

第一篇 回顾与动向

前 言

现在很多人在预测 21 世纪学科发展前景。推测 21 世纪的化学会在哪些方面历史性突破？什么是未来化学的新生长点？它会发展成什么样的学科？它在整个科学体系中占有什么地位？从另一方面看，21 世纪中化学会遇到来自哪一方面的挑战？会遇到什么难题？会陷入什么困境？绝大多数化学工作者都会思考这些问题，但是实际上谁也说不清这些问题。如果我们一个一个地来考察科学技术领域中的重要发现和创造，似乎都发生在偶然的会之中；而且，好象计划制订得越明确、预期目标越清楚、实验方案越合理、可行，就越不大可能有重大突破。那么，是否科学研究中的创新既不可能预见，也不可能有计划地达到呢？是不是人们只能随着科学发展的潮流，等待机遇呢？实际上，我们只要温故以知新，还是可以看出发展的动向来的。在 19 世纪末到 20 世纪初，有几个重要动向决定了 20 世纪的化学发展方向。周期律、原子结构、放射性、人工放射性元素、量子论以至量子化学等等形成了贯穿 100 年的向物质的微观本质深入的一条主线。另外，从热力学到动力学，从平衡态到非平衡态，这是化学宏观研究的另一条主线。从制备到合成，从无机化合物到有机化合物，从小分子到高分子，从简单分子到复杂分子，这条合成化学发展途径也是从 19 世纪末发展到 20 世纪中去的。这说明，可以从分析目前发展动向去看未来若干年的发展方向。在这一部分中我们将给读者展示化学各个领域过去的历史和目前的动向，希望读者能够从中找到未来化学发展的方向。

学科的划分、融合和重组，恐怕是不能停止的，而且越来越快。化学诞生之后渐渐形成无机化学、有机化学、分析化学和物理化学等少数几个分支学科。如此发展了上百年。但是，一方面随着研究的细化，它们又分化成新的学科；另一方面又因为实际问题大多数是

综合的，不能单靠一个分支学科所能解决。因此又不断交叉、融合，产生另外一些新学科。在这一部分，先讨论各个传统分支学科的动向，然后再讨论交叉学科的动向。

这一部分是根据 1999 年在香港由香港理工大学主办、有两岸三地主要化学家参加的“21 世纪化学前景讨论会”上的发言，集思广益编写而成的。初稿又经过许多化学家提出意见，作了许多修改和补充。

第一章 20 世纪化学的回顾

“继往开来”在展望 21 世纪化学的发展之前，先要回顾一下 20 世纪所走过的历程。20 世纪化学的发展，不论是化学基础研究，还是化学工业，都是高速奋进的创新的百年。从 19 世纪的经典化学到 20 世纪的现代化学的飞跃，从本质来说是从 19 世纪的道尔顿原子论、门捷列夫元素周期表等在原子的层次上认识和研究化学，进步到 20 世纪在分子的层次上认识和研究化学。如对组成分子的化学键本质、分子的强相互作用和弱相互作用、分子催化、高分子材料的结构与功能关系的认识，以至 1200 多万种新化合物的合成（仅 1995 年就完成了 100 万种化合物的设计和合成）。分子生物学在生物分子的结构与功能关系上的研究促进了生命化学的研究和发展。另一方面，化学工业及与化学相关的国计民生的各个领域，如粮食、能源、交通、材料、医药、国防以及人们的吃、穿、用、住等，在这 100 年中变化是有目共睹的。从 1900 年到 1999 年，化学的发展给人们生活质量提高所做的贡献实在是一言难尽。在人类享受的 20 世纪现代物质文明中，化学作出了重大贡献。下面将从化学基础研究和化学工业两个方面分别简要地作一回顾。

一、基础研究的重大突破

本世纪化学基础研究中的重大突破性成果可从历届诺贝尔化学奖获得者的重大贡献中获悉。从 1901 年开始在世界范围评选诺贝尔化学奖以来到 1999 年颁奖，应该有 99 届了。但其中由于战争和其他原因，有 8 次（1916，1917，1919，1924，1939，1940，1941 和 1942 年）没有颁发，所以实际颁发了 91 届。应当说这些诺贝尔化学奖得主在当时均在化学的某一领域中有了重大发现和做出了杰出贡献，并经长时间的考验和严格的推荐及评选而产生的（当然也可能有某些政

治因素而产生的偏见致使一些当时认为是重大研究成果而被忽略，如侯氏制碱法、牛胰岛素的合成等）。

在 91 届的诺贝尔化学奖中以二级学科区分，大致如下（由于某些研究结果属学科交叉，所以在区分归属时会有些出入）：无机化学 14 项，有机化学 32 项，物理化学 26 项，高分子化学 4 项，生物化学 11 项，分析化学 6 项。现不妨从中遴选在本世纪化学发展中起里程碑作用的重大成果作一历史性的概述。

1. 放射性和铀裂变的重大发现

本世纪在能源利用方面一个重大突破是核能的释放和可控利用，1g 铀原子在核裂变时所放出的能量相当于燃烧 2.5t 煤所得到的热能，两者重量相差 2.5×10^6 倍。煤在燃烧时，只是碳原子和氧原子的核外电子进行相互作用和反应，生成二氧化碳分子，这是一种化学变化，放出的是化学能。而铀核裂变所放的热是原子核内发生的变化，铀核分裂成两个原子量较小的碎片，同时放出大量的能量，这种可控释放的热能在本世纪已被用于核电站供给人类以充足的能源，然而这一工业应用的前期基础研究经历了半个世纪。经科学家们不懈的努力，仅此领域就产生了 6 项诺贝尔奖。

首先是居里夫妇在 19 世纪末到 20 世纪初投身于寻找新的放射性元素的研究。从大量的沥青铀矿中，经过多次的化学分离和纯制，终于发现和得到了放射性比铀强 400 倍的新的金属元素钋，以及比铀的放射性强 200 多万倍的镭。这一项艰巨的化学研究打开了 20 世纪原子物理学的大门。居里夫妇为此荣获了 1903 年诺贝尔物理奖。1906 年居里不幸遇车祸身亡，居里夫人继续专心于镭的研究和应用，测定了镭的原子量，建立了镭的放射性标准。为了纪念居里，在 1910 年的放射学大会上一致决定把放射性强度的单位定名为居里，沿用至今。同时居里夫人制备了 20g 金属镭，存放在巴黎国际度量衡中心作为标准，并积极提倡把镭用于医疗，使辐射治疗得到广泛应用，造福人类。为了表彰居里夫人在发现钋和镭、开拓放射化学新领域以及发展放射性元素的应用方面的贡献，1911 年她被再次授予诺贝尔化学奖。

1908 年英国人卢瑟福 (E.Rutherford) 在剑桥大学从事关于元素衰变和放射性物质的化学研究, 提出了原子的有核结构模型, 并提出了放射性元素的衰变理论, 研究了人工核反应, 从而获得了诺贝尔化学奖。

居里夫人的女儿和女婿约里奥-居里夫妇 (I.Joliot - Curie 和 F.Joliot - Curie) 继承了父母开创的事业, 从事人工放射性研究。他们用钋的 α 射线轰击硼、铝、镁时发现产生了带有放射性的原子核, 这些元素核不断地放出 β^+ 射线或“正电子”并按照放射性元素的衰变规律, 其射线强度逐渐减少。进一步研究证明铝受 α -粒子轰击放出中子后变成磷。这种磷是放射性元素, 逐渐放出 β -射线, 蜕变为稳定的硅核, 其半衰期为 2.5min。这是第一次发现用人工方法创造出放射性元素。人工放射性的发现和放射性同位素用作示踪原子, 其科学意义都是巨大的。1934 年居里夫人病重时获悉了这一发现, 她在逝世前将这一成就编入了她的名著“论放射性”, 而约里奥-居里夫妇荣获了 1935 年诺贝尔化学奖。

约里奥-居里夫妇的思路和方法为意大利原子物理学家费米 (E.Fermi) 所继承和发展。他考虑到用 α -粒子轰击原子核, 由于电性斥力, 使 α -粒子难于接近靶核, 其产率很低, 只有百万分之一。因此他改用中子轰击原子核, 特别经石蜡慢化了的慢中子, 增加了中子和原子核的碰撞机率, 使核反应截面大大提高, 其产率接近 1。慢中子的发现是核能可控利用的又一关键所在。费米和他的同事用慢中子轰击各种元素获得了 60 种新的放射性元素, 并发现中子轰击原子核后, 就被原子核捕获得到一个新原子核, 且不稳定, 核中的一个中子将放出一 β 衰变, 而变成原子序数增加 1 的元素。这一原理和方法的发现, 使人工放射性元素的研究迅速成为当时的热点。物理学介入化学, 用物理学方法在周期表上增加新元素成为可能。费米的这一成就使他获得了 1938 年的诺贝尔物理奖。

哈恩 (O.Hahn)、梅特娜 (L.Meitner) 和 I.Joliot - Curie 等在 Fermi 成就的引导下, 努力寻找和创造新的超铀元素, 在中子轰击铀或钍后, 发现有化学性质类似的镧和钡的中等原子量元素, 而不是原

子量大的超铀元素，这与费米的规律性不一致。这一现象困惑了当时科学界将近 5 年。直到 1938 年，I.Joliot - Curie 夫人等证明中子轰击铀或钍产生的不是镭，而是半衰期为 3.5h 的 57 号元素镭后，在 1939 年，O.Hahn、斯特拉斯曼（F.Strassmann）发现中子轰击铀 235 产生 3.5h 半衰期的是几种元素的混合物，其中有几种是碱土金属，它们放射 β -射线后蜕变为稀土元素。因此铀 235 吸收一个中子后，核分裂为两部分中等原子量的钡和稀土元素等，这就是原子核分裂的裂变现象。裂变现象的发现震撼了当时科学界，成为原子能利用的基础，哈恩因此而获得 1944 年诺贝尔化学奖。

1939 年弗里施（O.Frish）在裂变现象中观察到伴随着裂变碎片有巨大的能量，在空气中裂变碎片的射程可达 2.2cm。同时约里奥-居里夫妇和费米都测定了铀裂变时还放出中子，每次裂变约放出 2~3 个中子，这使链式反应成为可能。至此释放原子能的前期基础研究已经完成。从放射性的发现开始，然后发现人工放射性，再后又发现铀裂变伴随放出能量和中子，以至核裂变的可控链式反应。于是，1942 年 Fermi 领导下成功地建造了第一座原子反应堆，1945 年美国在日本投下了原子弹。这就是 20 世纪初至中叶化学和物理界具有里程碑作用的重大突破——核裂变和原子能的利用。

回顾这一段历史可以看出，化学和物理学在整个自然科学的进步中起着互补协同的推动作用。物理学在核上动手术创造新元素，化学在分子层次上动手术，创造新分子，这成为 20 世纪科学史中的主流。

2. 化学键和现代量子化学理论

美国化学家鲍林（L.Pauling）以研究物质结构和化学键理论闻名。他对化学的最大的贡献是关于化学键的本质的研究以及在物质结构方面的应用。他长期从事 X-射线晶体结构研究，寻求分子内部的结构信息，把量子力学应用于分子结构，把原子价理论扩展到金属和金属间化合物，提出了电负性计算方法和概念，创立了轨道杂化理论和价键学说。1954 年由于他在化学键本质研究和用化学键理论来阐

明物质结构方面所作出的重大贡献而荣获诺贝尔化学奖。他不仅是当之无愧的现代结构化学的奠基人，而且他把化学结构理论引入生物大分子结构研究，为沃森（Watson）及克里克（Crick）发现 DNA 双螺旋结构奠定基础，也开拓了 20 世纪后期在分子层次研究生物系统的广阔领域。分子病理学、分子免疫学、分子遗传学都是在他早期所做的化学与生物学结合的工作基础上建立的。他是公认的现代最伟大的化学家之一。1962 年又因支持进步事业，积极维护世界和平反对战争而获诺贝尔和平奖。

在化学键和现代结构化学理论方面 Pauling 是杰出代表和开拓者，但形成现代化学的理论，也是经许多化学家将近半个世纪的努力，才达到今天这样深入的认识。以获得诺贝尔化学奖计算就有 4 届之多。

化学键理论的建立和发展主要有三种理论：Pauling 的价键理论（VB），莫利肯（R.S.Mulliken）的分子轨道理论（MO）和贝特（H.A.Bethe）的配位场理论。价键理论将量子力学的原理和化学的直观经验紧密结合，在经典化学中引入了量子力学理论和一系列的新概念，如杂化、共振、 σ 键、 π 键、电负性、电子配对等，对当时化学键理论的发展起了重要作用。分子轨道理论的出发点是分子的整体性，重视分子中电子运动状况，以分子轨道的概念来克服价键理论中强调电子配对所造成分子电子波函数难于进行数学运算的缺点。Mulliken 把原子轨道线性组合成分子轨道，可用数学计算并程序化。分子轨道法处理分子结构的结果与分子光谱数据吻合，因此 50 年代开始，价键理论逐渐被分子轨道理论所替代。因莫利肯用量子力学创立了化学结构分子轨道理论，阐明了分子的共价键本质和电子结构，1966 年荣获诺贝尔化学奖。随着量子化学的发展，日本化学家福井谦一在 1952 年提出了前线轨道理论。其基本观点是：分子的许多性质是由最高占据轨道和最低未占轨道决定的，即给电子分子中的能量最高被占分子轨道（HOMO）和受电子分子中能量最低未占分子轨道（LOMO）在化学反应中起主导作用。这就能较好地解释一系列化学反应问题。1965 年美国化学家伍德沃德和霍夫曼 R.B.Woodward

和 R.Hoffmann) 以前线轨道理论为工具讨论了周环反应的立体化学选择定则, 从动态角度来判断和预言化学反应的方向、难易程度和产物的立体构型等, 把量子力学由静态发展到动态, 从而提出了分子轨道对称守恒原理, 又称伍德沃德-霍夫曼规则。这一理论被认为是认识化学反应发展史上的一个里程碑, 霍夫曼的分子轨道对称守恒原理和福井谦一的前线轨道理论共获 1981 年诺贝尔化学奖。

事情还没有结束。最近该领域又有了新发展, 1998 年诺贝尔化学奖授予美国化学家科恩 (W.Kohn) 和英国化学家波普尔 (J.A.Pople), 以表彰他们在量子化学领域作出的开创性贡献。Kohn 发展了电子密度泛函理论; Pople 发展了量子化学计算方法。在过去, 分子轨道理论中是以分子中每个电子的状态作为波函数进行量子化学计算的。对简单的小分子, 从薛定谔方程的求解中可得到分子的能量、偶极矩、电子分布等性质; 但对稍为复杂一点、分子量更大的分子, 其计算量就大到量子化学家们无法解决了。Kohn 的密度泛函理论给分子性质的计算开辟了新途径。他提出基态是非简并态的多电子体系, 其电子密度决定该体系基态的一切物理性质。这样把过去单个电子的波函数变成电子密度的概念来进行计算, 大大地简化了程序, 减少了计算量。再加上 Pople 发展了一系列量子化学计算方法, 如 NDDO (忽略双原子微分重叠), CNDO (全略微分重叠), INDO (间略微分重叠) 等, 并采用高斯函数解决了哈特里-福克-罗特汉方程计算的关键障碍, 做出了量子化学计算软件包 Gaussian-70 到 Gaussian-98。可计算分子体系的能量, 分子的平衡性质, 过渡态和反应途径, 分子的电、磁和光性质等等, 使化学进入实验和理论计算并重的新时代。

从化学键和量子化学理论的发展来看, 足足花了半个世纪左右的时间, 让化学家由浅入深, 认识分子的本质及其相互作用的基本原理, 从而让人们进入分子的理性设计的高层次领域, 创造新的功能分子, 如新材料设计、药物设计、物性预测等, 这也是 20 世纪化学的一个重大突破。

3. 创造新分子新结构——合成化学

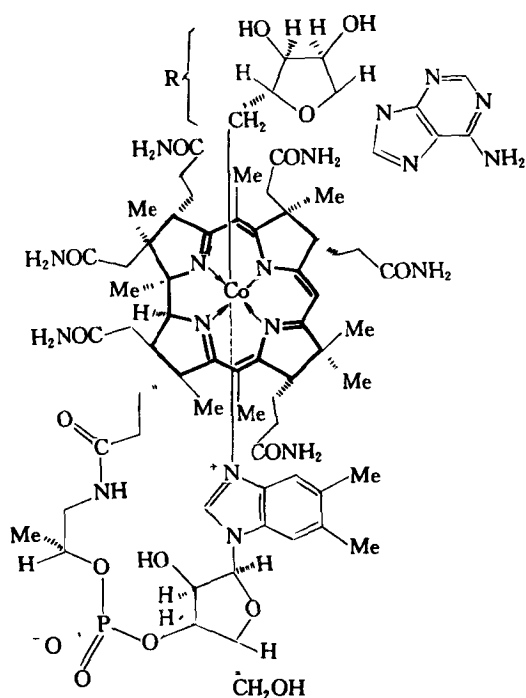
设计和合成新的分子是合成化学家的首要任务。这 100 年来有机化学家已经设计和合成了数百万个有机化合物，几乎又创造了一个新的自然界；同时还发现了大量的新反应、新试剂、新方法和新理论。这是合成化学中相辅相成的两个方面。正由于合成过程中发现的新反应、新试剂、新方法，又促进了大量新化合物的合成，其中金属有机化学在合成化学中起着重要的导向和催化作用。纵贯 20 世纪，在有机合成和金属有机化学领域共获得 10 届诺贝尔化学奖，这在化学的三级学科中是首屈一指的。

1912 年格林尼亚 (V. Grignard) 因发明格林尼亚试剂，开创了有机金属在各种官能团反应中的新领域而获诺贝尔化学奖。该试剂沿用至今，仍是有机反应和合成中最常用的试剂之一。

1928 年狄尔斯 (O. Diels) 和阿尔德 (K. Alder) 发现了双烯合成反应，这反应包括乙烯基化合物对二烯化合物的 1,4-加成，特别是共轭二烯易与含有被羰基、羧基、氰基或硝基所活化的双键、叁键发生加成反应，具有普遍性。二人获 1950 年诺贝尔化学奖。

1953 年德国化学家齐格勒 (K. Ziegler) 和意大利的纳塔 (G. Natta) 发现了有机金属催化烯烃定向聚合，实现了乙烯的常压聚合和丙烯的定向有规聚合而荣获 1963 年诺贝尔化学奖。

尝试人工合成生物分子一直是有机合成化学的研究重点。从最早的甾体 A. Windaus, 1928 诺贝尔化学奖) 抗坏血酸 W. N. Haworth, 1937, 诺贝尔化学奖)、生物碱 (R. Robinson, 1947 年诺贝尔化学奖) 到多肽 (V. du Vigneand, 1955 年诺贝尔化学奖) 逐渐深入，而 Robinson 的工作在推动近代有机合成发展中起了重要作用。到 1965 年有机合成大师 R. B. Woodward 由于其有机合成的独创思维和高超技艺，先后合成了奎宁、胆固醇、可的松、叶绿素和利血平等一系列复杂有机分子和有机配体配合物，荣获诺贝尔化学奖。他获奖后仍孜孜不倦进行合成工作，合成了维生素 B₁₂ (见图 1) 和提出了分子轨道对称守恒原理，他是当之无愧的有机合成大师，可惜在 1979 年 7



维生素 B₁₂ (R=CN)

图 1 维生素 B₁₂

月 8 日 , 年仅 62 岁就离开了人世 , 是有机化学界的重大损失。

英国的威尔金森 (G. Wilkinson) 和德国的费歇尔 (E.O. Fischer) 合成了过渡金属二茂夹心式化合物 , 确定了这种特殊结构 , 对金属有机化学和配位化学的发展起了重大推进作用 , 荣获 1973 年诺贝尔化学奖。至今茂金属催化的高分子聚合反应仍为前沿热点研究领域。

1979 年美国的布朗 (H.C. Brown) 和德国的维蒂希 (G. Wittig) 因分别发展了硼有机化合物和发明 Wittig 反应而共同获得诺贝尔化学奖。

1984 年美国的梅里菲尔德 (R.B. Merrifield) 因发明了固相多肽合成法对有机合成方法学起了巨大的推动作用 , 从而获诺贝尔化学奖。

1990年美国哈佛大学的柯里（E.J.Corey）在大量的有机合成（如长叶烯、前列腺素等近 100 个天然产物的全合成）工作中总结和提出了“逆合成分析法”，即确定如何将要合成的目标分子按可再结合的原则在分子的适当的键部位进行切割，而成为较小的起始反应原料分子，然后再将这些原料分子按一定顺序和反应结合起来，包括分子的立体结构，从而得到目标化合物。逆合成分析是确定合成路线的关键，它直接影响到整个合成路线的策略。柯里的贡献是促进了有机合成化学的快速发展。他因此荣获诺贝尔化学奖。

综上所述，从 10 届诺贝尔化学奖获得者的成就来看，有机合成—金属有机—催化是紧密地联系在一起。现代有机合成化学是经过 20 世纪近 100 年的努力研究、探索、累积才发展到今天可以合成像海葵毒素（polytoxin）这样复杂的有机分子（具有 64 个手性中心和 7 个骨架内双键的分子，存在有 $2^{71} \cong 2 \times 10^{21}$ 个异构体，见图 2）。当然科学不断在发展，有机合成化学还没有到达十全十美的境界，新反应、新

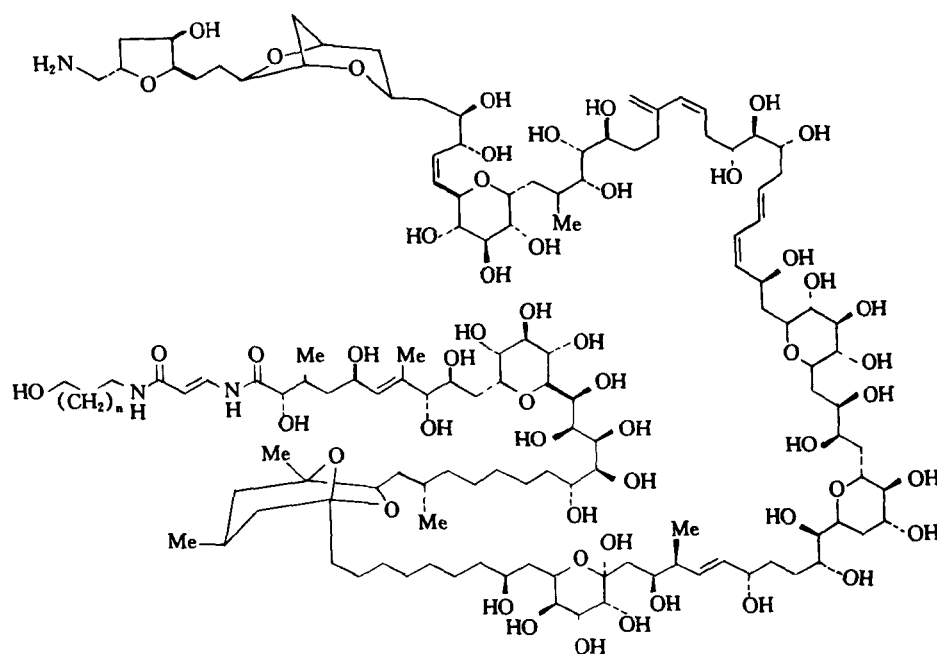


图 2 海葵毒素

试剂、新方法还在不断发现和创造，另一方面新的功能分子尚有待人类不断努力去创造。

4. 高分子科学和材料

20 世纪的人类社会文明的标志之一是合成材料的出现。高分子化学也是从事制造和研究分子的科学，但制造和研究的是分子量成千上万甚至上百万的大分子或称高分子化合物。由于高分子长链结构的发现，才促进了高分子化学和高分子物理的发展。在这一领域有两届诺贝尔化学奖（H.Staudinger 和 P.J.Flory），另外 Ziegler-Natta 催化剂虽然就其本质来讲属于金属有机化学，但他们研究的是高分子化合物，发展高分子的定向聚合方法，所以也可以讲这届诺贝尔化学奖与高分子科学领域有关。

1920 年德国施陶丁格（H.Staudinger）提出了高分子这个概念，创立了高分子链型学说，认为原子按正常价键结合几乎可以构成任何长度的链状分子。后又建立了高分子稀溶液的粘度与它们分子量之间的定量关系，据此可以测定高分子的分子量。Staudinger 的聚合物分子结构学说长期不被当时的学术界所认识和接受，但随着塑料、纤维、橡胶三大合成材料的发展和工业生产，他在高分子化学领域的发现才被承认，33 年后的 1953 年他获得了诺贝尔化学奖。

1953 年德国的 Ziegler 成功地在常温常压下将乙烯聚合成聚乙烯。他用的催化体系是 $\text{C}_2\text{H}_5)_3\text{AlTiCl}_4$ 。这种金属有机化合物催化烯烃的聚合反应导致了一种新的聚合方法——配位聚合反应。它把乙烯分子规整地排列而聚合，阻止和减少了支链的产生，因此低压聚乙烯的耐热性能显著提高。1955 年意大利的 Natta 将 Ziegler 催化剂改进为 $\alpha\text{-TiCl}_3$ 和烷基铝体系，并实现了丙烯的定向聚合，得到了高产率、高结晶度的全同构型的聚丙烯，能耐 150℃ 温度。这种配位聚合反应不仅能控制构型，而且还能控制分子量大小和分布，使合成方法-聚合物结构-性能三者联系起来，成为高分子化学中的一项具有里程碑作用的突破性工作。他们二人共同获得 1963 年诺贝尔化学奖。之后这种配位聚合又发展到合成天然橡胶（顺式聚异戊二烯）、聚丁

二烯橡胶、聚酰胺等等一系列高聚物，成为高分子合成的一种重要方法。

1936 年弗洛里（Flory）在研究缩聚反应时提出了缩聚反应中所有功能团都具有相同活性的基本原理，并根据缩聚反应动力学研究建立了分子量与反应程度之间的定量关系公式。之后，他又从事聚合物性质的研究，用统计力学的方法研究聚合物分子结构、链长、大小与性质之间的关联，获得了表达链长分布的表达式，发展了非线性聚合物的理论。由于 Flory 在研究高分子性质方面的卓越成就为发展高分子理论作出了重大贡献，荣获了 1974 年诺贝尔化学奖。

当然，在分子科学领域还有不少有成就的科学家，如美国杜邦公司的 W.H. Carothers 曾在 1931 年合成了氯丁橡胶，1935 年研制成功尼龙-66。可惜他过早地在 1937 年去世，享年仅 41 岁。Flory 就是他当年的助手。20 世纪所发明和生产的三大合成材料尼龙、橡胶、合成纤维应是化学中具有突破性的成就。

5. 化学动力学与分子反应动态学

研究化学反应是如何进行的，揭示化学反应的历程和研究物质的结构与其反应能力之间的关系，是控制化学反应过程的需要。在这一领域相继获得过 3 次诺贝尔化学奖。

1956 年由前苏联化学家谢苗诺夫（N. Semenov）和英国的欣歇尔伍德（S. Hinchelwood）在化学反应机理、反应速度和链式反应方面的开创性研究而获诺贝尔化学奖。Semenov 发展了链式反应理论，早在 1926 年他首先用磷蒸气的氧化实验证明了热化学反应是链式反应过程，从而将链反应概念由光化学反应扩展到热化学反应领域。而 Hinchelwood 在研究氢气和氧气混合生成水的反应时，发现当氢和氧的混合气体压力小时不发生反应，只有达到一定临界压力时才能反应，超过临界压力时反应迅速进行，直到爆炸。这是按链式反应机理进行的表现。因气体压力小时，分子间碰撞机率小，而活化粒子碰到容器内壁而失去活化能的机率很大，难于进行链式反应，所以反应进行很慢；当气体压力高于临界压力时，活化粒子大量形成并成倍增

加，有效碰撞增加，使反应速率激增而引发链式反应。这揭示了链式反应在自然界的存在，并将为在工业的各个领域的应用开创了新局面。

快速反应动力学研究的目的在于研究化学反应的速率和机理。影响化学反应速率的因素较多，如分子碰撞、反应中间产物的活性、反应过渡态的模式，能量传递和分布等。而在实验中捕获和检测反应过程各种不同的中间体及其能态是研究反应动力学的关键问题。德国化学家艾根（M.Eigen）提出了弛豫法研究快速的化学反应。他利用电脉冲，改变电场、温度、压力等因素，使一个处于平衡的溶液经瞬间破坏平衡后又迅速达到新的平衡来研究发生在千分之一秒内的化学反应。英国化学家波特和诺里升（G.Porter 和 R.G.W.Norrish）提出和发展了闪光光解法新技术，用强光脉冲，引发气体发生光化学反应，并记录和推测反应所产生的自由基和激发态分子。这种方法可用于研究十亿分之一秒内发生的化学反应，为研究快速反应动力学作出了重大贡献。他们三人共同荣获 1967 年诺贝尔化学奖。

分子反应动态学，亦称态-态化学，从微观角度来认识化学反应，着重研究反应分子所处的微观状态，两种物质能否发生化学反应，反应速率的快慢，以及反应后产生什么化合物等，均要研究反应物分子之间的态能否适当匹配，因此化学反应的实质是反应物的原子、分子之间的“态-态反应”。也就是从微观层次出发，深入到原子、分子的结构和内部运动、分子间相互作用和碰撞过程来研究化学反应的速率和机理。研究分子反应动态学最基本的工具是交叉分子束技术。其特征是在单次碰撞的条件下来研究单个分子间发生的化学反应，并测量反应产物的角分布、速度分布来取得反应动态学的信息。李远哲和赫希巴赫（D.R.Herschbach）首先研制成功能获得各种态信息的交叉分子束实验装置，研究和发表了 $F + H_2$ 反应动力学的结果，精确测定了反应产物的角分布、能量分布及其与反应物能量的关系，表明了过去用经典方法计算反应途径的局限性和不可靠性。如此详细的研究化学反应过程，对化学反应的基本原理作出了重要突破，被称为分子反应动力学发展中的里程碑。李远哲、Herschbach 和加拿大的波拉

尼 (J.C.Polany) 一起荣获 1986 年诺贝尔化学奖。1999 年 Zewail 因用飞秒光谱研究过渡态的成就获诺贝尔化学奖。

以上是化学基础研究在 20 世纪五个方面的重大突破。当然每位诺贝尔奖得主都有重大的贡献。下面把 1901 年~1999 年各届诺贝尔化学奖的获奖情况汇集在表 1 中供大家参考。

表 1 历届诺贝尔化学奖获奖简况

得奖年份	获奖者	国籍	获奖时年龄(岁)	获奖成就
1999	A.H.Zewail	美国	53	飞秒激光技术研究超快化学反应过程和过渡态
1998	W.Kohn	美国	75	发展了电子密度泛函理论
	J.A.Pople	英国	73	发展了量子化学计算方法
1997	J.Skou	丹麦	79	发现了维持细胞中钠离子和钾离子浓度平衡的酶,并阐明其作用机理
	P.Boyer	美国	79	发现了能量分子三磷酸腺苷的形成过程
	J.Walker	英国	56	
1996	R.F.Curl	美国	58	发现 ⁶⁰ C
	R.E.Smalley	美国	53	
	H.W.Kroto	英国	57	
1995	M.Molina	墨西哥	52	研究大气环境化学,特别在臭氧的形成和分解研究方面作出的贡献
	S.Rowland	美国	68	
	P.Crutzen	荷兰	62	
1994	G.A.Olah	美国	67	碳正离子化学的研究
1993	M.Smith	加拿大	61	寡聚核苷酸定点诱变法对基因工程的贡献
	K.B.Mullis	美国	48	多聚酶链式反应技术对基因工程的贡献
1992	R.A.Marcus	美国	69	电子转移反应理论
1991	R.R.Ernst	瑞士	58	高分辨核磁共振谱法的发展
1990	E.J.Corey	美国	62	有机合成的逆合成分析法
1989	T.Cech	美国	41	Ribozyme(核糖核酸酶)的发现
	S.Altman	美国	50	