

· 战略研讨 ·

量子力学的发现是化学的一重大飞跃

吴征铠

(中国核工业总公司, 北京 100822)

[关键词] 量子力学, 分子, 激光

化学是建立在原子分子学说上的一种实验科学。研究分子的行为和分子间的反应, 对分子的认识和改造是化学科学的首要任务。在上世纪初, 化学家从分析物质开始, 定出物质组分, 以求出所含的原子种类、数目和化学式。后来有机化学出现了同分异构体, 化学家才知道分子的结构对认识分子的重要性。一百多年来发现了百万多个有机化合物。另一方面, 化学家从研究分子的化学性质出发应用各种物理方法去改变分子形成了新的物理化学学科, 也得出许多经验性的法则。但总的说来化学仍然是一种实验的科学。他缺少一个完整的理论, 他不能说明为什么原子能结合成为分子, 和化学键的成因。他的规律是经验性的。

在上世纪末本世纪初, 电子和原子核被发现, 化学家开始将电子和化学键联系起来, 认为化学键是由一对电子所组成。但是这并未说明化学键的本质, 到了 20 年代, 量子力学出现了, 才开始了一场革命。量子力学不是由实验直接得到的, 他是为了解释物质的粒子性和波动性的矛盾而提出的。他的正确与否要看他能否处理问题和得到正确结果。在计算氢分子的光谱时他非常正确地算出里德堡常数。并且用波函数来说明电子的二象性, 电子不再是一个粒子而要用波函数来说明他, 在某地方找到电子的几率等于在那里的波函数值的平方。通常称为电子云。后来, 用近似法计算氢分子的能级, 得到和实验非常符合的结果, 而且在两个氢原子中间电子云的密度最大, 说明化学家原来想象的双电子键是有一定的根据的。

量子力学的发现使化学的许多基本概念起了变化:

首先, 化学科学有了可以为自己服务的理论, 能在许多方面用理论方法解决问题。并且帮实验工作者去开展新的工作。不但解释现象而且指导新的实验。

其次, 量子力学所用的方法是从解方程式出发求出波函数和各能级的能量的。在解方程式时, 一般都需要很复杂的数学, 并且有时不能得到解, 即使是近似的解。因此必须用各种假设和特殊的数学方法, 但是即使如此有时也还得不到解。所以量子力学还不能替代实验, 也永远不能替代, 即使计算机有更大的发展也不能替代。虽然如此, 但随着计算技术的快速进步以及在认识分子上的深入, 量子化学计算在现在能做极多的工作, 因此现在的化学家不但不能不熟悉量子化学, 而且还要用好他。

· 中国科学院院士 ·

本文于 1996 年 12 月 25 日收到。

第三，量子力学的出现使分子的概念起了变化，量子力学处理的系统是粒子，在分子中是电子和原子核，他不管它们的数目，因此可以是仅有一个核的氢原子核和一个电子，也可以是几个原子和同等数目电荷的电子所组成的分子，也可以是一块金属，一个高分子，如一个大钻石分子，还可以是带电荷的离子，可谓无所不包。并且他还包括不稳定的分子。这和过去的分子的含义有很大的不同。他使人们敢去研究许多新的领域，例如过渡态等。

第四，他使各科学间的关系发生变化。现在化学和物理间的差别（核物理除外）几乎都不见了，还有所谓分子生物学实际上也是分子科学。因为它们都服从同一的规律即量子力学的规律，虽然复杂程度不同。学科分类虽然是方法问题，但在教育，特别是高等教育中培养学生的观点是非常重要的。在大学中如何分系，如何设置课程等问题，是和学科分类以及未来的发展有重要的关系的。学科的范围不清，会使学生的视野狭窄，对他们的发展不利。

第五，自从本世纪60年代发现激光以来，分子科学有了特快的进步。激光是一种非常强的单色而相干的光，它可以被调制极短（现已达飞秒级）的脉冲。有了这些特性，可以研究非常快的过程，非常短寿命的分子，以及化学反应的微观变化和动态学。这一方面发展得非常快。研究这些问题需要量子力学的帮助。二者互相推动。量子力学很快发展。激光本来就是量子力学通过光谱研究的成果，而他的发展和改进则更要依靠量子力学的理论。

第六，量子力学本身的发展，一方面硬件，另一方面是软件。这两方面都有他的发展，从头计算已经能计算相当复杂的分子，并和实验能够符合得相当好，特别是在预测分子的能态和光谱等方面均获得了极大的成功。现在这方面的发展非常快，学术刊物中用量子力学理论的论文已经很多。不用他的论文越来越少。

第七，对分子结构的看法也和过去不同，以前的化学键包括离子键、共价键等，意义本来就模糊，量子力学把分子看成一个整体，他的原子核虽然有较固定的位置。但电子云则无所不在，虽然，在原来认为是化学键的地方他的密度较大，但在原来认为没有电子的地方却也有电子云存在，这对复杂体系更为重要，有电子云的地方就有相互作用，特别是生物大分子中分子内的相互作用更为重要，这是因为这种大分子中由碳分子形成的链是没有刚性的，这和小分子有明显的不同。在大分子中，由于相互作用的数量级相差不大，碳链可以弯曲而使得原来并不相邻的原子和原子团间发生一定的相互作用。这种相互作用本身并不一定很大，但他们能起集体的作用，他们一般是可逆的，但有时也可以不可逆。因此，研究大分子极为复杂，现在，还处在发展初期。

可以相信，在下一世纪，分子科学将有大的发展。笔者认为，在下列几方面可能会有突破和发展：

1. 高温超导。由于现在已经有几种不同类型的分子具有超导性，他们是金属和合金、氧化物、碳60的金属化合物，以及有机物等，这些分子间还看不出有何共同点。但可以相信，从量子力学的观点出发，会找出来的。

2. 纳米材料特别是富氏管以及其他簇合物的的发展可能开辟材料科学的新方向。

3. 量子力学本身在方法上，随着应用日广，累集起来的经验也日多。起先，仅注意价电子以及他们间的相互作用，后来渐渐扩大到许多其他因素，方法日益增多。预计，下世纪将有更大的进展。

4. 离子的研究现在还不太多，但这一方面可能也是一个方向，而且有很大的可能。

5. 如何控制化学反应的问题,已有很多可能,但都尚在开始阶段。也可能有些新的发展。
6. 虽然如此,合成作为化学的一个重要方面,也会受理论指导和各种新的物理方法的影响而得到新的和快的发展。

总之,下世纪的分子科学的前景将非常光明,无论在理论上和应用上都将有惊人的进步,而这一进步正是由于有了量子力学。

QUANTUM MECHANICS CAUSED GREAT LEAP IN CHEMISTRY

Wu Zhengkai

(Chinese National Nuclear Corporation, Beijing 100822)

Key words quantuar mechanic, molecule, laser

· 信 息 ·

“GM 中国科技成就奖” 揭晓

为促进中国汽车工业多出成果、多出人才,扩大美国通用汽车公司(GM)与中国科技界的联系,由国家自然科学基金委员会和GM共同设立的“GM中国科技成就奖”,经过有关部门共同推举,评选委员会评定,和GM与国家自然科学基金委员会核准,我国郑南宁等15名中青年科学家和工程技术人员获得奖励。

这些获奖人员来自全国各地的科研机构 and 高等院校,他们的平均年龄在40岁左右,绝大多数拥有高级专业技术职务,不少人是国内培养的博士或硕士,其中许多人获得多项国家与部门有关科技成果奖和国家专利。

颁奖典礼于1996年11月25日在人民大会堂隆重举行。国务委员、国家科技领导小组副组长、国家科委主任宋健,全国政协副主席、中国工程院院长朱光亚院士,国家自然科学基金委员会主任张存浩院士,GM副总裁、GM中国公司总裁施雷思先生和GM副总裁杨雪兰女士,中国科学院常务副院长路甬祥院士,国家自然科学基金委员会的领导同志以及有关部委高校、研究院所的评审专家共150余人出席了颁奖典礼。

国家自然科学基金委员会主任张存浩在会上致词,对GM出资支持并与中方合作设立“GM中国科技成就奖”表示赞赏,他说,中国与美国都是世界上重要的国家,双方经济与科技具有很大的互补性,中美科技合作具有广阔的发展前景。“GM中国科技成就奖”的设立,是中国国家自然科学基金委员会与美国通用汽车公司开展合作的良好开端,希望以此为契机,使双方的科技合作不断发展扩大。他还说,这一奖项的设立,不仅有利于加强中美双方的科技合作与交流,更好地促进解决有关汽车材料、新能源、计算机工程、电子系统等领域中的科学技术问题,而且有利于在科技人员中提倡科技创新和创业奉献的精神,推进我国科技界精神文明的发展。