届毕业生，开创和建设吉林大学化学系。经过三十多年的艰苦工作，从无到有，逐渐壮大，使吉林大学化学系跻身于国内先进行列，并在国际上具有一定影响。

在吉林大学化学系创建时期，唐敖庆先后主讲了无机化学、物理化学、物质结构、量子化学、统计力学等十多门课程，经常同时开两门甚至三门课程，有时每周讲课竟达16学时之多，以具有严格科学体系的课程内容和独特的授课风格，对基础课教学进行了开拓性的工作，培养了一批基础理论扎实、治学作风严谨的主讲教师，现在他们已大都成为国内教学中的学术领导人。

随着化学系基础课教师的逐渐成长，唐敖庆的教学工作又转向了一个新层次，培养对象从校内扩大到全国。通过指导研究生、办进修班、学术讨论班等形式，培养更高一级的专业基础理论人才。受教育部委托，他和卢嘉锡教授、吴征铠教授、徐光宪教授等一起，先后于1953年在青岛、1954年在北京办了两期“物质结构”暑期进修班，培养了我国第一批物质结构师资；1958~1960年、1963~1965年在长春先后主办了以学术前沿课题为研究方向的高分子物理化学学术讨论班与物质结构学术讨论班。在这两个学术讨论班上，他首先在国内开出了高分子物理化学方面的系列课程和群论及其在物质结构中应用方面的6门课程，即：《有限群表示理论》、《连续群表示理论》、《群论在核谱学中的应用》、《分子对称群的不

可约张量法》、《群论在固体物理中的应用》和《李代数及李群的表示理论》。1978~1980年,以吉林大学为主,联合山东大学、北京师范大学、厦门大学、四川大学、云南大学和东北师范大学等6校在长春共同举办了量子化学研究班和进修班,学员来自全国高校、科研单位的中、青年教学科研人员共259人;1986年暑期,与徐光宪教授等在长春举办了量子化学教学研究班,学员达140多人;1988、1989年的两个暑期他又在长春先后举办了长春地区和全国的高分子标度理论讲习班,共有200余人听讲。特别是通过上述两个学术讨论班的培养和科研工作,涌现出一批具有高水平的学术领导人,其中有:吉林大学孙家钟教授(吉林大学理论化学研究所所长,国务院学位委员会化学学科评议组成员,博士生导师,全国博士后科研流动站管理协调委员会化学学科专家组成员,国际《分子液体》编委);吉林大学江元生教授(博士生导师,世界理论有机化学家联合会会员);吉林大学汤心颐教授(博士生导师);吉林大学沈家骢教授(国家教委科学技术委员会委员兼化学学科组组长,博士生导师,曾任吉林大学的副校长);山东大学邓从豪教授(博士生导师,曾任山东大学校长);北京师范大学刘若庄教授(博士生导师,世界理论有机化学家联合会会员);厦门大学张乾二教授(博士生导师,厦门大学化学系主任,兼中国科学院福建物质结构研究所所长,国际《理论化学》编委);四川大学鄯国森教授(曾任四川大学校长,博士生导师)和云南大学戴树珊教授(云南大学化学系主任,云南省化学会理事长)等。

从1953年开始到1966年,唐敖庆先后指导过物质结构、高分子物理化学专业方面的20多名研究生;1978年恢复研究生制度以来,唐敖庆自己共招收了14名博士生、26名硕士生。

唐敖庆教授在担任教育领导工作中,对吉林大学的建设和发展做出了卓越的贡献。1956年他作为副校长,协助著名教育家匡亚明校长使学校事业有了迅速的发展,吉林大学于1959年进入了国家重点综合性大学的行列。从1978年起,他就任吉林大学的校长,主持和领导学校的全面工作,自觉地贯彻邓小平同志提出的重点高等学校要办成“既是教育中心,又是科研中心”的指示,使学校各项事业又取得了新的发展,在教学质量和科学水平的提高上又有若干新的突破。经国务院批准,吉林大学于1984年被列入首批试办研究生院的重点院校,使学校进入到一个新的历史发展阶段。

三

唐敖庆教授学术造诣精深,远见卓识,抱有为国争光的雄心壮志,数十年如一日,始终及时把握住国际学术前沿的新动向,开拓新课题,为赶超国际学术界先进水平,不断地取得一系列的卓越成就。

50年代初,美国著名量子化学家皮泽提出了“分子内旋转”公式,但它的适用范围有其局限性,只能用于解释某些比较简单的分子内旋转。唐敖庆在此基础

上,利用国外现有的数据和资料,重新进行深入分析,提出一个可以计算许多复杂分子内旋转的能量变化规律的公式,即“势能函数公式”。利用这个公式可以推算出物质的一些性质,为从结构上改变物质的性能提供了比较可靠的依据。1955年,这项研究成果公开发表之后,美国著名量子化学家威尔逊给予很高评价。中国国内和苏联都把这项成果写进教科书和学术专著。此项成果于1957年1月获得我国首次自然科学奖——中国科学院颁发的自然科学三等奖。

1956年,在国家十二年科学发展规划的鼓舞下,唐敖庆教授为解决国家建设急需的高分子材料合成和改性问题,他毅然暂时搁下了自己熟悉的课题,转入从事高分子反应与结构关系的研究,和他的高分子物理化学研究集体(包括学术讨论班的学员)对高分子的主要反应诸如缩聚、交联与固化、加聚、共聚及裂解等反应逐一进行深入研究。把凝胶化理论发展成为溶胶凝胶分配理论,引入易测定的溶胶反应程度,使研究范围从凝胶点以前扩展到全过程;利用临界反应程度与最大反应程度的概念,使理论预测范围从凝胶点扩展到凝胶区间和凝胶面;引入相应校正参数,删去了等活性与内环化的假定,形成了完整的高分子固化理论,在国内涂料与固体推进剂工业得到广泛应用。在加聚反应领域内提出了一种用概率论解动力学方程的新方法;在 Ricatt 方程求解上作出了贡献,归纳为图形分析的方法,发展成为反应机理与分子量分布关系的统一理论,并由此推导出共聚物链段分布与分子量分布函数。高分子反应五个方面的工作形成具有明显特色的体系,高分子反应统计理论的建立与发展,为高分子结构与反应参数间建立定量关系、为设计预定结构的产物确定反应条件与生产工艺、配方提供了理论依据。他和他的研究集体30年来,在分子反应统计理论领域辛勤耕耘,其主要研究成果“缩聚、加聚与交联反应统计理论”获1989年国家自然科学二等奖。

60年代初,我国在激光、络合萃取、催化等科学领域开展了大量的实验研究工作,积累了许多资料,急需从理论上总结规律。化学键理论中的重要分支——配位场理论正是上述领域所需要的基础理论,但还很不完善。唐敖庆就立即以这一科学前沿课题为研究方向,带领物质结构学术讨论班的骨干成员开展了研究工作,以两年多的时间取得了突破性的成果,创造性地发展和完善了配位场理论及其研究方法,成功地定义了三维旋转群到分子点群间的耦合系数,建立了一套完整的从连续群到分子点群的不可约张量方法,进一步统一了配位场理论中的各种方案,并提出了新的方案。此项研究成果被1966年北京国际暑期物理讨论会评为十项优秀成果之一。讨论会认为这项成果“丰富和发展了配位场理论,为发展化学工业催化剂和受激光发射等科学技术提供了新的理论依据”,并于1982年获国家自然科学一等奖。

70年代初,分子轨道图形理论作为理论化学一个新的重要分支,已引起国际学术界的广泛注意。唐敖庆和江元生顶着“四人帮”的压力,1975年就着手此领域的系统研究。十多年来提出和发展了一系列新的数学技巧和模型方法,主要的贡