

唐敖庆院士逝世一周年

纪念唐敖庆

中国现代理论化学开拓者和奠基人

徐光宪



理论化学计算国家重点实验室

吉林大学理论化学研究所

吉林大学化学学院

吉林大学校长办公室

主编

唐敖庆院士逝世一周年

纪念唐敖庆

中国现代理论化学开拓者和奠基人

理论化学计算国家重点实验室

吉林大学理论化学研究所

吉林大学化学学院

吉林大学校长办公室

主编

吉林大学出版社

图书在版编目 (C I P) 数据

纪念唐敖庆 / 理论化学计算国家重点实验室编. —长
春: 吉林大学出版社, 2009.7

ISBN 978-7-5601-4572-3

I. 纪… II. 理… III. 唐敖庆 (1915~2008) - 纪念文集
IV. K826.13-53

中国版本图书馆CIP数据核字 (2009) 第109515号

书 名: 纪念唐敖庆

作 者: 理论化学计算国家重点实验室

责任编辑、责任校对: 赵洪波 李天白
吉林大学出版社出版、发行
开本: 787 × 1092 毫米1/16
印张: 17.5 字数: 250千字
ISBN 978-7-5601-4572-3

封面设计: 创意广告
长春华艺印刷有限公司 印刷
2009年07月 第1版
2009年07月 第1次印刷
定价: 96.00元

版权所有 翻印必究

社址: 长春市明德路421号 邮编: 130021

发行部电话: 0431-88499826

网址: <http://www.jlup.com.cn>

E-mail:jlup@mail.jlu.edu.cn



序

漫长的岁月会使人忘记许多往事，而有些记忆无论经过多少时间的磨洗也不会消失。如果用巴金先生的这句话来形容中国学人，特别是吉大人对我国学识渊深、德高望重的教育家和理论化学家唐敖庆院士的记忆，无疑是十分贴切的。唐敖庆院士是国际学术界遐迩闻名的科学家，是中国现代理论化学的开拓者和奠基人。时光荏苒，岁月如歌，唐敖庆先生其人其事经过了多年的磨洗仍然留在吉大人的心里。

早在1952年，唐敖庆先生便来到吉林大学工作，与蔡镏生、关实之、陶慰孙等老一代化学家一起，创建了吉林大学化学系。他对基础课教学进行了开拓性的改革，言传身教，以严格、科学的课程体系和独特的授课风格，培养出一批基础理论扎实、治学严谨的主讲教师。唐先生先后创建了吉林大学理论化学研究所和理论化学计算国家重点实验室，并领导他的科研集体，将该研究所和实验室建设成为国际上享有盛誉的理论化学研究中心，也成为吉林大学化学学科乃至整个学校的一面旗帜。

唐敖庆先生曾长期担任吉林大学副校长、党委副书记和校长职务，对吉林大学的建设和发展作出了卓越贡献。1956年他作为副校长协助著名教育家匡亚明校长工作，使学校有了迅速的发展，并于1959年进入国家重点综合性大学的行列，这是吉林大学发展史上的一次跨越。1978—1986年，他担任吉林大学校长，主持和领导学校的全面工作，自觉贯彻重点高等院校要办成“既是教育中心，又是科研中心”的精神，加快改革步伐，实现新的跨越，在教学质量和科学研究水平等方面取得重要突破，使吉林大学成为一所中外著名的重点大学。

唐敖庆先生以渊博的知识、丰富的经验和惊人的毅力献身于国家教育

与科学事业。他把自己坚实的数理基础有机地应用于理论化学的研究工作中，形成了独特的科学的研究风格，被国际上誉为“中国学派”。他始终及时把握国际学术前沿动向，开拓新课题，赶超国际学术先进水平，取得了一系列的卓越成就，先后5次获得国家自然科学奖，其中一等奖2次、二等奖2次、三等奖1次。他还获得了陈嘉庚化学奖、何梁何利科学与技术成就奖等殊荣。唐敖庆先生所开创的诸多研究领域奠定了中国理论化学研究的基础框架，成为中国理论化学走向世界的重要基石。

唐敖庆先生一直放眼于在全国范围内培养高层次理论化学优秀人才，先后主办了十余次面向全国的各种类型的理论化学讨论班、研究生班和进修班，培养出一支具有国际水平的理论化学研究队伍，他们之中涌现出一批才能卓著的学术领导人，仅中科院院士就有十几位之多。唐敖庆先生以自己的教学和科研实践，为基础学科高级专门人才的培养提供了具有中国特色的宝贵经验。

唐敖庆先生热爱祖国，理想信念坚定。在新中国成立伊始，他拒绝了美国提供的优越工作、生活条件，冲破重重阻碍，毅然回到了向往已久的新中国。他不仅远见卓识、造诣精深，而且严谨求实、勤勉执着，感人至深的敬业精神激励着无数学子在科学道路上前进。他光明磊落、公正无私，顾全大局、虚怀若谷，以祖国的需要为己任，他高尚的品德和情操永远是我们心中的光辉典范。

2008年7月15日是吉大人永远难忘的日子，唐敖庆先生因病不幸在北京逝世。唐敖庆先生的与世长辞是我国教育界、科技界的重大损失，是吉林大学的重大损失。斯人已矣，精神永存。唐敖庆先生的思想与学术都已成为吉林大学宝贵的精神财富。时值唐敖庆先生逝世一周年之际，吉大人缅怀先生的不朽业绩，把中心校区新的理化楼命名为“唐敖庆楼”，大楼前安放唐敖庆先生的全身塑像，让唐敖庆精神时时刻刻激励我们每一名吉大人把学校建设得更好。

张伟
2009.7.1



唐敖庆同志生平 1

唐敖庆院士事迹 5

主办各种类型的高层次理论化学讨论班	6
物质结构讨论班	7
量子化学研究生、教师和科研人员进修班	9
分子光谱学讲习班和谱学理论与技术高级研讨班	11
在科学研究方面作出的卓越贡献	13
孜孜不倦从事科学的研究的身影	16
广泛开展国内外学术交流活动	20
领导吉林大学步入辉煌	24
开创中国的自然科学基金制度	26
中国共产党优秀党员和深受爱戴的科学家	28
于2008年7月15日与世长辞	30

唐敖庆院士塑像揭幕暨唐敖庆研究所揭牌仪式 31

中国现代理论化学的开拓者和奠基人 37

分子内旋转与化学键理论	38
配位场理论方法	39
分子轨道图形理论	40
高分子反应动力学统计理论	41
原子簇的结构规则和化学键	42



唐敖庆院士1997年在理论化学计算国家重点实验室的讲话	45
吉林大学的理论化学	51
实验室的研究水平迅速提高.....	55
自我特色的理论方法和计算软件快速发展.....	56
国际水平的研究平台.....	57
在国内外相同学科领域实验室的地位和作用.....	62
唐敖庆——著名的科学家、卓越的教育家和出色的领导者	65
领导吉林大学步入辉煌.....	66
培育我国基础科学人才.....	67
开拓和奠基中国的理论化学事业.....	69
开创中国的自然科学基金制度.....	71
附录 I 唐敖庆院士获得国家自然科学奖代表性论文全文精选	73
附录 II 唐敖庆科学论著目录	242
附录 III 唐敖庆年表	268



唐敖庆同志生平



唐敖庆（1915—2008）



纪念

唐敖庆

中国共产党优秀党员，忠诚的共产主义战士，政协第七、八届全国委员会常委，我国著名的理论化学家、教育家和世界知名的量子化学家，中国科学院资深院士（原学部委员），国家自然科学基金委员会原主任唐敖庆同志，因病医治无效，于2008年7月15日11时15分在北京逝世，享年93岁。

唐敖庆同志1915年11月出生于江苏宜兴。自幼好学，青少年时期立志以教育和科学报国。1936—1940年先后在北京大学化学系、长沙临时大学化学系、西南联合大学化学系学习。1940—1946年在昆明西南联大化学系任助教。1946—1949年在美国哥伦比亚大学化学研究院就读，获博士学位。1950年1月回国。1950—1952年先后任北京大学化学系副教授、教授。1952—1956年任东北人民大学化学系教授。1956—1986年任吉林大学副校长、副书记、校长、教授。1986—1990年任国家自然科学基金委员会主任。现任国家自然科学基金委员会名誉主任，吉林大学名誉校长、教授。

唐敖庆同志是我国学识渊深、德高望重、遐迩闻名的教育家和理论化学家，是中国现代理论化学的开拓者和奠基人。回国50余年来，他以祖国的需要为己任，在科研和教育战线上顽强拼搏，为国家培养了大批中高级理论化学人才和学术带头人，其中已有多位当选为中国科学院院士。他以严谨、求实、创新的科学态度，在理论化学领域共发表了300余篇高水平的学术论文和8部学术专著。其“分子内旋理论”1956年获得中国科学院自然科学奖三等奖，“配位场理论方法”1982年荣获国家自然科学奖一等奖，“分子轨道图形理论及其应用”1987年获得国家自然科学奖一等奖，“高分子缩聚加聚与交联反应统计理论”1989年获得国家自然科学奖二等奖，“原子簇的结构、化学键和结构规则”2000年获得国家自然科学奖二等奖。另外，1994年荣获陈嘉庚化学奖，1995年荣获何梁何利科学与技术成就奖。

唐敖庆同志20世纪50年代研究化学键函数和分子内旋转的理论，提出一个可用于计算复杂分子内旋转的能量变化的势能函数公式，用分子力学计算分子构象。60年代建立了一套从连续群到点群的不可约张量方法，从而统一了配位场理论的各种方案，创造性地发展和完善了配位场理论，为发展配位化学、稀土化学、工业催化剂的研究和激光材料的设计等提供了新的理论依据。70年代，从事分子轨道图形理论的研究，提出三条图形定量，简化了具有重复单元的同系物、分子及化合物等的量子化学计算。在高分子科学领

唐敖庆同志生平



域，提出缩聚、加聚与交联反应的统计理论。80年代提出原子簇化学的结构规则，比著名的Wade规则的适用范围更为广泛。90年代还不顾年迈体弱，开展高碳原子簇化学的理论研究，预见到一种对称性的稳定富勒烯化合物的存在。上述不朽业绩，得到国际理论化学界的承认与重视，为世界化学发展作出了突出的贡献，其不朽业绩将彪炳我国理论化学发展史册。

唐敖庆同志由于在学术界和教育界崇高的威望，当选为中国科学院主席团成员、中国科学院学部委员（1955年）、国际量子和分子科学研究院院士（1981年），被任命为国务院学位委员会委员、第二届国家自然科学奖励委员会副主任委员、第三届中国科学技术协会副主席等职。曾任中国化学会理事长、国际人才交流协会副会长、中国高等教育学会副会长。

1956年起唐敖庆同志历任吉林大学副校长、党委副书记、校长，到1986年的30年里，对吉林大学的建设和发展作出了重要的贡献，使吉林大学成为全国著名的重点大学之一。1979年和1981年分别被评为长春市、吉林省特等劳动模范，1981年曾荣膺全国劳动模范，获国务院颁发的证书和金质奖章，荣获全国高校先进科技工作者称号。

1986—1990年唐敖庆同志任国家自然科学基金委员会主任，引入鼓励创新、科学民主、平等竞争的良好机制，确立了“依靠专家、发扬民主、择优支持、公正合理”的评审原则，使新生的自然科学基金制度逐渐成长和壮大，成为我国支持基础研究的主渠道之一，为中国特色科学基金制的创立、完善与发展，促进我国基础研究与加速培养我国高水平科技人才，发挥了关键性作用，作出了突出的贡献。

唐敖庆同志是中国共产党第十、十一、十二次全国代表大会代表，第二、三届全国人民代表大会代表，中国人民政治协商会议第六、七、八届委员。

唐敖庆同志1951年12月加入中国民主同盟，1958年6月加入中国共产党。他热爱祖国，对党忠诚，理想信念坚定。在民族危亡之时，他向往光明、追求真理。在新中国成立伊始，他谢绝美国导师再三挽留，毅然回国。他说：“我的事业在自己的祖国，我的祖国就是中华人民共和国。”多年来，他忠于党，忠于人民，刻苦学习马列主义、毛泽东思想、邓小平理论。

“文化大革命”期间，他坚持原则，对林彪、江青反革命集团的倒行逆施深



纪念

唐敖庆

恶痛绝，以实际行动尽力减少“文化大革命”给教育与科研带来的损失。党的十一届三中全会以来，他坚决拥护、认真贯彻党的路线、方针和政策，在思想上、政治上、行动上与党中央保持高度一致。他以渊博的知识、丰富的经验和惊人的毅力，献身于国家教育与科学事业。他的视力不好，常常带着2000度的深度近视镜艰苦工作。晚年他不顾年迈体弱，继续致力于推动国家科学进步和社会发展的事业，取得良好效果。其爱国情怀、敬业精神感人至深。他多次参与国家重大决策咨询活动，积极为国家经济与科技发展建言献策，产生了深远的社会影响。他坚持党性原则，遵守党的纪律，严于律己，宽以待人，顾全大局，虚怀若谷。他密切联系群众，为人诚恳正直，谦虚朴实，光明磊落，清正廉洁，作风正派，深受科技与教育战线广大干部、职工的爱戴与尊敬。

唐敖庆同志的一生，是革命的一生，艰苦奋斗的一生，是爱党、爱国、爱教育、爱科学的一生，是业绩辉煌、德厚流光的一生，是忘我拼搏、无私奉献的一生。他的与世长辞，使我党失去了一名优秀党员、一位好干部，使我们失去了一位好导师，是我国教育、科技战线的重大损失。我们要化悲痛为力量，学习他坚定执着的政治信念，对党无比忠诚、热爱祖国的高尚情怀；学习他勤勉敬业、保持优良传统的工作作风；学习他视事业重于生命的奉献精神，为夺取全面建设小康社会的新胜利而努力奋斗。

唐敖庆同志永垂不朽！

北京八宝山唐敖庆遗体告别仪式上

唐敖庆逝世治丧委员会发布

2008年7月21日



唐敖庆院士事迹

唐敖庆同志，中国共产党优秀党员，我国学识渊深、德高望重、遐迩闻名的教育家和理论化学家，中国现代理论化学的开拓者和奠基人。1950年1月回国，1950—1952年任北京大学化学系教授。积极响应国家建设东北的需要，由组织上调转到吉林大学（原东北人民大学）化学系任教。五十余年来，他以祖国的需要为己任，在科研和教育战线上顽强拼搏，为国家培养了大批中高级理论化学人才和学术带头人，其中已有多位当选为中国科学院院士。他以严谨、求实、创新的科学态度，在我国理论化学的科学研究方面，作出了杰出的贡献，曾两次获国家自然科学奖一等奖。上述不朽业绩，得到国际理论化学界的承认与重视，为化学发展作出了突出的贡献，其不朽业绩将彪炳我国理论化学发展史册。



纪念

唐敖庆

主办各种类型的高层次理论化学讨论班

唐敖庆院士历来主张，高等学校的教师应该既从事教学又搞科学研究，必须同时具备这两种能力。他在吉林大学先后主讲过无机化学、物理化学、物质结构、量子化学、统计力学等十多门课程，经常同时讲授两门甚至三门课程，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改革，培养出一批基础理论扎实、治学严谨的主讲教师。

唐敖庆院士着力从事基础教学和研究生培养的同时，把人才培养放眼到全国。他非常重视主办面对全国的各种类型的理论化学讨论班，培养出一支具有国际水平的理论化学研究队伍，在我国社会主义建设各个时期都作出了重要的贡献，使得我国在国际理论化学领域占有重要的席位。以下列出唐敖庆院士主办的主要理论化学讨论班：

- 1953年7月 唐敖庆、卢嘉锡在青岛主讲暑期物质结构进修班；
- 1954年7月 唐敖庆、卢嘉锡、徐光宪在北京主讲暑期物质结构进修班；
- 1958年7月—1960年7月 在长春主办高分子物理化学学术讨论班；
- 1963年9月—1965年8月 在吉林大学主办物质结构学术讨论班；
- 1975年5月 在中科院有机化学研究所主办量子化学短训班；
- 1978年10月—1980年1月 在吉林大学主办量子化学研究生、青年教师和科研人员进修班；
- 1985年4月 在复旦大学主办微观反应动力学讲习班；
- 1986年7月 在吉林大学主办量子化学教学研究班；
- 1987年10月 在南京大学主办量子化学教学研究班；
- 1988年7月 在吉林大学主办高分子标度理论讲习班；
- 1989年7月 在吉林大学主办高分子标度理论高级研讨班；
- 1994年9月 在吉林大学主办全国分子光谱学讲习班和谱学理论与技术高级研讨班。



物质结构讨论班

1963年，高等教育部委托吉林大学主办物质结构学术讨论班，讨论班历经两年（1963年9月—1965年8月）。唐敖庆院士系统讲授了连续群、置换群、分子点群等的表示理论及其应用，每周一到周五上午四学时课程，全部由他亲自主讲。在讨论班期间，唐敖庆院士领导他的科研集体开展了配位场理论方法的研究。

参加人员来自国内高等院校和科学院研究所，其中若干成员当时已具有副教授以上的水准。在上世纪90年代，有五人先后当选为中国科学院院士：孙家钟（吉林大学），江元生（吉林大学），张乾二（厦门大学），邓从豪（山东大学），刘若庄（北京师范大学）。





纪念

唐敖庆



1963年，唐敖庆院士在讨论班上讲授群的表示理论



量子化学研究生、教师和 科研人员进修班

1978年1月，经国家科委批准，在吉林大学成立理论化学研究所，唐敖庆院士任所长。研究所成立后，唐敖庆院士根据国际理论化学发展趋势和我国科学发展的需要，决定在全国范围内培养大批中青年理论化学专业人才。经教育部批准，唐敖庆院士于1978年10月—1980年1月在吉林大学举办量子化学研究生、教师和科研人员进修班。来自全国高校、科研单位的259名中青年教学科研人员参加了进修班。唐敖庆院士主讲量子力学和量子化学等课程，并布置参加讨论班的成员进行各种课题的科研工作。此次进修班使中国的理论化学专业人才遍及祖国大地，并培养了一大批高水平的理论化学优秀人才和学术带头人，有若干人后来当选为中科院院士。讨论班后，唐敖庆院士的讲授内容整理成《量子化学》一书，于1982年由科学出版社出版。



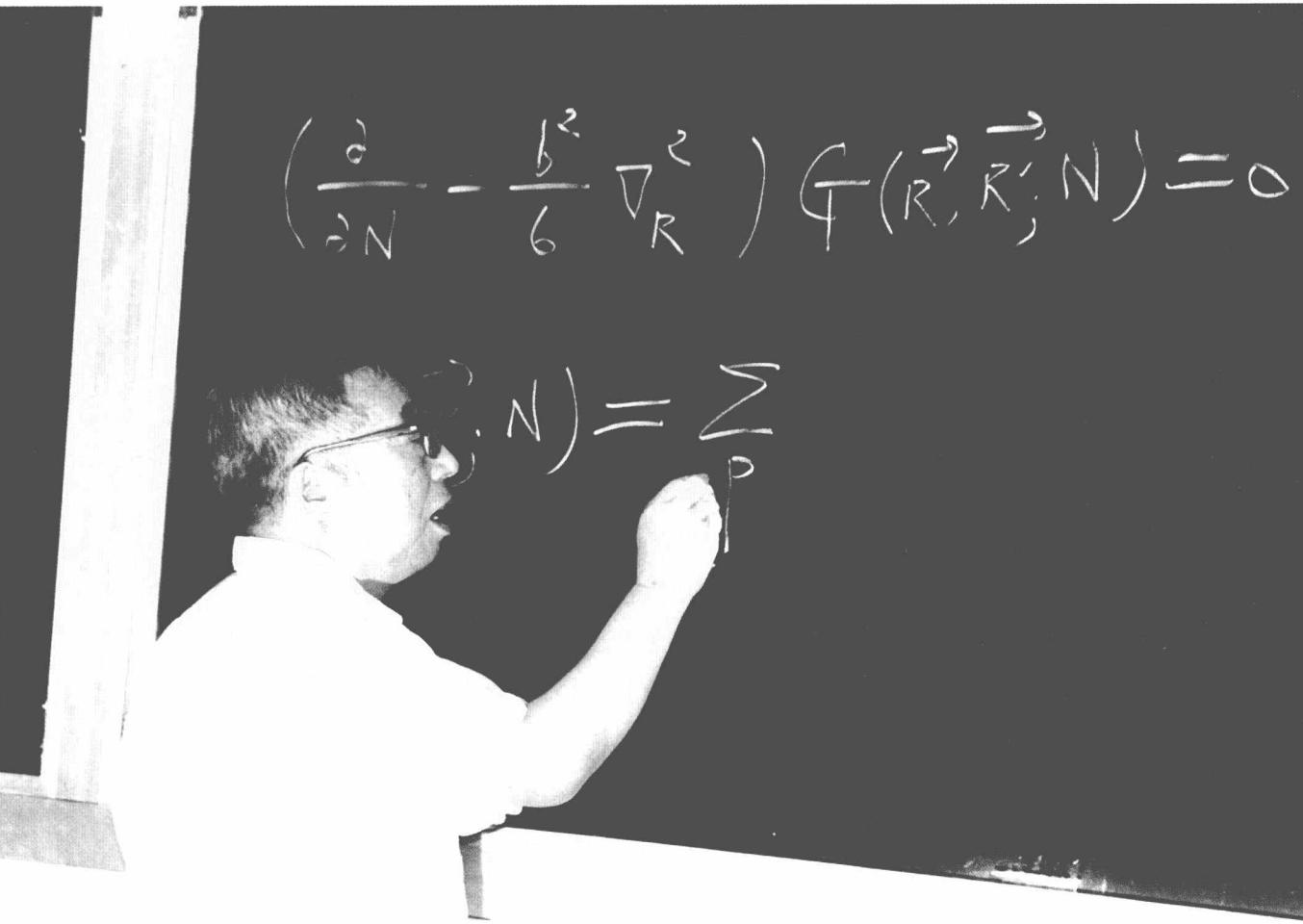


纪念

唐敖庆

$$\left(\frac{\partial}{\partial N} - \frac{b^2}{6} \nabla_R^2 \right) G(\vec{R}, \vec{R}; N) = 0$$

$$G(\vec{R}, \vec{R}; N) = \sum_p$$



1978年，唐敖庆院士在讨论班上讲授《量子化学》