

追求“第一原理”—— 从理论化学到分子设计

陈敏伯 著



湖南教育出版社

图书在版编目 (CIP) 数据

追求“第一原理”:从理论化学到分子设计/陈敏伯著.

—2版.—长沙:湖南教育出版社,2012.4

(走近化学/宋心琦主编)

ISBN 978-7-5355-3492-7

I. ①追… II. ①陈… III. ①物理化学-普及读物 ②分子-设计-普及读物 IV. ①064-49 ②0561-49

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2012) 第 072926 号

丛 书 名	走近化学
书 名	追求“第一原理”——从理论化学到分子设计
作 者	陈敏伯 著
责任编辑	李小娜 阮 林
责任校对	刘 源
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.hnepb.com http://www.shoulai.cn
电子邮箱	228411705@qq.com
客 服	电话 0731-85486742 QQ 228411705
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	9.25 插:4 页
字 数	100 000
版 次	2000 年 8 月第 1 版 2012 年 7 月第 2 版第 1 次印刷
书 号	ISBN 978-7-5355-3492-7
定 价	20.00 元

本书回顾了人类对于周围物质世界认识的历史和化学领域“第一原理”——量子力学和统计力学建立的依据和过程。

本书还告知读者，20 世纪 80 年代后期以来，理论化学与突飞猛进的计算机技术相结合，导致了“分子设计”这门新的交叉学科的形成。人们通过计算和模拟，预计未知化学物质的性质，发现新的客观规律，更加理性地、主动地寻找和预见新材料、新药物、新的特种功能物质。分子设计提供了人们探索自然的重要工具。

本书旨在给读者介绍一个有着崭新面貌的、“严密科学”意义上的化学学科。

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。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，其机制几乎是各有千秋，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做的种种贡献的同时，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中具有重要作用。

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，从而使你的生活与学习走向一片

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》丛书从 1995 年开始编写的出版, 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。科学技术和社会进展的脚步正在飞快地前进, 在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 and 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，当新世纪赋予的时代的责任。希望通过我们的科普工作，使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二位编辑，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

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，更着重于作者和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。它将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认知。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



在进入 21 世纪的时候，青年人怎样选择自己的人生道路呢？据报载，这几年的高考，报考数学、物理、化学专业的人数连年下降，报考计算机、电信、工商管理、金融管理专业的人数连年上升。“学好数、理、化，走遍天下都不怕”的说法似乎过时了。可是，“科教兴国”，不学数理化怎么行呢？

一些人在选择专业时偏重考虑职业待遇。前几年会计等专业也曾经火爆一时，可是，现在会计人才开始过剩。因此，在选择专业时，青年人要全面地考虑问题。那么，到底考大学选择什么专业好呢？

在成熟的市场经济国度里，社会的各行各业组成了一个有机整体，处于互相平衡之中。但是社会在发展，新的产业不断涌现，平衡经常被打破。市场经济制度愈成熟，社会的调整机能就愈强，行业之间新的利润平衡就能愈快建立。作为自然科学家，我们无法预言将来什么行业挣钱容易。连经济学家也声称，他们研究的是让整个社会如何繁荣，而不是教个人如何挣钱。还有人说：如果炒股专家真有把握发财，他怎么有空来写书、上电视台教你炒股呢？

改革开放的历史经验告诉我们，社会职业重组过程的加快，恰恰体现了社会的进步和发展。几十年前，人们学什么专业，然后一

辈子干什么职业。老当一个尺寸的“螺丝钉”，很难谈得上什么“知识更新”。从社会发展的角度看，当然经济就停滞不前。现在谁还留恋那个年月呢？所以，人们应当欢迎知识经济新时代的到来。有得有失，社会发展也要求每个人改变生活方式。还想当知识懒汉，怎能搭上时代发展的高速列车？所以，与其说考虑报考什么专业能挣钱，还不如认真考虑在大学4年里建成什么样的知识结构，才能够使你在毕业后的30多年的工作中足以受用。

我国物理化学的前辈学者、为祖国核科学事业做出重大贡献的吴征铠院士语重心长地说过：“大学本身就是培养自学能力的。”他又说：“我们常说某人是自学成才，其实哪一个有成就的人不是自学成才的呢？”他强调年轻人学习要少而精，着重培养寻找新知识的能力。

少而精，就是强调着重掌握那些深层次、具有广泛共性的知识。那往往是没有老师指点就很难学到手的，是知识中的精华，也是寻找新知识的起点。正如练举重不能老举轻杠铃，不要让那些在枕头边就能看懂的“某某学”锈蚀你年轻的智慧。在科学日益高度发展的今天，“数、理、化”一定是知识精华的主要部分。不能想像，远离数、理、化的未来“昌明盛世”会是什么样的。

本书介绍的化学的历史和未来，明确地表达出这么一个观点：人们今天之所以能够享受着科学文明带来的一切，是历代众多杰出科学家、工程师长期努力奋斗的结果。如果人们还抱着“干什么学什么”的狭隘、功利认识，机械地理解脑力劳动，不重视足够的知识储备，在科学征途中就不可能做到高屋建瓴、游刃有余，不可能有追求“第一原理”的气魄。科学文明的发展也就不会像今天这样昌明、迅速和富有活力。

科学的发展常常超出我们的理解能力。所以与其说“科学是有用的”，还不如说“科学的价值在于预见”更为准确。

本书用历史事实证明，知识一定要建筑在科学的基础上，而不是思辨的基础上。道尔顿的原子论之所以被称为科学，而在他很久以前古希腊、古埃及和古代中国的哲学家们、炼丹术士们的关于“原子”概念只能被认为处于思辨阶段，那是因为道尔顿抓住了原子的质量。他紧紧抓住物质的原因，定比定律、倍比定律就随之而来，从而打开了化学的大门。悬空的“思辨”就脚踏实地成为了科学。

本书介绍了人类对于客观物质世界认识的规律。化学和物理学都是研究物质世界的科学，它们是紧密联系在一起。由于最简单的化学问题一般都要比最简单的物理问题复杂，所以物理学比化学先发展成为严密科学。但是由于物质世界说到底是统一的，宇宙中总是只有这么多种化学元素存在，物质总是由原子核和电子组成的。因此，关于物质的基础科学——量子力学和统计力学，必然发展成为揭示化学科学奥秘的“第一原理”。

本书介绍了追求化学科学“第一原理”的历史。原本没有功利色彩的理论化学，一旦时机成熟，造就了两件大事。一是它正在改变化学家的观念，很多基本化学概念正在统一化，正在纳入“第一原理”；二是一门旨在更加理性地、主动地设计材料，设计药物，设计一切有用化学品的“分子设计”学科正在快速形成。书中引用的图片，就有利用美国分子模拟公司（MSI 公司）和 Tripos 公司研制的分子设计软件所得到的新成果。

科学发现和发明对现代社会的发展所起的作用越来越大，是科学改变了整个世界。今天，回顾化学对人类进步的“功过”是有益的。50 年前塑料袋还是很稀罕的，现在人们发现自己已经被包围在

高分子材料的海洋中，一刻也离不开高分子制品。棉花的种植面积也因此缩小，工程塑料管代替了部分铁管，钢铁产量不再是惟一重要的经济指标了。1930 年左右，中国人的预期寿命约为 35 岁。现在中国人的预期寿命已经提高了一倍，其中化学药物的普遍应用是最重要的原因。20 世纪 30 年代的磺胺类消炎药消治龙（磺胺噻唑），40 年代末的盘尼西林（青霉素），50 年代的抗痨药物雷米封（异烟肼），都曾经为中国人的健康做出过关键性的贡献。

化学也曾经被错误使用，甚至滥用，造成对环境的严重污染或威胁。有些人因此对化学开始产生不信任感，甚至迁怒于化学。其实，这些存在的问题并不是化学本身的过错，恰恰是人类对化学规律认识不足，低水平地滥用化学的结果。科学也面临同样的误解和滥用。二战后的头几年，人们对科学还抱有充分的信任，但是逐渐地越来越多的批评出现了。原子弹的制造就是一例。其实，人类的最高利益需要靠包括化学在内的科学进步去争取。同时，要在更高的科学层面取得包括经济在内的发展。两者必须也可以做到相互促进、并行不悖。要做到这一点本身还是要靠科学发展，要靠公众对科学的全面认识，重建对于科学的信任。所以，科学家要坚持与公众进行交流和讨论，揭示真理和假象的本质区别，让公众掌握科学。这就是本书的目的。

目 录

走近化学 · 追求“第一原理”

前言

1 一个划时代意义的诺贝尔化学奖 /001

- 1.1 “化学不再是单纯实验科学” /001
- 1.2 科学的价值全在于预见 /004
- 1.3 “第一原理” /017
- 1.4 演绎法和量子力学 /025
- 1.5 12 位有效数字的准确度 /037

2 化学走向严密科学 /041

- 2.1 什么是严密科学 /042
- 2.2 数学、物理方法的引入和物理化学的诞生 /044
- 2.3 “要是喜欢数学，就学化学吧！” /056

3 化学的非经验化 /058

-
- 3.1 原子概念的变迁——从思辨到科学 / 058
 - 3.2 化学键概念的变迁和量子化学的诞生 / 061
 - 3.3 分子的形成和分子轨道 / 065
 - 3.4 氢分子计算揭示了化学键的本质 / 068
 - 3.5 关于“共振论” / 072
 - 3.6 量子化学的悲观年代 / 074
 - 3.7 波普尔实现了分子轨道理论的计算 / 086
 - 3.8 电子密度泛函理论——量子力学的新形式 / 089
 - 3.9 是理论的问题还是实验误差问题 / 090
 - 3.10 化学概念的统一化 / 094

4 虚拟化学世界——分子设计 / 103

- 4.1 虚拟化学世界 / 103
- 4.2 水分子的结构 / 105
- 4.3 分子模拟 / 107
- 4.4 分子设计软件 / 118
- 4.5 化学学科的三大支柱 / 122

结束语 / 125