

中国科普原创经典

走近化学 | ZOUJIN HUAXUE |

化学是这样的一门科学：茫茫宇宙中浩瀚的物质世界，在化学家看来，不过是千百万种化合物的存在与组合，而且是由为数不多的几十种常见元素所组成的。

化学是这样的一门科学：它为其他学科和新技术的发展提供了必要的物质条件，但在社会对新技术成就的一片赞扬声中，它却甘于默默无闻。

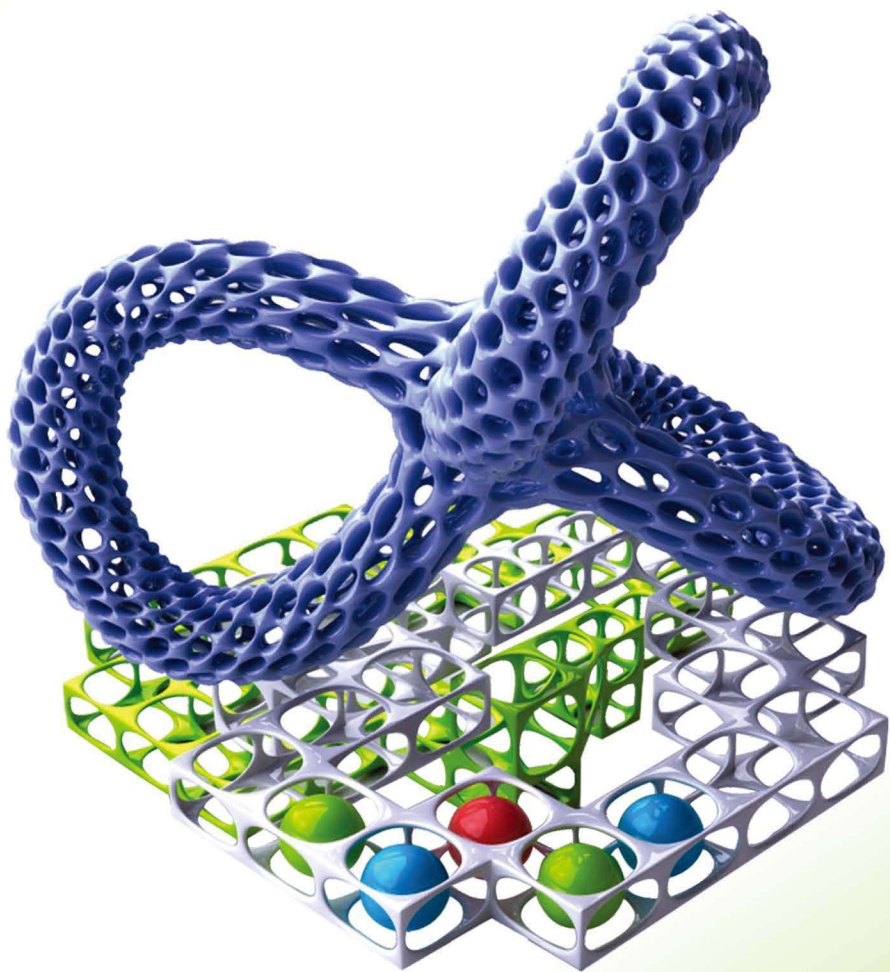
神奇的预测

SHENQI DE YUCE

QUTAN LIANGZI HUAXUE

王德民 叶学其○著

——趣谈量子化学



CTP 湖南教育出版社

中国科普原创经典

走近化学 | ZOUJIN HUAXUE |

化学是这样的一门科学：茫茫宇宙中浩瀚的物质世界，在化学家看来，不过是千百万种化合物的存在与组合，而且是由为数不多的几十种常见元素所组成的。

化学是这样的一门科学：它与其他学科和新技术的发展提供了必要的物质条件，但在社会对新技术成就的一片赞扬声中，它却甘于默默无闻。

王德民 叶学其○著

神奇的预测

SHENQI DE YUCE

QUTAN LIANGZI HUAXUE

——趣谈量子化学

图书在版编目 (CIP) 数据

神奇的预测: 趣谈量子化学/王德民, 叶学其著, —2 版.

—长沙: 湖南教育出版社, 2012. 4

(走近化学/宋心琦主编)

ISBN 978 - 7 - 5355 - 3495 - 8

I. ①神… II. ①王… ②叶… III. ①量子化学

—普及读物 IV. ①O641. 12 - 49

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2012) 第 066635 号

丛 书 名 走近化学

书 名 神奇的预测——趣谈量子化学

作 者 王德民 叶学其 著

责任编辑 阮 林 李小娜

责任校对 殷静宇

出版发行 湖南教育出版社出版发行 (长沙市韶山北路 443 号)

网 址 <http://www.hneph.com> <http://www.shoulai.cn>

电子邮箱 228411705@qq.com

客 服 电话 0731 - 85486742 QQ228411705

经 销 湖南省新华书店

印 刷 湖南天闻新华印务邵阳有限公司

开 本 710 × 1000 16 开

印 张 11.5

字 数 111 000

版 次 2012 年 1 月第 2 版第 1 次印刷

书 号 ISBN 978 - 7 - 5355 - 3495 - 8

定 价 23.00 元

20 世纪 90 年代，在新的全球性科学技术发展高潮和随之而来的激烈竞争初现端倪之时，湖南教育出版社的《科学家谈物理》、《科学家谈生物》、《走近化学》、《化学·社会·生活》等丛书陆续出版，在当时为数不多的原创学科科普中，其内容的新颖、作者阵容的强大、语言文字的生动堪称首屈一指。这套学科科普凝聚了当时物理学、生物学、化学领域的大家们的远见卓识和汗水心血。以“大科学家写科普”的严肃认真的态度和细腻别致的情怀，为当时的青少年——21 世纪的主人们在接受基础教育的同时，扩展科技视野，了解学科现状和发展趋势提供了一条最权威、最前沿、最贴近的通道。大家们字里行间所流露出来的对科学世界的向往与痴迷、对科学事业的热爱和虔诚，也深深地感动和影响了一代青少年。

二十余年之后，我们选择以“中国原创科普经典”的名义再次整理出版这套科普则有着非凡的意义。其一是原创的弥足珍贵。这么多大科学家的学识、思想、精神汇聚于此实属不易。时至今日，这其中的许多人已经离开我们，但他们的所著所言却是具有恒久长远的生命力的。这些原创于今时今日的我们，其珍贵是不言而喻的。其二是经典的不可复制。科学技术的发展日新月异，这套科普所展现的有些内容也许不是如今最前沿的知识，但它所记录的是这个发展过程中不可或缺的一步或几步，它已经成为经典。因此除了将某些符号和计量单位与现在的规定接轨外，我们没有做大的改动，选择尽量保留它的原貌。其三是精神的代代传承。这些著名的科学家不仅深入浅出地讲解了科普知识，更自然由衷地表达着对科学的热爱与敬畏，这些精神的甘露润物细无声。我们真心期待21世纪的青少年朋友们也能悉心来感受和传承，向伟大的科学和伟大的科学家们致敬！

需要说明的是，时隔多年，有些作者如今已经离世，有些作者现在已经联系不上，但我们一直在努力寻找中。如果有作者或作者的家人、朋友获悉我们再版这套书的情况，请跟我们联系，我们一并付酬致谢。

—

20 世纪即将过去，日益临近的 21 世纪的脚步声已经清晰可辨。世界各国为迎接新世纪而制定的种种规划即将逐一付诸实施，新的全球性科学技术发展高潮和随之而来的激烈竞争已初见端倪，“山雨欲来风满楼”是世纪之交的科技发展与竞争态势的最佳写照。为了帮助青少年朋友在未来的竞争中迎接挑战，把握机会，继《科学家谈物理》、《科学家谈生物》等丛书之后，湖南教育出版社又推出了一套《走近化学》丛书。这套丛书，对于帮助今天的青少年——21 世纪的主人们在接受基础教育的同时，扩展科技视野，了解化学的现状和发展趋势，明确化学家的任务和责任，是大有裨益的。因此，湖南教育出版社的这一远见卓识，理所当然地得到中国化学界的广泛响应和支

持。中国化学会的积极参与和丛书编委会的组成，则保证了这套科普读物出版计划的顺利实施。

化学是这样的一门科学：茫茫宇宙中浩瀚的物质世界，在化学家看来，不过是千百万种化合物的存在与组合，而且是由为数不多的几十种常见元素所组成的。它们之间的差别，仅在于元素的种类、原子的数目和原子构建成分子（或构建成晶体等）时方式的不同而已。

化学是这样的一门科学：化学反应，其机理几乎是各有千秋，而且对反应条件又极其敏感，以致对于一些化学现象，人们有时不免众说纷纭，莫衷一是。但是化学反应所遵循的最基本的物理定律，却屈指可数，简单明了。

化学是这样的一门科学：它为其他学科和新技术的发展提供了必要的物质条件，但在社会对新技术成就的一片赞扬声中，它却甘于默默无闻。

化学是这样的一门科学：它和其他学科的相互交叉与渗透日益深化，新的化学分支学科层出不穷，但是化学的理论基础却离不开化学元素论、元素周期律、化学键理论和物质结构理论。

化学是这样的一门科学：除非你已经学会透过宏观现象辨析原子、分子行为的思维方法，并熟悉化学所用的语言和语法规则，否则尽管在实际生活中化学和人的关系是

如此的密不可分，可是在很多人的心目中，化学却显得那么的陌生和遥远，以致有些人在充分享受化学对现代物质文明所作的种种贡献的同时，会不公平地把现代文明社会中的失衡与灾难的责任，归之于化学！

统计资料表明，世界专利发明中有 20% 与化学有关；发达国家从事研究与开发的科技人员中，化学与化工专家占一半左右；化工企业产品的更新换代依靠化学的进步，而化工产品的产值和出口比例在国民经济中一直保持着领先的地位。这些数据足以证明，化学在社会发展和提高人民生活质量方面具有重要作用。

因此，这套《走近化学》丛书的任务是，通过向广大青少年读者介绍生动有趣的化学现象、引人入胜的化学成就和辽阔无垠的化学前景，消除广大读者对化学的陌生感和因此产生的畏惧心理。作者们在字里行间有意或无意流露出来的对科学世界的痴迷和对科学事业的虔诚，都会引起读者的共鸣。你会和作者一样，产生出一种在知识海洋中遨游时清风拂面、心旷神怡、与大自然融为一体的快感，使自己的聪明才智得到进一步的培育，使自己的志趣得到进一步的提炼和升华。这套丛书取名为“走近化学”，正是呼唤我们向化学走近！

编委会衷心感谢中科院院士、原中国科学院院长、著

名化学家卢嘉锡教授及中科院院士、著名化学家张青莲教授慨允为丛书题词。衷心感谢中科院院士、原中国科学院副院长、著名材料科学家严东生教授代表中国化学会为丛书作序。对湖南教育出版社的领导及担任责任编辑和编委的李小娜、阮林，以及中国化学会的领导及办公室工作人员为丛书所作的指导和支持，在此一并表示谢忱。

亲爱的青少年朋友们，如果这套丛书能够有助于你摆脱常年在题海和应试的桎梏下产生的几丝无奈，为迎接明天而主动地学习，从而使你的生活和学习走向一片更加灿烂与广袤的天地，我们将会感到无比的欣慰。我们坚信，科学可以使人变得更加聪明而坚强，“欲与天公试比高”将是 21 世纪中华青少年的风采！

《走近化学》编委会

(宋心琦执笔)

1999 年 8 月

二

20 世纪已经随着寒冬过去, 21 世纪和明媚的春天一起悄然地来到了人间。温暖的春风, 不仅吹绿了沉睡的大地和柳树的枝头, 也捧出了《走近化学》丛书的第三辑。它将成为湖南教育出版社和《走近化学》丛书编委会以及第三辑的作者, 在新世纪之初的第一个春天奉献给青少年朋友们的礼物。

《走近化学》丛书 1995 年开始编写和出版, 到 2001 年完成第三辑, 前后经历了 6 个年头, 但是却跨越了两个世纪, 而且是人类有史以来最重要的两个世纪。这也许有时间上的巧合, 但它从一个侧面反映了时代的步伐是如此的匆匆。科学技术和社会发展的脚步正在飞快地前进, 丛书出版之初大多数科学家仍然感到陌生的一些领域, 已经成为 21 世纪科学技术发展的先锋。人们日常词汇中新近增加的和媒体上出现频率急剧增长的一些名词概念, 诸如纳米技术、DNA 测序、克隆等等, 四五年前还只为部分科学家所专有, 如今已经通过各种媒体的传播进入了平常百姓家, 人们对科学技术的关注和热情达到了前所未有的高度。在这种形势下, 《走近化学》丛书编委会的专家教授们都有一种欲罢不能的感觉。但是我们想到, 科学技术是一项永远伴随着人类的发展而发展的事业, 与之相关的科

学普及工作也将是一项永恒的工作。我们热切地希望有更多的出版社能够和湖南教育出版社联手，把为青少年朋友们出一些质量更高、内容更加符合读者需要的科普精品，及时地反映科学技术发展的新成就和新动向，当做新世纪赋予的时代的责任。希望通过我们的科普工作，我国有更多的青少年能够更早地立志并真正成为现代科学技术的主人。

《走近化学》丛书在编写和出版的几年里，一直得到化学界很多专家学者与朋友们的帮助，他们提出了许多宝贵的批评和意见，也得到了广大青少年读者的热情支持和鼓励。湖南教育出版社的李小娜和阮林两位编辑，为丛书的出版做了许多工作，她们不仅为丛书的选题殚精竭虑地提出过许多重要的建议，而且所做的默默无闻的编辑工作对于丛书的质量起到了关键的作用。所有关心过丛书和为丛书的顺利出版做过努力的朋友们，请接受丛书编委会和我个人由衷的谢意和新世纪的敬礼。

宋心琦于清华园

2001年3月1日

长期以来，化学被认为是一门经验的学科，通过实验能“知其然”，但是“不知其所以然”。19 世纪末发现电子后，化学键的电子理论为近代化学奠定了理论基础，特别是 20 世纪 20 年代创立的量子力学，使得对分子的性质作出非经验解释成为可能，从而形成了一门新的学科——量子化学。

本书力求用浅显的文字和图像来描述量子力学的最基本的概念及其在化学中的应用。它生动地讲述了牛顿的经典物理如何从实验和理论上一步步过渡到量子力学，量子力学用于解释众多的“不知其所以然”的化学现象，从而大大地推动了化学科学的发展。

读者可以从中获得富有科学魅力的量子化学的基本概念，走近现代化学的前沿。

序 言



严东生

由中国化学会和湖南教育出版社共同组织、约请著名化学家撰写的《走近化学》丛书，是我国近年来为满足青少年读者了解化学和学习化学的需要而出版的一套科普丛书。其内容覆盖面之广，作者阵容之强，是多年来罕见的。丛书的选题不仅紧密结合科学技术发展的实际，更着重于作者与读者之间思想和体会的交流。加以文字流畅，内容新颖并富有趣味，我相信它必将成为广大青少年的良师益友。对于有志于从事科学技术工作的青少年，则更有启迪和激励的作用。

21 世纪即将来临，目前尚处于发展中国家之列的中国，在未来几十年里世界高新科技的发展与竞争中，将面临极其严峻的挑战。化学不仅会和其他学科一样，保持着自 20 世纪 50 年代以来的迅猛发展势头，而且和生命、信息、材料与环境等科技领域的相互渗透也会日益

深入。了解化学和应用化学的水平将对社会生产力的发展和人民生活质量的提高起着关键的作用，化学基础知识也将成为充实新世纪公民基本素质的重要内容之一。因此，《走近化学》丛书的问世所起到的积极作用，一定会得到社会各界的支持和肯定，也一定会受到广大青少年读者的欢迎。

《走近化学》丛书涉及现代化学的多个侧面，介绍了人们在这些领域内的最新成就，反映了作者对该领域未来发展的精辟见解。它有利于广大青少年读者开阔视野，激起他们对科学技术的兴趣，提高他们对科学技术推动社会发展的重要作用的認識。对于有志于从事科学技术工作的青少年读者则更能起到启蒙的作用。当然，科学技术事业的发展，要依靠千百万科学技术人员的辛勤劳动与杰出科学家的殚精竭虑和艰苦实践，不可能一蹴而就。我们应当由丛书中所展示的前辈科学家所经历过的失败与成功的史实中吸取经验，以增强我们积极参与国际科学技术领域竞争的信心和力量。

光阴荏苒，岁月蹉跎，在新的世纪里，振兴中华、造福人类的历史责任已无可推卸地落在今天青少年一代的肩上。年轻的朋友们，先进的科学技术像明日的朝阳一样，将由你们用双手高高托起！

1997年9月

前言



19 世纪末，经典的牛顿力学和电磁学在宏观物质领域可以说已取得完全、彻底的成功。以至于许多一流物理学家都认为今后的物理学只是应用，不再有奥妙之处。现在看来，这显然是一种停滞不前、故步自封的思想，把物质世界看得太简单了！

20 世纪来临的前夕，J. J. 汤姆生发现了电子，这是人类从宏观世界闯入微观世界的开端。从此，一大批杰出科学家进入了完全未知的微观物质的新领域，探索其新的奥秘。这里，对青少年要特别强调的是：在新领域、新现象面前，谁能提供新概念就是胜利者。然而，要提出新概念，必须要有摆脱旧概念、旧思想和挑战权威的勇气。19 世纪虽然没有中世纪宗教焚烧科学家的野蛮行径，但旧传统、旧习惯和大权威的无形观念上的束缚也是很厉害的，更可怕的是这种束缚是来自自觉的迷信，从而是不被反抗的。

牛顿力学的两大特点是物质的粒子性（集中性）和物理量的连续性。这两性在微观世界中必须被物质的波动性（弥散性）和物理量的

量子性所替代；牛顿方程被薛定谔方程所替代。这两种理论是如此的不同，表面上截然对立，实际上则是统一的。

20 世纪 20 年代，一批科学家冲破旧传统的思想牢笼，对一系列新的科学实验现象进行深入分析，从而迅速发展形成一门新型力学——量子力学。人们至今还未发现它有原则性错误的事例。

量子力学一出现，科学家马上敏感地察觉到它应该能用于长期以来属于经验性的化学。海特勒和伦敦两人，首先用量子力学计算最简单的分子——氢分子，获得成功，开辟了量子化学这块化学新天地。从此，人们可以用量子力学这个微观世界的新理论去探索分子及其反应的本质和规律，在经验性的化学中注入理性的认识。

科学的发展并不是一帆风顺的，量子化学也是如此。虽然量子力学对分子问题的应用原理上是成功的，但不等于许多具体问题的解决。在计算多原子分子时，由于求解薛定谔方程遇到数学上和计算上的困难，很难得到对化学有意义的结论，所以那时大多数化学家对这类计算并不重视。

在此后的几十年中，由于计算机的飞速发展，量子化学在理论上和方法上不断完善，大大提高了量子化学的计算能力和可信程度。目前已能相当可靠地对化学实验结果作出非经验性的解释和预测，但仍然不能认为对化学本质的理解已到了完美尽头，还有更深层的未知领域期待青少年们去挖掘。

20 世纪 70 年代后，量子化学计算重新得到化学界的重视，以致在

我国大学化学专业普遍地开设了量子化学课程。

学习量子化学，由于需要较多较深的数学、物理学知识，所以比较困难。本书作者力求不用数学演绎，将量子化学中的基本概念定性地介绍给青少年朋友们，希望能激发读者的热情，使他们将来能更加深入化学的理性领域，更好地驾驭化学规律。作者感到，对科学的理性认识，即使是最浅易的读物，也需要耐心和思考才能领会其科学思想、科学概念和科学结论。

科学面前，人人平等，作者深深感谢任何对本书的指正意见。

在写作过程中，作者得到宋心琦教授富有启发性的指教，与唐任寰教授进行了有益的讨论，颜达予教授提出了宝贵的意见，在此一并表示衷心感谢！