

·学科进展与展望·

## 21 世纪的化学是研究泛分子的科学

徐光宪\*

(北京大学化学学院稀土材料化学及应用国家重点实验室,北京 100871)

**[摘要]** 本文提出 21 世纪化学的定义,内涵,六大发展趋势,四大难题和 11 个突破口,以及 20 世纪化学的一些被忽视的重要盲点。

**[关键词]** 21 世纪的化学,定义,发展趋势,难题,突破口,盲点

我的专业是化学,我从学化学,教化学,到研究化学已有几十年了,可是现在我却有点搞不清楚化学的定义了。我深深感到科学的发展太快了,需要对本门科学重新认识,重新定位。这是我进入 21 世纪首先要关注的问题。

### 1 一门科学的定义至少有三个属性:

#### 1.1 整体和局部性

科学是一个复杂的知识体系,好比一块蛋糕。为了便于研究,要把它切成大、中、小块。首先切成自然科学、技术科学和社会科学三大块。在自然科学中,又有许多切法。一种传统的切法是分成数理化天地生等一级学科。近来又有切成物质科学、生命科学、地球科学、信息科学、材料科学、能源科学、生态环境科学、纳米科学、认知科学,系统科学等的分类法。化学是从科学整体中分割开来的一个局部,它和整体必然有千丝万缕的联系,所以学科之间的交叉和相互渗透是必然的趋势。这是它的第一属性。

#### 1.2 发展性

化学的内涵随时代前进而改变。在 19 世纪,恩格斯认为化学是原子的科学(参见《自然辩证法》),因为化学是研究化学变化,即改变原子的组合和排布,而原子本身不变的科学。到了 20 世纪,人们认为化学是研究分子的科学,因为在这 100 年中,在《美国化学文摘》上登录的天然和人工合成的分子和化合物的数目已从 1900 年的 55 万种,增加到 1999

年年底的 2 340 万种。没有别的科学能象化学那样制造出如此众多的新分子、新物质。现在世纪之交,我们大家深深地感受到化学的研究对象和研究内容大大扩充了,研究方法大大深化和延伸了,所以 21 世纪的化学是研究泛分子的科学。

#### 1.3 定义的多维性

一门科学的定义,按照从简单到详细的程度可以分为:(1)一维定义或 X-定义,X 是指研究的对象。(2)二维定义或 XY-定义,Y 是指研究的内容。(3)三维定义或 XYZ-定义,Z 是指研究方法。(4)四维定义或 WXYZ 定义,W 是指研究的目的。(5)多维定义或全息定义。一门科学的全息定义还要说明它的发展趋势、与其他科学群的交叉、世纪难题和突破口等等。这样才能对这门科学有全面的了解。下面以化学为例加以说明。

## 2 21 世纪化学的定义和内涵

### 2.1 化学的一维定义

21 世纪的化学是研究泛分子的科学。泛分子的名词是仿照泛太平洋会议(Pan Pacific Conference),泛美航空公司(Pan American Air Line)等提出的。泛分子是泛指 21 世纪化学的研究对象。它可以分为以下 10 个层次:

(1)原子层次——例如近来受到重视的碱金属原子的 Bose-Einstein 凝聚态。

(2)分子片层次——分子片是指组成分子的碎

\* 中国科学院院士。  
国家自然科学基金资助项目。  
本文于 2002 年 1 月 15 日收到。

片,例如<sup>[1,2]</sup>:一价分子片:CH<sub>3</sub>, OH, Mn(CO)<sub>5</sub>, Co(CO)<sub>4</sub>,二价分子片:CH<sub>2</sub>, NH, Fe(CO)<sub>4</sub>, Ru(PR<sub>3</sub>)<sub>4</sub>,三价分子片:CH, Co(CO)<sub>3</sub>, NiCp等。

(3)结构单元层次——例如芳香化合物的母核,高聚物的单体,蛋白质的氨基酸,DNA的A, C, G, T.高级结构单元,如蛋白质的 $\alpha$ -helix,  $\beta$ -sheet等。

(4)分子层次——研究分子层次的问题有如分子周期律,单分子光谱,单分子监测和控制,分子的激发态,吸附态等。

(5)超分子层次——超分子是二个分子通过非共价键的分子间作用力结合起来的物质微粒。例如环糊精[ $\gamma$ -CD]是一个分子,形似花盆,它的尺度略大于C<sub>60</sub>的直径,可以把C<sub>60</sub>包进去,生成1:1和2:1的超分子。艾滋病毒HIV是一个生物大分子,其活性部位,形似环糊精,大小与C<sub>60</sub>十分接近,它们可以形成超分子。因此,C<sub>60</sub>可以抑制艾滋病毒HIV。环糊精分子还可作为主体,把其它小分子包在里面,又可作为客体,插入Zr(HPO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)晶体的结构层之间,组装成复杂的超分子体系。

(6)高分子层次。

(7)生物分子(biomolecules)层次。

(8)纳米分子和纳米聚集体层次——例如碳纳米管、纳米金属、微乳、胶束、反胶束、气溶胶、纳米微孔结构、纳米厚度的膜、固体表面的有序膜、单分子分散膜等。

(9)原子和分子的宏观聚集体层次——固体、液体、气体、等离子体、溶液、熔融体、胶体、表面、界面等。

(10)复杂分子体系及其组装体的层次:(i)复合和杂化分子材料。(ii)分子器件,例如在金丝尖端装上经过巯基化修饰的单层碳纳米管(SWCNT),可以作为STM的针尖。又如分子导线、分子开关、分子探针、分子芯片、分子晶体管等。(iii)分子机器,如分子马达在UV光下,能通过4种同分异构体进行旋转,又如分子计算机等。(iv)宏观组装器件如燃料电池,太阳能电池等。

## 2.2 化学的二维定义

化学是研究X对象的Y内容的科学。具体地说,就是:化学是研究原子、分子片、结构单元、分子、高分子、原子分子团簇、原子分子的激发态、过度态、吸附态、超分子、生物大分子、分子和原子的各种不同维数、不同尺度和不同复杂程度的聚集态和组装态,直到分子材料、分子器件和分子机器的合成和反应,制备、剪裁和组装,分离和分析,结构和构象,粒

度和形貌,物理和化学性能,生理和生物活性及其运输和调控的作用机制,以及上述各方面的规律,相互关系和应用的自然科学。

## 2.3 化学的三维定义

化学是用Z方法研究X对象的Y内容的科学。化学的研究方法和它的研究对象及研究内容一样,也是随时代的前进而发展的。在19世纪,化学主要是实验的科学,它的研究方法主要是实验方法。到了20世纪下半叶,随着量子化学在化学中的应用,化学不再是纯粹的实验科学了,它的研究方法有实验和理论。现在21世纪又将增加第三种方法,即计算机模拟的方法。

## 2.4 化学的四维定义

化学是用Z方法研究X对象的Y内容以达到W目的的科学。化学的目的和其它科学技术一样是认识世界和改造世界,但现在应该增加一个“保护世界”-化学和化学工业在保护世界而不是破坏地球这一伟大任务中要发挥特别重要的作用。造成污染的传统化学向绿色化学的转变是必然的趋势。21世纪的化工企业的信条是五个“为了”和五个“关心”(Five“care”and five“for”):(1)为了社会而关心环保(Environmental care for the society);(2)为了职工而关心安全、健康和福利(Safety-care for the employee);(3)为了顾客而关心质量、声誉和商标(Quality-care for the customers);(4)为了发展而关心创新(Innovation-care for the development);(5)为了股东而关心效益(Profit-care for the stock-holders)

## 3 21世纪化学研究的六大趋势

### 3.1 更加重视国家目标,更加重视不同学科之间的交叉和融合

在世纪之交,中国和世界各国政府都更加重视国家目标,在加强基础研究的同时,要求化学更多地来改造世界,更多地渗透到与下述10个门类的科学的交叉和融合:(1)数理科学(2)生命科学(3)材料科学(4)能源科学(5)地球和生态环境科学(6)信息科学(7)纳米科学技术(8)工程技术科学(9)系统科学(10)哲学和社会科学。这是化学发展成为研究泛分子的大化学的根本原因。所以培养21世纪的化学家要有宽广的知识面,多学科的基础。

### 3.2 理论和实验更加密切结合

1998年诺贝尔化学奖授予W. Kohn和J. A. Pople。颁奖公告说:“量子化学已经发展成为广大化学家所使用的工具,将化学带入一个新时代,在这

个新时代里实验和理论能够共同协力探讨分子体系的性质。化学不再是纯粹的实验科学了”。所以在21世纪,理论和计算方法的应用将大大加强,理论和实验更加密切结合。

### 3.3 在研究方法和手段上,更加重视尺度效应

20世纪的化学已重视宏观和微观的结合,21世纪将更加重视介乎两者之间的纳米尺度(1—100 nm),并注意到从小的原子、分子组装成大的纳米分子,以至微型分子机器。

### 3.4 合成化学的新方法层出不穷

合成化学始终是化学的根本任务,21世纪的合成化学将从化合物的经典合成方法扩展到包含组装等在内的广义合成,目的在于得到能实际应用的分子器件和组装体。

合成方法的十化:芯片化,组合化,模板化,定向化,设计化,基因工程化,自组装化,手性化,原子经济化,绿色化。

化学实验室的微型化和超微型化:节能、节材料、节时间、减少污染。

从单个化合物的合成、分离、分析及性能测试的手工操作方法,发展到成千上万个化合物的同时合成,在未分离的条件下,进行性能测试,从而筛选出我们需要的化合物(例如药物)的组合化学方法。

### 3.5 造成污染的传统化学向绿色化学的转变是必然的趋势<sup>[3,4]</sup>

21世纪的化工企业的信条是五个“为了”和五个“关心”。

### 3.6 分析化学已发展成为分析科学<sup>[5,6]</sup>

分析化学已吸收了大量物理方法、生物学方法、电子学和信息科学的方法,发展成为分析科学,应用范围也大大拓宽了。

分析方法的十化:微型化芯片化、仿生化、在线化、实时化(real time)、原位化(in situ),在体化(in vivo)、智能化信息化,高灵敏化,高选择性化,单原子化和单分子化。

单分子光谱、单分子检测,搬运和调控的技术受到重视。

分离和分析方法的连用,合成和分离方法的连用,合成、分离和分析方法的三连用。

## 4 21世纪化学的四大难题(中长期)

科学研究始于提出问题。科学问题的提出、确认和解决是科学发展的动力。20世纪最伟大的数学家 Hilbert 在1900年提出23个数学难题。每一个

难题的解决,就诞生一位世界著名的数学家。现在2000年世界数学家协会提出七大数学难题,筹集了700万美元,悬赏100万美元给每一个难题的解决者。

21世纪物理学的难题:(1)四个作用力场的统一问题,相对论和量子力学的统一问题。(2)对称性破缺问题。(3)占宇宙总质量90%的暗物质是什么的问题。(4)黑洞和类星体问题。(5)夸克禁闭问题等。

21世纪生物学的重大难题是后基因组学、蛋白质组学、脑科学、生命起源等。

2000年中国科学院化学部和国家自然科学基金委员会化学部组织编写了《展望21世纪的化学》<sup>[7]</sup>,对20世纪化学的成就作了很好的总结,对21世纪近期(10—20年)化学的发展提出很好的展望。最近MIT化学系主任S. Lippard教授在广泛征求美国化学同行的基础上提出基础化学的22个新前沿领域<sup>[8]</sup>。

由此可见,中外化学家都在展望21世纪化学的发展,但似乎还没有提出化学应在21世纪解决的重大难题。这样与物理学和生物学相比,就会显得化学没有什么伟大的目标了。这是近年来在世界范围内出现的淡化化学的思潮的主观原因之一。那么化学果真提不出重大难题吗?下面不揣冒昧,试对这一问题,作一初步探讨,希望大家指正。如能抛砖引玉,引起大家的讨论,然后由中国化学会组织化学界来共同讨论21世纪化学的难题,这对21世纪化学的发展十分有利。

### 4.1 化学的第一根本规律——化学反应理论和定律

化学是研究化学变化的科学,所以化学反应理论和定律是化学的第一根本规律。化学和化学变化的本质是若干原子核和电子之间的电磁相互作用,与强、弱、引力相互作用的关系比较小,暂时可以不考虑。这种相互作用的根本规律是量子力学。薛定鄂第一方程可以解决定态分子结构、化学键理论和分子间的相互作用问题。薛定鄂第二方程是包含时间的方程,可以解决原子或分子从某一定态到另一定态的跃迁几率问题,从而建立光谱跃迁理论。

但量子力学没有给出严格的化学反应速率的基本方程。H. Eyring的绝对反应速度理论是建筑在过渡态、活化能和统计力学基础上的半经验理论。过渡态、活化能和势能面等都是根据不含时间的薛定鄂第一方程来计算的。所谓反应途径是按照势能面

的最低点来描绘的。这一理论和提出的新概念是非常有用的,但却是不彻底的半经验理论。

19世纪C.M.古尔德贝格和P.瓦格提出的质量作用定律,是最重要的化学定律之一,但它是经验的、宏观的定律。20世纪在宏观化学动力学与微观分子反应动态学方面,有很大发展。例如Semenov发展了链式反应理论,M.Eigen提出了驰豫法研究快速的化学反应,李远哲和Herschbach用交叉分子束研究态反应等。但离开彻底了解化学反应的规律,还有很大的距离。所以严格的彻底的微观的化学理论,包括决定某两个或几个分子之间能否发生化学反应?能否生成预期的分子?需要什么催化剂才能在温和条件下进行反应?如何在理论指导下控制化学反应?如何计算化学反应的速率?如何确定化学反应的途径等,是21世纪化学应该解决的第一个难题。

在化学反应理论中特别重要,应予首先研究的课题有:(1)充分了解若干个重要的典型的化学反应的机理,以便设计最好的催化剂,实现在最温和的条件下进行反应,控制反应的方向和手性,发现新的反应类型,新的反应试剂。(2)在搞清楚光合作用和生物固氮机理的基础上,设计催化剂和反应途径,以便打断 $\text{CO}_2$ ,  $\text{N}_2$ 等稳定分子中的惰性化学键。(3)研究其它各种酶催化反应的机理。酶对化学反应的加速可达100亿倍,专一性达100%。如何模拟天然酶,制造人工催化剂,是化学家面临的重大难题。(4)充分了解分子的电子、振动、转动能级,用特定频率的光脉冲来打断选定的化学键——选键化学的理论和实验技术。

#### 4.2 化学的第二根本规律——结构和性能的定量关系

这里“结构”和“性能”是广义的,前者包含构型、构象、手性、粒度、形状和形貌等,后者包含物理、化学和功能性质以及生物和生理活性等。虽然W.Kohn从理论上证明一个分子的电子云密度可以决定它的所有性质,但实际计算困难很多,现在对结构和性能的定量关系的了解,还远远不够。所以这是21世纪化学的第二个重大难题。

要优先研究的课题有:(1)分子和分子间的非共价键的相互作用的本质和规律。(2)超分子结构的类型,生成和调控的规律。(3)给体——受体作用原理。(4)进一步完善原子价和化学键理论,特别是无机化学中的共价问题。(5)生物大分子的一级结构如何决定高级结构?高级结构又如何决定生物和生

理活性?(6)分子自由基的稳定性和结构的关系。(7)掺杂晶体的结构和性能的关系。(8)各种维数的空腔结构和复杂分子体系的构筑原理和规律。(9)如何设计合成具有人们期望的某种性能的材料?(10)如何使宏观材料达到微观化学键的强度?例如“金属胡须”的抗拉强度比通常的金属丝大一个量级,但比金属—金属键的强度小得多。又如目前高分子纤维达到的强度要比高分子中的共价键的强度小两个数量级。这就向人们提出如何挑战极限的大难题。(11)镧系理论——4f电子的能级比sp区和d区元素的能级多一个量级,所以稀土元素有十分丰富的光、电、磁、声等功能性质。稀土化合物的配位数可在3—12的宽广范围内变化,所以稀土元素有机化合物是很好的催化剂。稀土是21世纪的战略元素。研究镧系元素的结构和性能关系具有十分重要的意义。以上各方面是化学的第二根本问题,其迫切性可能比第一问题更大,因为它是解决分子设计问题的关键。

#### 4.3 纳米尺度的基本规律

现在中美日等国都把纳米科学技术定为优先发展的国家目标。在复杂性科学和物质多样性研究中,尺度效应至关重要。尺度的不同,常常引起主要相互作用力的不同,导致物质性能及其运动规律和原理的质的区别。纳米尺度体系的热力学性质,包括相变和“集体现象(Collective phenomena)”如铁磁性,铁电性,超导性和熔点等与粒子尺度有重要的关系。当尺度在十分之几到10纳米的量级,正处于量子尺度和经典尺度的模糊边界(fuzzy boundary)中,此时热运动的涨落和布朗运动将起重要的作用。例如金的熔点为 $1063^\circ\text{C}$ ,纳米金的融化温度却降至 $330^\circ\text{C}$ 。银的熔点为 $960.3^\circ\text{C}$ ,而纳米银为 $100^\circ\text{C}$ 。当代信息技术的发展,推动了纳米尺度磁性(Nanoscale magnetism)的研究。由几十个到几百个原子组成的分子磁体表示出许多特性,如 tunneling, quantum coherence, thermo-induced spin crossover transitions。纳米粒子的比表面很大,由此引起性质的不同。例如纳米铂黑催化剂可使乙烯催化反应的温度从 $600^\circ\text{C}$ 降至室温。又如电子或声子的特征散射长度,即平均自由途径在纳米量级。当纳米微粒的尺度小于此平均自由途径时,电流或热的传递方式就发生质的改变。所以纳米分子和材料的结构与性能关系的基本规律是21世纪的化学和物理需要解决的重大难题之一。

#### 4.4 活分子运动的基本规律

充分认识和彻底了解人类和生物体内活分子(living molecules)的运动规律,无疑是21世纪化学亟待解决的重大难题之一。例如:(1)配体小分子和受体生物大分子的相互作用,这是药物设计的基础(2)在地球元素的生态循环中,植物界做了两件伟大的事:其一,利用太阳能把很稳定的 $\text{CO}_2$ 和 $\text{H}_2\text{O}$ 分子的化学键打开,合成碳水化合物 $[\text{CH}_2\text{O}]_n$ ,并放出氧气 $\text{O}_2$ ,供人类和其它动物使用。在这个伟大的过程中,活分子催化剂叶绿素是怎样作用的?其二,豆科植物的根瘤菌能打开非常稳定的氮分子中的化学键,生成含氮小分子,再进一步合成蛋白质和核酸。我们必须把这两个过程的全部反应机理搞清楚,然后研究能否在化学工厂中,在温和的条件下,实现这两个伟大的催化反应。(3)搞清楚牛、羊等食草动物胃内酶分子如何把植物纤维分解为小分子的反应机理,为充分利用自然界丰富的植物纤维资源打下基础。(4)人类的大脑是用“泛分子”组装成的最精巧的计算机。如何彻底了解大脑的结构和功能将是21世纪的脑科学、生物学、化学、物理学、信息和认知科学等交叉学科共同来解决的难题。(5)了解活体内信息分子的运动规律和生理调控的化学机理。(6)了解从化学进化到手性和生命的起源。(7)如何实现从生物分子到分子生物(molecular life)的飞跃?如何跨越从化学进化到生物进化的鸿沟?(8)研究复杂、开放、非平衡的生命系统的热力学,耗散和混沌状态,分形现象等非线形科学问题。

由此可见,21世纪的化学是有伟大的目标和难题,需要我们去解决的。与物理学相比,物理的难题偏重于认识世界。研究物理学的难题,需要超高能加速器和航天飞机上的磁谱仪等大型科学工程为基础,是我国国力难以承受的。而21世纪化学的重大难题和突破口则偏重于改造世界和保护世界,有更现实的目标,不需要大型科学工程的支持,对化学的R&D投入,通常有较高的回报率。21世纪是生物学大发展的世纪,但现代生物学是建筑在分子水平上的生物学,所以对化学难题的研究和解决和解决生物学难题是互相促进的。如果淡化化学的重要性,减少化学的科学研究投入,在大学中吸引不到优秀的中学生来考化学专业,那么对国民经济和生命科学的发展都是十分不利的。

### 5 21世纪化学的11个突破口(10—20年)

#### 5.1 新的合成方法学

例如(1)组合化学。(2)手性合成。(3)分子反应器控制的合成。(4)自复制和自组装合成。(5)定向合成。(6)掌握零维笼状和杯状、一维通道、二维层间、三维网络空腔结构的合成方法,并通过化学、电场或磁场的作用,使囚禁在里面的客体分子被释放或取代出来。

#### 5.2 纳米化学、纳米材料和分子器件,纳米表面化学、高效纳米催化剂设计合成及应用。

#### 5.3 稀土化学特别是有我国知识产权的新型稀土功能材料<sup>[9]</sup>。

#### 5.4 能源科学中的化学问题

例如:(1)各种高效换能器(Transducer),特别是太阳能电池。(2)燃料电池(3)氢能利用问题(4)各种再生能源。

#### 5.5 生命和医药科学中的化学问题

例如:(1)把中国名医的处方和人体的生理病理状态作为两个复杂体系来研究它们之间的相互作用和药效。(2)用组合化学的方法来筛选特效中药,并使中药现代化。(3)药物设计、合成和开发应用。(4)生物材料(Biomaterials)和人工器官的合成。(5)配合物小分子作为Key和DNA大分子作为Lock的相互作用。(6)了解神经细胞和生理调控的化学机理(7)糖化学。

#### 5.6 生态环境科学中的化学问题

例如:(1)环境元素的循环。(2)有害化学物质的控制和治理。(3)以“原子经济”和“零排放”为目标的绿色化学和化工。(4)生态环境化学。

#### 5.7 信息科学中的化学问题

例如:(1)高效的光纤通信材料,特别是可使激光得到增益的稀土钇镱杂Si基1.54微米材料。(2)高效的光贮存材料。(3)分子芯片。(4)分子计算机。

#### 5.8 分析化学的十化

#### 5.9 化工化学复杂体系中的多层次、多尺度效应及其规律和方法学研究。

#### 5.10 理论化学和计算化学的基础及应用研究

#### 5.11 化学信息学

20世纪的化学积累了巨量的实验材料和信息,21世纪的化学信息学将建立各种化学信息库,然后分析信息的内涵,总结出规律,最大限度地挖掘、开发和应用信息宝库,使它们作为实验归纳法和理论演绎法的桥梁,推动化学和化工学科的发展,为国民经济服务。

## 6 20世纪化学的盲点

20世纪的化学得到前所未有的迅猛发展。但迅猛发展的化学正和急速向前推进的胜利部队一样,常常会在后方留下一些照顾不到的空白点,例如:

### 6.1 无机化学中共价概念被忽视

原子价是化学中最重要的概念之一,也是总结大量分子必须考虑的性质之一。但令人惊奇的是,迄今还没有一个大家公认的定义。原子价可分为共价、电价、氧化态(oxidation state)、配位数、超价(supervalence)等。关于共价现在大家采用的是鲍林提出的定义:一个原子的共价是指它在分子中和其它原子形成的共价键数。鲍林的定义在有机化学中非常成功,但在无机化学中遇到困难,例如如何决定CO、NO、N<sub>2</sub>O、NO<sub>2</sub>、HNO<sub>3</sub>、O<sub>3</sub>、BeCl<sub>2</sub>、Al<sub>2</sub>Cl<sub>6</sub>、Ni(CO)<sub>4</sub>、Cp<sub>2</sub>ZrCl<sub>2</sub>、Cr(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>)<sub>2</sub>等分子中的C、N、O、Be、Al、Ni、Zr、Cr的共价。在后面5个分子中,通常我们说Be是2价,Al是3价,Ni是0价,Zr是4价,Cr是0价。但这是指它们的氧化态。它们的共价等于多少?这个问题常常被忽略不提。为此我们提出共价键的新定义:一个原子的共价是指它在形成分子时,从其它原子接受的共享电子数。按照这个物理概念,给出量子化学定义进行量子化学计算,得到在上述分子中原子的共价:C=4,N=3,O=2,Be=6,Ni=8,Zr=12,Cr=12<sup>[10,11]</sup>。

关于配位数也没有明确的定义。例如F. A. Cotton<sup>[12]</sup>,认为Ti在Cp<sub>2</sub>TiCl<sub>2</sub>中的配位数=4<sup>[12]</sup>,即Cp提供的配位数是1。这样在Cr(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>)<sub>2</sub>, Cr(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>)(CO)<sub>3</sub>, Cr(CO)<sub>6</sub>三个分子中Cr的配位数分别等于2,4,6。我们建议把配位数定义为:中心原子周围的成键电子对数。这样在上述三个分子中Cr的配位数都等于6。在Cp<sub>2</sub>TiCl<sub>2</sub>中Ti的配位数等于8<sup>[13]</sup>。

### 6.2 化学文献和数据的积累非常迅速,但利用这一文献宝库来总结规律的工作相对滞后

从科学发展史看,科学数据的大量积累,往往导致重大科学规律的发现。如17世纪的天文学积累了几百颗天体运动的数据,对它们的分析导致开普勒提出天体运动的三大定律,为牛顿建立他的经典力学体系奠定基础。19世纪60年代的化学积累了数十种元素和上万种化合物的数据,门捷列夫把这些元素按原子量的大小次序排列,发现它们的化合物的性质有周期性变化,因而在1869年提出元素周期律,为以后发现新元素和玻耳建立原子模型指明

了方向。20世纪30年代,积累了100多万种化合物的数据,结合量子化学的发展,导致鲍林提出共价、电价和氧化值的定义,以及(键、键、杂化轨道、电负性、共振结构等新概念,总结出化学键理论,发表《论化学键本质》这本经典著作,对20世纪化学的发展起了非常重要的作用。现在截止1999年12月31日,美国化学文摘登记的分子、化合物和物相的数目已超过2340万种,比鲍林总结化学键理论时扩大了10余倍,但全世界的化学家似乎还没有充分利用这一化学文选宝库来总结规律。这是世纪之交的难得机遇,不可交臂失之。

### 6.3 分子周期律

为了与数以千万计的分子打交道,我们建议在原子和分子之间引入分子片和结构单元两个层次。分子片这一名词是由霍夫曼(R. Hoffmann)在他的“等瓣性原理”中首先提到的。分子片M<sup>i</sup>是由一个中心原子A<sup>k</sup>与若干个配体L<sup>m</sup>组成,其中k和m分别为中心原子A的价电子数和配体的总价电子数。分子片M的价电子数j=k+m。分子片价数等于它的价轨道中的空位数。

分子结构类型的数字化表征。我们建议用N, B, σ, π四个数字来表征,N是它所含的分子片数,B是分子片之间的共价键数,其中含有σ个σ键和π个π键[在少数分子中还包含δ键和三中心二电子键等]。例如苯分子C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>的N, B, σ, π=6, 9, 6, 3。Dewar苯的N, B, σ, π=6, 9, 7, 2。Benzavalene的N, B, σ, π=6, 9, 8, 1。Prismane的N, B, σ, π=6, 9, 9, 0。如以N, B为坐标可以绘出分子的结构类型表。

以上举出化学在跨向21世纪时落在后面的一些盲点,而展现在它前面的亮点,如四大难题,11个突破口,则因研究对象、内容和方法的丰富多采,更是琳琅满目。希望有更多的青年学子来耕耘这片肥沃的土地。化学不是夕阳科学,决不会在物理学和生物学的夹缝中消亡。人类需要化学来创造更多、更好新物质、新材料。这是任何别的科学不能代替的。

## 参 考 文 献

- [1] 徐光宪. 原子簇与有关分子的结构规则(1) NXCr 格式. 高等学校化学学报, 1982, 3: 114—124.
- [2] 徐光宪. 理论化学与下世纪化学学科重组前瞻. 结构化学, 2000, 19(1): 74—77.
- [3] 朱清时. 绿色化学. 化学进展, 2000, 12(4): 410—414.
- [4] 梁文平, 唐晋. 当代化学的一个前沿. 化学进展, 2000, 12(2): 228—232.

- [5] 高鸿. 分析化学已发展到分析化学阶段.《21世纪的分析化学》, 汪尔康主编, 1999, 科学出版社, 北京.
- [6] 黄本立. 世纪之交的分析化学. 化学进展, 2001, 13(2): 145—150.
- [7] 王佛松, 王夔, 陈新滋, 彭旭明主编.《展望21世纪的化学》, 2000, 化学工业出版社, 北京.
- [8] S. Lippard *Chemistry & Engineering News*, August 7, 2000.
- [9] 徐光宪主编.《稀土》(第二版), 上、中、下册, 1995, 冶金工业出版社, 北京.
- [10] Xu Guangxian, Zhan Changguo. Quantum chemical definition and calculation of valence. *J. Molecular Structure (theochem)*, 1993, 279: 53—57.
- [11] Xu Guangxian, Ren Jinqing, Huang Chunhui et al. Coordination chemistry of rare earths: syntheses, structure, spectroscopy and chemical bonding. *Pure & Appl. Chem.*, 1988, 60(8): 1 146—1 152.
- [12] F. A. Cotton, 《Advanced Inorganic Chemistry》, 6th Ed. (1999), p. 696.
- [13] 义祥辉, 黎乐民, 徐光宪. 铬的羰基络合物及其碳炔衍生物中铬原子的共价. 高等学校化学学报, 1995, 16(3): 329—333.

## CHEMISTRY IN THE 21ST CENTURY IS A SCIENCE TO STUDY PAN MOLECULES

Xu Guangxian

(State Key Laboratory of Rare Earth Chemistry and Applications, College of Chemistry and Molecular Engineering, Peking University, Beijing 100871)

**Abstract** The definition, tendencies of progress, the four important problems and eleven outbreaks of the chemistry in the 21st century are forecasted, and the blind points of the chemistry in the 20th century are also discussed.

**Key words** Chemistry in the 21st century, definition, progress, important problems, outbreaks

·资料·信息·

### 2001年度创新研究群体科学基金资助名单

学术带头人	研究方向	所在单位
陈木法	粒子系统、马氏过程与谱理论	北京师范大学
杨卫	微/纳米尺度力学与智能材料的力学	清华大学
罗俊	引力实验与理论研究	华中科技大学
白春礼	单分子和分子纳米结构的物理化学研究	中国科学院化学研究所
麻生明	导向有机合成的金属有机化学	中国科学院上海有机化学研究所
冯守华	无机合成与制备化学	吉林大学
施蕴渝	重要细胞活动和分子识别的结构生物学	中国科技大学
曹雪涛	免疫学	中国人民解放军第二军医大学
葛颂	植物进化生物学	中国科学院植物研究所
李德发	动物营养学	中国农业大学
陈香美	慢性进展性肾病的发病机理及其防治的研究	中国人民解放军总医院
姚檀栋	冰芯与寒区环境	中国科学院寒区与旱区环境与工程研究所
周忠和	热河脊椎生物群	中国科学院古脊椎动物与古人类研究所
周卫健	亚洲季风与干旱环境系统耦合演化的过程和发展趋势	中国科学院地球环境研究所
魏炳波	空间材料学、深过冷快速凝固	西北工业大学
侯建国	纳米结构的制备、组装与表征	中国科技大学
陆祖宏	生物分子电子学	东南大学
谭铁牛	语音、图像与视觉计算	中国科学院自动化研究所
郭光灿	量子信息与量子计算	中国科技大学
席西民	组织变革与和谐管理	西安交通大学

(计划局专项处供稿)