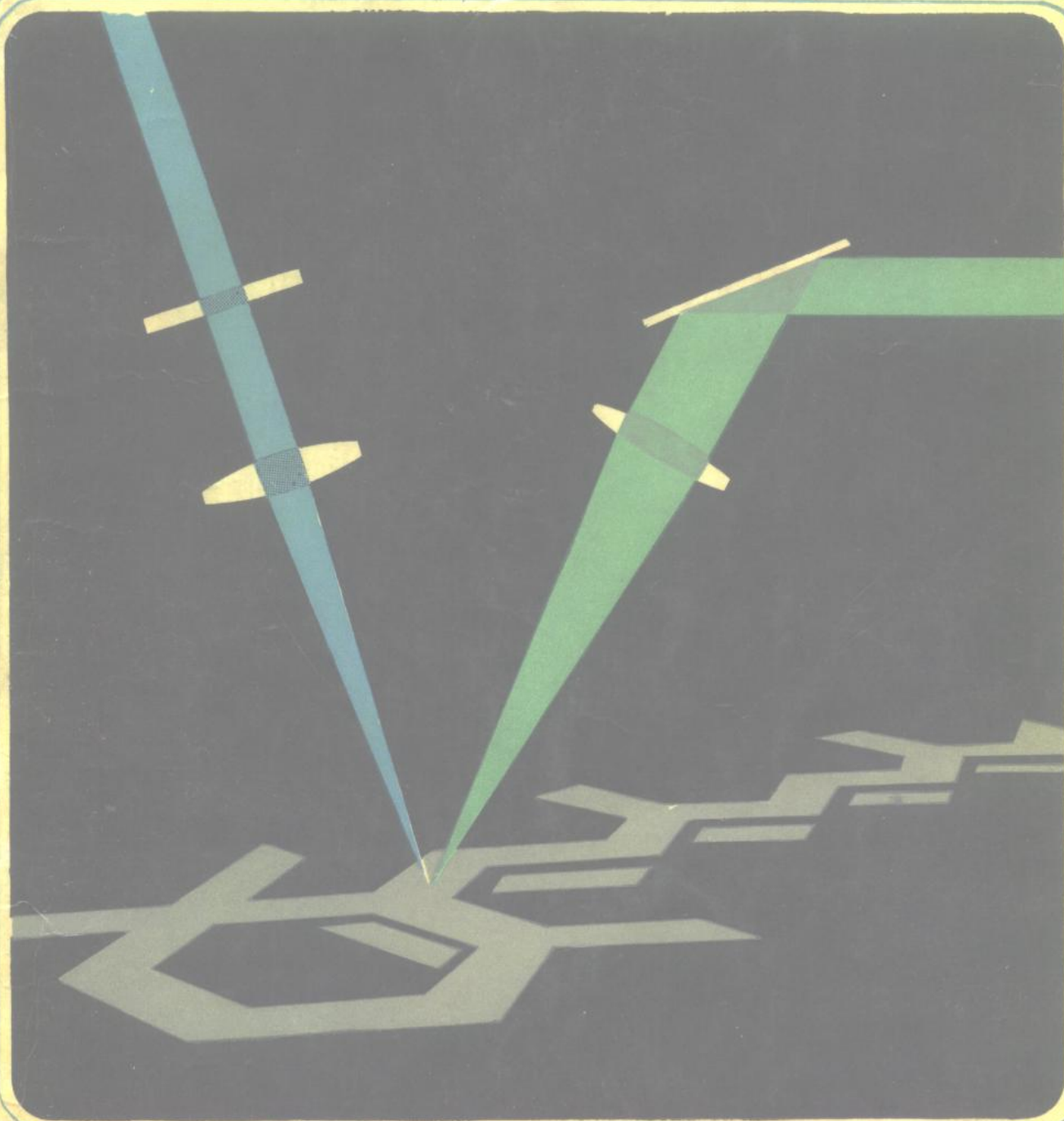


化学中的机会



化学中的机会



化 学 中 的 机 会

美国化学科学机会调查委员会

美国化学科学技术部

美国物理科学、数学和资源委员会

美国全国研究委员会

曹家桢 等译，黄耀曾 等审校

中 国 科 学 院 化 学 部

中 国 化 学 会

中国科学院文献情报中心

一九八六年十月

封面设计 周春民

化 学 中 的 机 会

(1986)

编辑者：胡文彦 刘炳岗

(中国科学院文献情报中心)

出版者：中国化学会

发行者：中国化学会

印刷者：京辉印刷厂

出版日期：一九八六年十月

定价：6.50元

Opportunities in Chemistry
Committee to Survey Opportunities
in the chemical Sciences等著
NATIONAL ACADEMY PRESS
1985.

内 容 提 要

本书以前景规划报告的形式展现了当代社会需要对化学科学的一系列挑战,从而提出当前化学科学发展的优先领域。

全书分七部分。第一、二部分概括了该报告内容及其产生的背景。第三、四、五部分论述化学对社会需要的反映,化学的最新成就和发展方向。第六部分讨论了人才与教育。第七部分指出美国的化学科学如果要在国际上居领先地位所应采取的策略。

本书对研究美国化学科学从而看世界化学科学的发展方向有相当的参考价值。

化学科学机会调查委员会

GEORGE C. PIMENTEL (主席) 加利福尼亚大学 伯克利分校

ALLEN J. BARD 得克萨斯大学 奥斯汀分校

FRED BASOLO 西北大学

JOHN H. BIRELY 洛斯-阿拉莫斯科学实验室

JOHN I. BRAUMAN 斯坦福大学

HARRY G. DRICKAMER 伊利诺斯大学 Urbana分校

HANS-G. ELIAS 道化学公司

MOSTAFA A. EL-SAYED 加利福尼亚大学 洛杉矶分校

DAVID A. EVANS 哈佛大学

JOSEF FRIED 芝加哥大学

GERHART FRIEDLANDER 布鲁克海文国家实验所

HARRY B. GRAY 加利福尼亚理工学院

VLADIMIR HAENSEL 马萨诸塞大学 阿默斯特分校

RALPH F. HIRSCHMANN Merck, Sharp和Dohme研究实验室

ISABELLA L. KARLE 海军研究实验室

WILLIAM A. LESTER, JR 加利福尼亚大学 伯克利分校

RUDOLPH A. MARCUS 加利福尼亚理工学院

FRED W. McLAFFERTY 康乃尔大学

KOJI NAKANISHI 哥伦比亚大学

ALAN SCHRIESHEIM Argonne国家实验室

HOWARD E. SIMMONS, JR 杜邦公司

WILLIAM P. SLICHTER 贝尔实验室

GABOR A. SOMORJAI 加利福尼亚大学 伯克利分校

EARL R. STADTMAN 国家卫生研究院

CHRISTOPHER T. WALSH 麻省理工学院

GEORGE M. WHITESIDES 哈佛大学

WILLIAM SPINDEL (美国全国研究委员会) 化学科技部

ROBERT M. SIMON 化学科技部

PEGGY J. POSEY 化学科技部

ROBERT C. ROONEY 物理学、数学和资源委员会

MARTIN A. PAUL 化学科技部

MARY E. BUNDY 加州大学

JEAN E. YATES 化学科技部

RENEE R. HARRIS 化学科技部

化学科学技术部

ALLEN J. BARD(*CO-Chairman*), The University of Texas at Austin
LEO J. THOMAS, JR. (*Co-Chairman*), Eastman Kodak Company
FRED BASOLO, Northwestern University
STEPHEN J. BENKOVIC, Pennsylvania State University
JOHN H. BIRELY, Los Alamos National Laboratory
KENNETH B. BISCHOFF, University of Delaware
JOHN I. BRAUMAN, Stanford University
EUGENE H. CORDES, Merck Sharp and Dohme Research Laboratories
WILLIAM A. GODDARD III, California Institute of Technology
LOWELL P. HAGER, University of Illinois, Urbana
ARTHUR E. HUMPHREY, Lehigh University
DAVID W. McCALL, AT&T Bell Laboratories
FRED W. McLAFFERTY, Cornell University
LEO A. PAQUETTE, Ohio State University
GEORGE W. PARSHALL, E.I. du Pont de Nemours and Company, Inc.
GEORGE C. PIMENTEL, University of California, Berkeley
DAVID P. SHEETZ, Dow Chemical Co.
THRESSA C. STADTMAN, National Institutes of Health
MONTE C. THRODAHL, St. Louis, Mo.
NICHOLAS J. TURRO, Columbia University
GEORGE M. WHITESIDES, Harvard University

物理学、数学和资源委员会

HERBERT FRIEDMAN(*Chairman*), National Research Council
CLARENCE R. ALLEN, California Institute of Technology
THOMAS D. BARROW, Standard Oil Company, Ohio (retired)
ELKAN R. BLOUT, Harvard Medical School
BERNARD F. BURKE, Massachusetts Institute of Technology
GEORGE F. CARRIER, Harvard University
CHARLES L. DRAKE, Dartmouth College
MILDRED S. DRESSELHAUS, Massachusetts Institute of Technology
JOSEPH L. FISHER, Office of the Governor, Commonwealth of Virginia
JAMES C. FLETCHER, University of Pittsburgh
WILLIAM A. FOWLER, California Institute of Technology
GERHART FRIEDLANDER, Brookhaven National Laboratory

EDWARD D.GOLDBERG,Scripps Institution of Oceanography
MARY L.GOOD,Signal Research Center,Inc.
J.ROSS MacDONALD,University of North Carolina
THOMAS MALONE,Saint Joseph College
CHARLES J.MANKIN,Oklahoma Geological Survey
PERRY L.McCARTY,Stanford University
WILLIAM D.PHILLIPS,Mallinckrodt,Inc.
ROBERT E.SIEVERS,University of Colorado
JOHN D.SPENGLER,Harvard School of Public Health
GEORGE WETHERILL,Carnegie Institution of Washington

RAPHAEL G.KASPER,*Executive Director*
LAWRENCE E.McCRAY,*Associate Executive Director*

审校者

(按姓氏笔划为序)

李海	中国科学院	化学部前副主任
张存浩	中国科学院	化学部学部委员
	中国科学院	大连化学物理研究所所长
唐有祺	中国科学院	化学部学部委员
	中国化学会	第22届执行理事长
	北京大学	化学系教授
徐广智	中国科学院	化学研究所研究员
曹天钦	中国科学院	生物学部学部委员
	中国科学院	生物学部主任
	中国科学院	上海分院院长
	中国科学院	上海生物化学研究所研究员
黄耀曾	中国科学院	化学部学部委员
	中国科学院	化学部副主任
	中国科学院	上海有机化学研究所研究员
薛攀皋	中国科学院	生物学部副主任

译者

(按译文章节次序排列)

唐有祺	中国科学院	化学部学部委员
	中国化学会	第22届执行理事长
	北京大学	化学系教授
曹家桢	中国科学院	化工冶金研究所副研究员
杨岐生	中国科学院	生物物理研究所副研究员
于建康	中国科学院	发育研究所副研究员
陈定茂	中国科学院	环境化学研究所助理研究员
姚绍明	中国科学院	感光化学研究所助理研究员
胡文彦	中国科学院	文献情报中心副研究员
陈本明	中国科学院	化学研究所副研究员

译 序

作为自然科学基本学科之一的化学，主要是研究物质的组成、结构和性质（包括物理性质、生物活性、新技术性能等非化学性质）；研究物质在各种不同聚集态下、在分子与原子水平上的变化和反应规律、结构和各种性质之间的相互关系，以及变化和反应过程中的结构变化、能量关系和对各种性质的影响。化学发展到今天，已经成为人类认识物质自然界、改造物质自然界，并从物质和自然界的相互作用得到自由的一种极为重要的武器。就人类生活而言，农轻重、吃穿用，无不密切地依赖化学；在新的技术革命浪潮中，化学更是引人瞩目的“弄潮儿”。我国正在进行社会主义现代化建设，我们应当对化学科学的发展给予充分重视，对化学科学的研究要认真加强，对化学教育的提高和普及要十分关注。

以美国著名化学家、加州大学Berkeley分校化学系 C. Pimentel 教授为首的“化学科学中的机会调研委员会”联系众多的美国杰出化学家，对美国化学科学现状以及发展前景进行了近三年的调研分析，在1985年出版了以《化学中的机会》（Opportunities in Chemistry）为书名的详细报告，指出了当代化学科学发展的前沿和趋向，提出了为保证这门学科顺利前进的十项重要建议。在细读这份报告后，中国科学院化学部、中国化学会和中国科学院文献情报中心联合组织有关科学家对本书进行了认真的翻译工作。这对于化学这门学科在我国的发展问题和我国化学教育的普及提高，都将起十分有益的借鉴作用。我希望我国化学、化工界的科研工作者、教育工作者以及管理工作都能有机会用心一读，尤其希望在这些方面担负领导工作的同志们能抽暇一阅。

唐嘉锡

1986年11月于北京

原 序

美国全国研究委员会 (National Research Council, NRC) 在1965年发表了《化学：机会和需要》(Chemistry: Opportunities and Needs)。这个报告，在Frank Westheimer的领导下，调查研究了当时化学学科的状况。在尔后的二十年中，化学已在它的技术、仪器和能力等方面经历了一场实实在在的革命。目前，我们正面临新的前沿。

化学的新前景显然需要对化学科学及其在智识和经济等方面的影响进行一次新的调研。美国科学院 (National Academy of sciences) 的化学部 (Chemistry Section) 认识到这个需要后，就在1982年由全国研究委员会的化学科技部 (Board on Chemical Sciences and Technology) 筹组的规划委员会召开了几次会议。规划委员会一致推荐，要对化学进行一次新的调研，并获该部批准。这个报告就是所得的结果。

委员会由广泛代表学术界、企业界、政府和地区部门以及化学各分支学科的26个成员组成。委员会被委以指导调查研究、作出调研结论并向有关方面推荐的重任。简言之，这个委员会的任务在于指明：

- 当代化学中的科研前沿；
- 化学科学中针对社会需要提供的各种机会；
- 为增进人类知识而开辟化学前沿和为提高人类福利而开发化学的机会所需的人力和物力。

为了达到这些目标，委员会组成了五个方面军。从中进一步邀请350个以上的化学研究工作者，来建议课题，为尖端研究撰稿、约稿，并为手稿进行评议。1983年秋，在美国科学院的科学、工程和公共政策委员会 (Academies' Committee on Science, Engineering, and Public Policy) 的主持下准备了一个阶段报告，称为“研究汇报小组关于化学中精选出的各种机会的报告” (Report of the Research Briefing Panel on selected Opportunities in Chemistry)。该报告基于具有特殊前景的科研方向，而这种前景在调研的早期就已明显。当时提出的推荐和优先都与报告中给出的进一步分析互相吻合。

象化学科学这样范围广阔、朝气蓬勃和不断进步的学科，势难用一个报告来覆盖其学科各个方面。例如：并未对化学工程单独进行详细讨论，而在此领域中的研究前沿显然也需要作补充考虑。现在，这个工作正在进行中。虽然这样，我相信，这个报告确实抓住了当今化学科学的精髓。报告的内容代表了化学界各方面的一致意见。美国全国研究委员会、科学界和我自己对委员会的成员和曾协助过各个方面军的很多同事，深为感激。我对伯克利加州大学以及NRC的化学科技部的同仁也很感激，后者在William Spindel的领导下，自始至终地为完成报告提供极为重要的支持。

这个报告的主要读者是那些在国会和政府中负责指导科学政策的人。我们相信，报告对其他读者也一样有用，这包括化学工业和化学研究单位的领导，包括那些关心科学及其与自己生活之间关系的人，还有那些关心处在科学最中心——化学的当代方向的人。

化学科学中机会调研委员会主席

George C. Pimentel

(唐有祺 译)

目 录

译序	(IX)
原序	(XI)
第一部分 绪论	(1)
第二部分 官方提要	(3)
第三部分 化学反应的控制	(14)
第一节 新流程	(14)
第二节 增加能源	(23)
第三节 新产品与新能源	(34)
第四节 智识前沿	(46)
第五节 仪器设备	(67)
第四部分 论述分子复杂性	(80)
第一节 增产食物	(80)
第二节 俾益健康	(96)
第三节 生物工程	(111)
第四节 智识前沿	(119)
第五节 仪器设备	(135)
第五部分 化学和国计民生	(147)
第一节 改善环境	(147)
第二节 持续的经济竞争	(158)
第三节 加强国防安全	(167)
第四节 智识前沿	(181)
第五节 仪器设备	(198)
第六部分 人才与教育	(208)
第七部分 化学科学基础研究的资金来源	(215)
附录	(244)
A. 化学工业表格	(244)
B. 贡献者	(248)

第一部分 绪 论

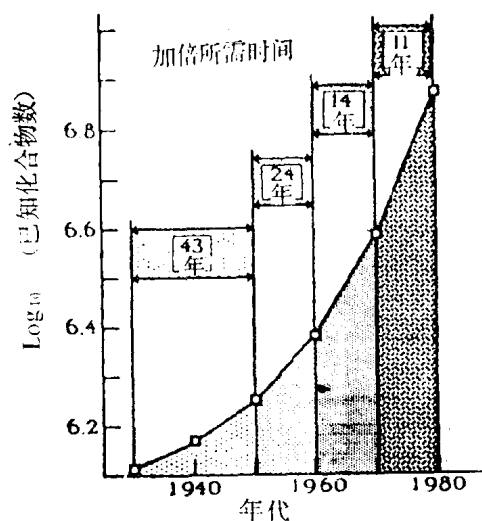
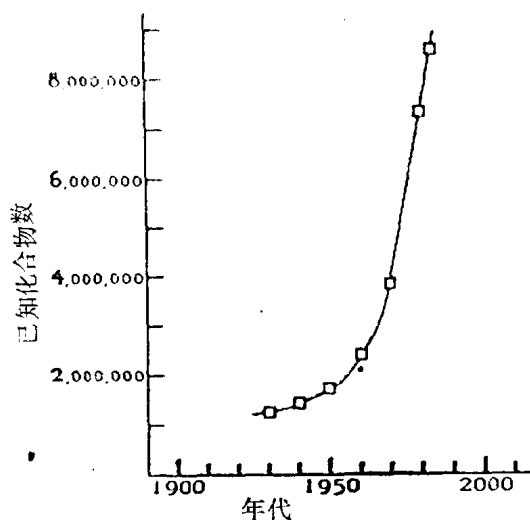
Frank H. Wastheimer 主编的 NRC (美国全国研究委员会) 1292号报告——化学：机会与需求 (Chemistry: Opportunities and Needs)*, 已经过去二十年了。在这本1965年出版物中, 所有的展望和乐观的预言如今差不多都实现了。二十年来的发展是如此迅速和深入, 化学的结构以及它与相邻科学间的关系都起了根本的变化。物理学全面性地提供了强有力的诊断工具, 使得化学的实验领域大为扩展。化学理论在计算机科学革命性突破的帮助下, 已成为学科的中坚。分子生物学在解释生命过程方面的辉煌进展, 向化学提出了许多挑战性的问题, 要求化学在分子水平上加以解释。重新估价一下化学的处境, 现在是时候了。机会在前面闪耀, 资源等待着开发。本报告将提出这种估价。

化学是一门中心科学, 它与社会多方面的需要有关。人们要为全人类提供食物, 开发资源, 提供穿衣和住房, 为日益减少和稀缺的材料提供代用品, 征服疾病改善健康, 增强国防, 以及控制和保护我们的环境, 都得依靠化学作为强有力的助手。化学的基础研究则将有助于我们的后代赖以满足演化中的需要, 赖以解决许多难以预期的问题。

由于化学能满足人们的需要, 它已成为国民经济中的重要支柱。美国化学品及其有关产品工业, 雇用着一百万人员。年出口量达1,750亿美元。目前正为国际贸易赢得120亿元的顺差, 占各种商品中的第二位。在国际市场中我们的竞争力主要看我们在化学科学中能否保持领先地位。对国家前途来说, 没有其它基础科学领域会比化学能获得更安全的投资。

最后, 我国的文化传统, 要求了解我们自身和我们的环境, 这就为科学探求提供了宽广的基础。化学对丰富我们的文化有着实质性的贡献。例如说: 人类首先遇到的问题就是生命的本质和怎样保护它。由于生命过程本身就是化学变化的表现, 因而要最终了解生命必须先了解化学活性。化学和生物学一起对人类知识领域的贡献具有普遍的哲学意义。

非常幸运, 我们现在所处的时代有着特殊的机会在各前沿取得进展。因为我们日益发展



新化学物质数目的增长快于指数增长

* 原文有误——编者

1106154

的才能，才可探求并了解化学反应的各基本步骤，同时也可以研讨十分复杂的分子。新化合物数目不断增加的速率，已快于指数表达方式，这一明显的现实也说明了化学的神速进展。强有力的仪器技术起着关键作用。这一切也说明了为什么近年来在化学领域中的投资能得到加速的回报。

这里应当说明本报告的编写方法。在绪言部份以后，第二部份将是官方提要。第三部分、第四部分及第五部分都分别由第一、二和三节依次开始。在这几节里，集中讨论化学对社会需求的反映。其中有些章节只是依次用些长不过一页的短文介绍，不使用很多技术语言，只是历史地阐明化学的用途。下面的章节则描述最新成就，指出未来潜力所在。第四节叙述从知识机会和研究尖端导出的潜力所在。当然在这一节里所用的词汇技术性更强一些。第五节着重叙述使用先进而昂贵的仪器所进行的尖端领域。这一节说明了化学得以加速进展与仪器的关系。也说明随着设备的日益复杂，功能日益增多，它的成本费用也在逐日上升。第六部份讨论了人才和教育，着重讨论了博士教育与获得成效的因果关系。第七部份评估了美国若要在化学领域内，在国际上居于领导地位所需要的策略。这一估价揭示出现行的基金水平不足以保证这一领导地位，从而不能保障应有的社会效益。

目前，联邦政府对化学研究的投资政策仍然是起源于古老的、已过时的试管和本生灯的时代。先进的现代化学实验室无论在资金方面，在劳务支持方面都更需要强有力的、持续不断的财政保证。所付的成本如果与回收的潜力相比较是微不足道的，对一个充满发现机会能增进人类知识，加强一个真正工业基础的科学领域，我们理当支持。对鼓励一批优秀的青年科学家，献身于这样一个将会大有所获的艰巨工作中，我们更应当支持。本报告提出的方案就是为完成这些使命而作。

第二部分 官方提要

化学与社会效益

很多社会需要，包括那些决定我们生活质量和经济实力的方面，都要求化学来解决。

新流程

美国的化学工业每年为我国带来120亿美元的贸易顺差。要想继续保持这种竞争优势，就必须不断改进现有流程，并引用新流程。这中间化学催化与合成的进展将起决定作用，它是保证我们处于世界领导地位的关键（参看第三部分第一节）。

增加能源

目前我国能源消费的92%依靠化学技术，这一状况即使到21世纪仍将如此。不过，将有以化学为基础的新能源被发掘出来。例如，怎样控制低品位燃料的化学反应，使我们既能保卫环境又能使能源的成本合理（参看第三部分第二节）。

新材料

今后二十年，我们衣、住、行所需要的材料将起很大变化。化学在各学科领域中将起着日益增大的关键作用。因为进展要求我们能剪裁新的，包括聚合物那样的物质，以代替传统的或者是稀缺的物质（参看第三部分第三节）。

增产食物

要增加世界食物供应，我们需要改进食物生产和保存的方法，要求改善土壤保持和光合作用。在弄清生物生命循环的细节方面，化学将与它邻近的各学科合作，并将起中心作用。一旦弄清了这些细节，就能有控制地制备一些新的激素、生长控制素、信息素、自我保护结构及营养素等。同时使用化学鉴别和合成方法，可以避免不希望的副效应的生成（参看第四部分第一节）。

裨益健康

出生、成长、繁衍、老化、突变和死亡等所有这些生命过程都是化学变化的表现。化学正处于在分子水平上弄清这些复杂生物过程的路口。它正在靠合理制备药物对生理学、医学做出贡献；它正在靠合成新的化合物，促进健康、减轻一些特定疾病，如动脉粥样硬化、高血压、帕金森氏病、癌以及中枢神经免疫功能的某些失调等带来的痛苦（参看第四部分第二节）。

生物技术

近年来，许多分子生物学家、遗传工程中的生物化学家，他们应用基本的化学原理确定了生物系统中分子与超大分子（蛋白质、DNA 等）的化学结构与其功能间的关系，取得了巨大的进展。在这方面要更进一步充分了解它们仍然潜在的东西，新的生物工程学者将更需要分子水平的知识。而化学家们在攻克这一目标时，将是他们的积极合作者（参看第四部分第二节）。

改善环境

面对着世界人口增加、城市化及生活水平的提高，保护环境就成为当代的主要问题。从战略有效来考虑，要保护环境我们就需要知道环境中有什么？它从哪里来？我们对它怎么办？要回答这些问题，化学首当其冲。化学能为我们提供分析方法，对紧迫情况及早提出警告，能弄清这些问题的起源，也能提出新的更代产品和流程，以改善这些不应有的对环境的冲击（参看第五部分第一节）。

持续的经济竞争

美国化学品年销量约为 1,750 亿美元，有着贸易顺差。要保持我们的生活水平很大程度上在于维护我们这种领先地位。我们将来的竞争，要求我们坚持在化学的尖端领域中起先锋作用，并向工业界不断输送有才能的年青科学家。这些科学家要求在尖端领域中工作过，并能使用现代化仪器（参看第五部分第二节）。

加强国防安全

国防安全的关键在于有健康的人民和一个活跃的生产型的经济。以上两个方面化学都起着根本性的作用。此外国家应有力量制止武装冲突，化学在这方面能再次大显身手。化学从动力、武器材料、常规武器直到最先进的战略概念都将作出非凡的贡献（参看第五部分第三节）。

化学的知识尖端

很幸运，当代的化学正酝酿着新的变化。由于日益进步的探测手段，使化学反应的基本步骤日趋了解，这样我们就能研究分子的复杂性。强有力的仪器技术起着决定作用。不难预言，一些惊人的发现将出现在化学的某些尖端领域中。

化学动力学

在今后三十年中，我们在化学动力学方面取得的进展，足以匹敌在过去三十年中我们在有关分子结构方面的收获。激光就能使化学家们扩展他们的实验境界。化学反应中过渡态物质的寿命是短暂的，但现在化学家们已可在这很短的时间内探测出它们，也就是说他们已掌握对分子的鉴别力。重要的化学反应也可以通过对反应剂能量的严格控制及对能量分布的鉴别区分而把它分割开来处理。在分子间和分子内部能量移动的途径，用理论或实验来解决它都已获得成功。这些新研究方法将能弄清化学变化中，一些控制瞬态的因子（参看第三部分第

四节)。

化学理论

化学理论与实验结合在一起,以便按需要设计具有特定化学结构与性能的产品。这种迫切而又可能实现的情况,使化学好象处在“文艺复兴”的前沿。用今日的计算机加上正确的计算使得一些用实验不易解决的过渡态,如燃烧过程中的中间态等,可以准确的计算出来。反应中的碰撞动力学、溶液中的电子迁移反应,以及液体状态的统计力学描述,这些贯穿化学中的理论问题都可依靠现代强大的计算机帮助解决(参看第三部分第四节)。

催化

依靠一系列强大的现代仪器可透视催化作用的内幕,这就把催化由一行技艺变成了一门科学。现在已经可能“看到”分子在催化剂表面上的反应。具有合乎人意立体结构及活力的金属有机已能如愿以偿地制成。有机分子则能按预先决定的表面形态合成具有酶结构的催化剂。将表面、溶液、电化学、光化学及酶催化等现象溶为一体的情况也已经显现。上述催化作用的各方面,最近必将获得经济上的或技术上的突破(参看第三部分第一节、第二节及第五章第四节)。

材料

现代实验技术和化学原理使我们有可能从化学战略观点去发现和设计新材料。化学家日益加入到并正在扩大一些工业集团,如玻璃、陶瓷、聚合物、合金及难熔材料等。在今后的年代里将会得到崭新结构的材料,有规则取向的液体、能自组建的固体、有机和离子导体、无中心及难熔材料等。在材料学的最尖端,化学家的中心任务是设计具有分子水平的记忆和电路装置(参看第三部分第三节、第五部分第二节、第四节)。

合成

现代仪器技术大大加速了反应途径的发现与检测,从而也加速了合成的策略。从发现系列的无机化合物到合成更复杂的有机化合物,这一转变消除了无机与有机的界限。现在已有可能通过选择分子附加物的办法控制有机金属分子的反应活性。新的均相催化剂将产生这样的结果:合成一些以金属原子簇为核心的化合物,就能够把金属与简单的金属有机化合物结合起来。这种结合包含着均相催化与表面催化反应。现在,已能精确复制及在结构上准确鉴别一些复杂的生物有机分子,这开辟了剪裁有生物功能产品的途径(参看第三部分第四节、第四部分第一节、二节、四节)。

生命过程

生物学的革命性飞跃要求用分子间作用的分析来处理问题。化学具有研讨复杂分子的能力,所以在阐明生物过程的分子间原因时能起重要的作用。可以任意地合成或剪裁一些分子:如天然产品类似物、化学治疗剂、具有新功能的改性蛋白质、遗传引入剂等,以检测我们对生物功能的假说是否正确。这使我们对人类全神贯注、渴望了解的“生命的本质和维护”这一些基础工作更靠近了(参看第四部分第二、三、四节及第五部分第二节)。