

●主 编 邓从豪
副主编 张道民

现代化学的 前沿和问题

山东大学出版社

现代化学的前沿和问题

主 编 邓从豪

副主编 张道民

山东大学出版社

一九八七年

现代化学的前沿和问题

主 编 邓从豪

副主编 张道民

*

山东大学出版社出版

山东省新华书店发行 山东大学印刷厂印刷

开本850×1168 1/32 14印张 358千字

1987年10月第1版 1987年10月第1次印刷

印数1—7,000

ISBN 7—5601—0041—1/O·2

统一书号: 13338·24 定价: 3.80元

编 者 的 话

化学前沿是世代化学家为之献身而荣耀人间的战场。披荆斩棘奋斗在化学前沿的豪杰们，是攻破科学堡垒的突击手，是占领科学高地的举旗人。伟大化学家 A. B. Nobel 就是杰出的代表人物，他的不朽功勋已成为鼓励全世界科学家勇于探索而创造奇绩的力量。广大化学工作者，尤其青年化学工作者，更希望自己尽快地进入前沿阵地。因此，化学前沿的一“枪声”、一“炮声”，都成为引人注意的目标。

目前，国内外的化学家对化学前沿的发展趋势和问题都很感兴趣，1982年，K. J. Laidler 根据1981年国际纯化学和应用化学会议的一部分论文报告主编了一本《Frontiers of Chemistry》，我国学者研究或介绍化学前沿的文章仍散见于各种化学期刊之中。所以，汇编一本反映我国学者研究化学前沿情况的专著实有必要。

现代化学前沿是个范围广阔而又多向发展的领域，不论就涉及的内容之丰富和问题之多看，还是就其研究的深度和广度看，任何一个历史时期的化学前沿都不能同它相比。而且现代化学前沿研究课题的主要特点又是综合性，所以，涉猎化学前沿的任何研究人员，要想打破僵局，取得突破性的成就，都不能仅限于面窄的专业范围内。况且现代化学前沿的许多难题都互有牵连，如果能把各方面讨论化学前沿问题的文章组合汇编在一起，也许对综合地研究化学前沿问题是有益的。这就是我们立意编写《现代化学的前沿和问题》一书的主要根据。我们期望，编写这样一本书，能为广大年青化学工作者、研究生以及化学专业高年级的学生利用较少的时间就能比较全面地了解现代化学前沿的概况提供一点方便条件，并能对活跃学术气氛，开阔视野，拓宽思路，促进化

学前沿的研究也有所作用。

鉴于上述目的，我们邀请了一部分化学专业工作者和自然辩证法工作者联合编写，这样做，既有利于深入讨论特殊问题，又有利于探讨共性问题。作者们都各自从不同的角度做了认真的努力，而且有些文章就是化学工作者和辩证法工作者合作或者是集体撰写的。

本书在编写过程中，注意了吸收老、中、青三方面的作者，以中年作者为最多。在撰文中尽量以集中讨论几个问题的方式形成各个章节，试图在引证必要数据资料的基础上，做到有分析，有观点，使读者在了解知识的同时，也能了解到各个作者研究问题的方法。当然，化学前沿的问题是无穷无尽的，我们并不奢望通过这本书达到解决化学前沿难题或无遗漏地介绍化学前沿问题的目的。我们只想以此作为系统地研究化学前沿问题的开始。

各位作者在撰文中都重视了引用八十年代以来的参考文献，并遵照百花齐放、百家争鸣的方针阐述了自己的看法，我们编者除了设计全书的结构和布局外，只是对其中一些章节做了文字补充工作，基本上保留了各作者的特色，而且在同一本书中允许有不同的观点存在，如果强求统一，就有可能扼杀一些新的思想，使这本书失去应有的生气。

这本书在编写过程中，得到了许多专家、学者的鼓励和支持，如清华大学化学系宋心琦教授审阅了《计算机辅助人工智能在化学中的应用与趋势》一章；中国科学院地球化学研究所王联魁研究员审阅了《地球化学中微观与宏观研究的统一问题》一章，王道德教授审阅了《元素的宇宙化学》一章，在此代表作者并以我们的名义向他们表示衷心的感谢。山东海洋学院张正斌教授虽因工作太忙而未能亲自撰文，但却热情支持本书的编写工作，提了许多建设性的意见，借此向他以及其他支持者深表谢意。

我国活跃在化学前沿的人才济济，尤其那些造诣很深的著名化学家，是本书最合适的撰写者，只因他们重任在身，日理万机，

盛邀难约。尽管如此，我们在撰文中还是注意了吸收他们在论著中的见解。还有不少的学者想参加撰写工作，只因本书篇幅受限，未能如愿。对此我们甚表抱歉，并对他们的热情支持表示感谢。我们缺乏编写这种书的经验和才智，笨拙之处在所难免，敬请读者指正。

一九八七年八月

各章执笔人是:

- 第一、二、三章 青岛大学 张道民
第四章 华东师范大学 周伟良 盛根玉
第五章 北京大学 周公度
第六章 华东师范大学 朱传征
第七章 同济大学 邱元武
第八章 华南师范大学 江琳才
第九章 上海激光技术研究所 邱明新
第十章 西北大学 张纪岳
第十一章 北京师范大学 张嘉同
第十二章 山东大学 刘洪云
第十三章 北京师范大学 张嘉同 鲍 鸥
第十四章 山东大学 陆懋荪 朱贵云 陈荣礼 尹佩玉 张悦圣
第十五章 清华大学 胡鑫尧
第十六章 青岛大学 张道民
第十七章 清华大学 田杰谟
第十八章 中国科学院有机化学研究所 曹者瑜
第十九章 中国科学院有机化学研究所 曾广植
第二十章 中国科学院环境化学研究所 刘静宜
第二十一章 中国科学院地球化学研究所 杨文金 陈永亨
第二十二章 中国科学院地球化学研究所 陈永亨 杨文金
第二十三章 云南大学 陶元器
第二十四章 苏州大学 曹 阳
第二十五章 中央党校 解 强
第二十六章 南京工学院 吕迺基
第二十七章 杭州大学 金松寿

目 录

第一编 化学前沿概观	(1)
第一章 化学前沿的分类.....	(1)
第二章 化学前沿的一般特征.....	(21)
第三章 化学前沿的形成和发展.....	(40)
第二编 基础化学的前沿和问题	(49)
第四章 量子化学的发展及趋势.....	(49)
第五章 晶体结构测定的成就和问题.....	(60)
第六章 化学动力学和催化.....	(67)
第七章 用分子束和激光技术研究化学反应动力学.....	(81)
第八章 电化学中的疑难问题.....	(97)
第九章 激光化学研究中的若干难题.....	(114)
第十章 化学振荡与化学波.....	(129)
第十一章 原子价概念的发展及问题.....	(143)
第十二章 共振论的新发展.....	(154)
第十三章 芳香过渡态理论的发展及有机量子化学理 论的统一问题.....	(172)
第十四章 现代分析化学前沿中几个诱人的方向.....	(183)
第三编 应用化学的前沿和问题	(199)
第十五章 计算机辅助人工智能在化学中的应用与趋势.....	(199)
第十六章 能源化学及其若干发展方向.....	(212)
第十七章 固态离子导体的现状和未来.....	(229)
第十八章 酶自促抑制剂与高效低毒药物设计.....	(242)
第十九章 味道化学.....	(252)
第二十章 环境化学的发展动向.....	(277)

第二十一章	地球化学中微观与宏观研究的统一问题…	(285)
第二十二章	元素的宇宙化学……………	(300)
第二十三章	星际化学的现状和前景……………	(315)
第四编	现代化学综合发展的趋势和问题……………	(336)
第二十四章	化学与数学……………	(336)
第二十五章	化学与物理学在理论上的统一……………	(375)
第二十六章	化学向生命科学渗透的若干趋势与问题…	(397)
第二十七章	化学与控制论……………	(411)

第一编 化学前沿概观

化学科学经过三百多年的历程，今天已建立起庞大的现代知识体系，开拓出广阔的前沿领域。要深刻认识和全面把握这个日新月异的领域，不仅需要研究它的各个局部，也需要研究它的全局。从化学科学今后的运筹和发展看，化学前沿领域的全局研究更为重要。因此，以化学前沿的现状和发展趋势为依据，探讨化学前沿的分类、一般特征及其形成和发展规律，已成为十分迫切的课题。尽管完成这种课题的难度很大，但是认真地做些研究，也许是有益的。所以，本编的宗旨，是试图在考察各个专题之前，对化学前沿初步做些概括性的工作，以使读者先对化学前沿有个大概的了解。

第一章 化学前沿的分类

现代化学前沿，内容丰富而形式多样，问题累累，头绪万千，而当前人们对它的理解又各有所长，面对这一现实，要达到系统了解化学前沿的目的，首先得研究它的科学分类。

K.J.Laidler 在他主编的《Frontiers of Chemistry》中，把化学前沿领域分为两大部分：一指应用化学的前沿领域，二指基础化学的前沿领域。我们认为，这种分类法还不能反映化学前沿的全貌，也不能充分反映交叉综合发展的趋势。科学的分类应该全面体现事物及其发展的各种本质特征。把化学前沿分成基础化学的前沿领域和应用化学的前沿领域，既有利于认识它们之间的区别，又有利于认识它们之间的联系。这两部分应该是化学前沿最基本的内容。但从化学前沿发展的共性和综合趋势看，

也是反映化学前沿本质属性的两个重要方面，所以，讨论化学前沿的一般特征和规律性，探讨它的综合发展趋势也是不可缺少的。根据上述理由，本书把现代化学前沿分成四类，即化学前沿的概观，基础化学的前沿，应用化学的前沿和化学前沿发展的综合趋势。下面就按照这四类分成四编，通过讨论分类的内容，简介各个章节。

一、第一编《化学前沿概观》

这一编主要讨论了三个问题：一是化学前沿的分类；二是化学前沿的一般特征；三是化学前沿的形成和发展。

在分类2章中，只简述了本书的分类依据和内容，并未展开讨论其它分类的形式及可能性。因为科学的分类有助于系统地把握化学前沿的整体和全局，并能展示化学前沿的发展趋势，希望读者提出更好的分类方案。

对于化学前沿的一般特征及其形成和发展规律，只做了很初步的探讨，还有待于今后继续研究和深化。

二、第二编《基础化学的前沿和问题》

这一编是按照传统的四大学科以物理化学、无机化学、有机化学和分析化学的次序排列章节的。这些传统学科，自进入二十世纪以来，尤其下半个世纪以来，都出现了欣欣向荣的发展局面。过去那种认为基础化学的发展已臻完善或已发展得差不多而无所作为的思想是违背事实的，也是有害的。无机化学在上半叶之所以不景气，其中就有这方面的原因。目前的盛况说明，坚持和加强基础化学研究，乃是开辟新的化学前沿领域的重要基础和前提。

当前，也不能认为有人把化学运动统一归为物理运动，化学就无所事事了。把化学运动归入物理运动而成为物理运动的一种特殊形式，是从理论统一上说的，这种观点并不否定化学运动存

在的客观事实。正因为化学与物理学有这样的密切关系，才使物理化学具有强大的生命力，并在化学科学中占有极重要的地位，具有在理论上综合统一其它化学学科的功能和作用。这也是我们在本编把物理化学摆在前面的主要原因。

从化学四大基础学科的近期发展看，只要善于吸取其它学科（包括非化学的学科）的成就和新的思想、方法，加深认识化学运动的本质及其与其它运动形式的本质联系，都有可能开拓出新领域。

本编共收入了11篇文章，其中物理化学方面的7篇，无机化学方面的1篇，有机化学方面的2篇，分析化学方面的1篇。

量子化学是现代物理化学的一个重要领域，也是现代化学科学的理论基础。近几十年来，随着现代物理学理论和方法的广泛采用，各种计算方法的不断完善以及电子计算机的发展和使用，量子化学也获得了蓬勃的发展，成为研究分子结构和反应性能的现代手段，并获得了广泛的应用，促进了各化学学科的发展。从量子化学的研究现状及发展趋势看，可把它的研究领域概括成三个方面：一是量子化学的基础理论研究。量子化学尽管取得了很大的成就，但仍不完善，面临着许多急需解决而又难以解决的问题，旧的理论需要完善和统一，新的理论也需要开拓。如VB理论、MO理论、分子轨道对称守恒原理、前线轨道理论、能级相关理论、过渡态理论以及振动光谱理论、振动—旋转相互作用的理论、振动谱的多声子模型理论、光的共振与非共振复合散射的统一量子理论、给予体—接受体集体相互作用的量子力学理论等，都需要继续发展和完善。为此，目前主要集中在研究密度矩阵理论、多级微扰理论、群论、场论以及图论等在化学中的应用。二是量子计算化学研究。从头计算法已受到普遍重视，目前主要是结合计算机的运用和改进，发展适用于解决多体问题的计算方法。三是应用量子化学研究。量子化学的应用，既促进了自身的发展，又加速了新学科的形成，如量子无机化学、量子固体化学、量子有机

化学、量子生物化学、量子药物化学等。目前应用量子化学解决结构化学、微观反应动力学、计算化学、合成化学、催化化学以及生物化学等方面的问题，已展示出美好的前景。

华东师范大学周伟良（量子化学工作者）和盛根玉（自然辩证法工作者）合作撰写了《量子化学的发展及趋势》一章，他们首先分析了 VB 和 MO 理论交错发展的历史及其启示；进而讨论了量子化学的进展和完善，着重阐述了轨道对称、前线轨道、等瓣类似等新概念作为量子化学进展的重要标志；最后从应用量子化学的角度探讨了尚待解决的四个问题，如分子及新材料性能的预测；精测实验结果及各种谱图的解析；化学反应量子理论的研究；量子生物、量子药物、量子固体等化学边缘性学科的发展等。

晶体化学是物理化学的一个重要分支领域，它是利用现代物理测试手段，在原子—分子水平上研究化学物质的微观结构及其与物理化学性质之间的关系。晶体结构测定是这个学科中的主要内容之一，也是该学科得以不断发展的基础，它的许多研究课题及成就处在化学前沿的地位。北京大学化学系周公度撰写了《晶体结构测定的成就和问题》一章，作者首先以晶体结构测定及其数据所具有的多种功能，充分地说明了晶体结构测定的作用和意义，接着又以简短的历史回顾，阐述了晶体结构测定方法的发展过程，不仅揭示了已有方法的功能，而且也指明了存在的困难（如测定速度慢），进而简要地探讨了一系列难题，如测定方法中相角的正确确立，微晶粒、不稳定晶体和过渡态晶体的结构测定，晶体数据库的开发利用以及晶体缺陷结构、表面结构、非晶态结构、准晶态结构及其与性能的关系等等。

化学动力学是物理化学的重要分支。微观反应动力学的出现和发展，加速了量子化学向描述微观动态过程的开拓，进而又促进了催化反应动力学的研究。研究催化作用已成为现代化学动力学的主要方向之一。华东师范大学化学系朱传征撰写了《化学动

力学和催化》一章,作者先讨论了化学反应速度理论的近期发展,重点阐述了活化体(过渡态)理论和态-态反应动力学理论的发展。然后,作者在《催化反应动力学》一节中根据一个动力学方程往往可用数种机理进行解释而引起不同争论的事实,认为要完全揭示催化反应过程的机理,最重要的是加强基础研究,真实地考察催化过程的动态结构。

在《催化学科的发展》一节中,作者展开讨论了光解制氢、化学模拟生物固氮等新的催化体系的开拓;催化动力学通过激光、等离子体等新的测试手段的发展,为基础理论研究从表观向分子水平、从稳态向过渡态不断深入提供了可能,并有可能开辟激发态分子催化的新领域;量子化学理论在探讨催化作用方面的应用,使催化反应机理获得了科学的理论解释;催化剂的分子设计已成为催化物理化学发展的目标之一,通过分子设计,可综合各方面的研究成果开发出更有效的催化剂和催化体系。为此,重视计算机的应用,有利于开发利用催化剂数据库,科学地预测新催化剂的催化活性。

鉴于分子束和激光等现代测试技术对微观化学反应动力学研究的重要作用,同济大学邱元武撰写了《用分子束和激光技术研究化学反应动力学》一章,从研究方法的技术和理论两个方面讨论了七个问题。作者在《多光子电离》一节中,把激光多光子电离技术同激光诱导荧光技术和电子碰撞电离技术作了对比分析,认为采用电子计算机控制的激光电离飞行时间质谱计系统,具有多方面的功能;在《微分截面和速度分布》一节中,介绍了用交叉分子束进行化学反应散射实验所取得的进展和成果,交叉分子束实验技术的发展和分辨率的提高,给出了有关势能面的详细信息,推动了动力学理论的发展;《态-态反应速率和截面》一节指出,发挥交叉分子束的单次碰撞和激光的选择激发的特有功能,为研究反应物的振动和转动对反应的影响,确立态-态反应速率和截面提供了可能;《取向相倚和位因子》一节强调指出,化学反应的

分子取向是个难于控制的参量，亦是个影响分子碰撞过程的重要参量，分子束和激光技术的发展为研究化学反应的取向相倚和直接测出表达取向平均反应几率的位因子提供了可能；《束-表面相互作用》一节介绍了复相催化模型的研究，指出超高真空技术和表面探测技术为开展这方面的研究提供了有效手段，这对阐述气体分子与固体表面相互作用的机制，不断开拓束-表面相互作用的研究领域，都具有重要意义；《分子的选择离解》一节较详细地分析讨论了剪裁分子和定向合成分子的可能性和途径，作者认为非统计激光化学有可能解决这个问题，因为激光能有选择性地加速化学反应，使分子很快就能找到反应通道；作者在最后一节《激光诱导化学反应》中，认为激光诱导化学反应的发现具有重大意义，因为激光作用于过渡态的现象，既可作为研究寿命为亚微微秒量级的过渡态结构的探针，又可用作影响基元化学反应历程的手段。

电化学尽管电化学属于历史悠久的物理化学学科，而且近二十年来国内外不论在基础理论研究方面，还是在应用研究方面，均获得了较大的发展，但取得显赫成就的工作却不多。随着研究工作的深入，目前面临着许多难题，如果有所突破，会为现代科学技术增加新的起色。华南师范大学化学系江琳才撰写了《电化学中的疑难问题》一章。作者在对电化学的研究对象做了概括和分类之后，在《离子学科中的疑难》一节中，以表征溶液中离子行为的物理量难于直接测定而只能限于进行模型研究为出发点，讨论了在多级水化层中离子水化数的测定问题，在阴阳离子形影不离的溶液中单种离子的水化热等热力学函数的测定以及单个离子的活度系数的测定问题；作者在《电极学科里的难题》一节中，讨论了电化学中最有吸引力的部分——电极学所存在的一系列问题，如几种“双电层结构模型”的真实性问题，对单电极电位的测定和四种不同的理解问题，电荷在电极和溶液界面传递机制和隧道效应的本质问题，在电解工业中如何认识电催化的本质以

及改进电极材料节省电能的问题;最后在《电 化学新领域在攻破疑难中开拓》一节中,就电 化学的一些新领域——生物电 化学、量子电 化学、半导体电 化学、光电 化学中现行的一些观点和理论质疑问难,如生物电现象是怎样产生的?细胞微小电池是如何组合的?细胞内的化学反应是一般化学反应机理还是电 化学机理?等等进行了讨论。作者认为,有迹象显示,光合作用的机制也许就是一种光电 化学电池,从而有可能为模拟光合作用明确方向。

激光化学是在光物理学、量子电子学和化学动力学的交叉处开拓出来的一个崭新的物理化学学科,它已成为全世界化学家及其他有关的科学家争先恐后占领并给予精心灌注的研究领域。上海激光技术研究所邱明新撰写了《激光化学研究中的若干难题》一章,他首先预示了激光化学在其应用领域有可能出现突破的五个方面,为了适应和促进这些发展趋势,进而从理论上较深入地探讨和阐述了七个方面的问题。作者在第一节中,着重介绍了红外多光子电离理论的产生、发展和完善过程以及在铀同位素分离中的应用;第二节讨论了最关键的多步光电离分离同位素的方案,主要对黎德堡态和自电离态两种束缚态进行了比较分析。第三节指出,双激光束是研究分子光分解过程的最佳手段,第一束用于分子的激发,第二束用于探测分子激发态的转移、光分解的中间产物和最终产物以及碎片的功能、内能分布、激发态等等;第四节说明了激光光谱学的发展为研究化学动力学过程提供了有效的方法,着重讨论了激光荧光光谱学法和激光分子束光谱学法;第五节分析了激光加速化学反应速率的催化过程,作者指出,这种过程,除了激光作用外,还有表面光催化和体积光催化的作用;第六节着重讨论了链式激光化学反应的机理和实现这种反应的条件;第七节介绍了激光化学气相沉积成膜的过程机理,激光化学诱导光刻的类型和过程机理以及激光化学诱导渗杂的过程机理等微区光化学领域,并强调指出,这些过程和技术方法将会大大促进集成电路和电子学技术的发展。

化学振荡与化学波是西北大学物理系张纪岳撰写的一章，作者阐述了具有周期性变化的化学反应现象，并以这类事实为基础讨论了化学振荡问题以及化学振荡由于扩散作用而发生耦合效应所致的化学波问题。作者在《化学振荡》一节中指出，化学振荡是指化学反应过程中某种化学成分的浓度随时间做周期性变化的现象。这是一个只有近30年历史的新研究领域，但目前已能从化学振荡现象的本质和共性出发，抓住主要特征建立数学模型，进行定量研究，证实了化学振荡现象的存在；在《化学波》一节中，作者就化学波的一种主要形式——行波，运用数学模型对其特点和存在条件进行了定量地求解和阐述。此外，还涉及到了化学波的其他形式，如浓度波、张落波、脉冲波、螺旋波等等；作者在最后一节《化学波与生命运动》中，强调了化学波与生命现象的联系，生命体中存在着形成化学波的条件，通过研究化学反应扩散系统中化学波产生的原因、机制及其功能，可达到深入认识生命现象的目的。作者认为，化学波很有可能是生命体中传递信息的重要方式。化学振荡和化学波是一般化学工作者不太熟悉的事物，这一章不仅能帮助读者了解这方面的最新进展情况，而且会引起深入探索这个领域的兴趣。

原子价化学界对它的定义进行了长期地、反复地研讨和琢磨，已有一百多年的发展历程，但是，至今仍难以确定它的严格定义。由于原子价概念不独属于无机化学的范畴，也属于有机化学、物理化学等化学学科，所以，它是化学中最基本最重要的概念之一。北京师范大学张嘉同就这个难题撰写了《原子价概念的发展及问题》一章。作者在《原子价是元素的什么性质》一节中，介绍了两种截然不同的观点，一指原子在分子中所处状态的性质，即结合原子的性质；二指原子没有结合为一定分子的性质，即自由原子的性质。并进而分析了这两种立论的根据和共性；在《原子价和化学键的关系》一节中，作者认为原子价和化学键既相联系又相区别，并从这个基本观点出发，先讨论了自由原子性质