

现代化学发展趋势和前沿

张升晖 吴吉炎

摘要 依照化学科学的四大分支学科无机化学、分析化学、有机化学、物理化学顺序介绍了现代化学的主要发展趋势和前沿。对我们把握化学科学发展的脉搏,培养科学鉴赏力,选定研究方向有着重要意义。

关键词 现代化学 趋势 前沿

化学科学经历了三百多年的历史,今天已建立起庞大的现代知识,开拓出了广阔的前沿领域。从十九世纪末算起,现代化学已经历了九十多年的历史了,虽然这个历史发展时期尚未完结,但是它在理论、方法、实验技术和应用方面,均已发生了深刻的变化。随着当代科学技术既高度分化又高度综合的发展趋势,正经历着更深刻的变化,因而研究现代化学的发展趋势和前沿,这对我们把握化学科学发展的脉搏,培养科学鉴赏力,选定研究方向有着重要的意义。

现代化学的主要发展趋势,概括起来说,是沿着以下五个方面发展的:(1)物质的原子结构、分子结构、晶体结构和结构性能的研究;(2)原子核结构和核内微粒运动规律的研究;(3)合成化学;(4)化学动力学的研究;(5)分析测试方法和技术的研究及应用;

按照传统的化学科学分类,无机化学、分析化学、物理化学、有机化学是化学科学的四大分支科学。随着科学技术的发展,对化学基本运动形式的认识加深,现代化学分化的趋势大大加快,目前已达数十个之多;另一方面,化学各分支学科之间的相互渗透加深,化学同其它学科(如物理学等)之间的综合也加快了,出现了许多化学边缘学科,并且往往是化学发展的前沿。如配合物化学、金属有机化学、生物化学、分子生物学、量子生物学、细胞化学、组织化学、分子遗传学、化学仿生学等。

这里我们仍按照传统的四大学科:无机化学、分析化学、有机化学、物理化学的顺序,分别介绍一下这四大分支学科的发展趋势和前沿。

一、无机化学

无机化学乃是化学科学中最古老且又是最基础的学科。在化学科学发展的初期,即在1901年诺贝尔奖建立之前,化学研究的重要进展基本上发生在无机化学领域。虽然本世纪上半叶由于多种因素的影响,一段时间无机化学的发展缓慢。但是到了本世纪五十年代,由于原子能、计算机、航天与通讯技术的兴起,在很大程度上推动了无机化学的不断发展,而学科之间的互相渗透,特别是现代物理学、数学、生物学、地质学以及化学的其它分支学科如有机化学、物理化学、电化学、催化化学、生物化学等等,为无机化学提供了新的边缘生长条件,大大开拓了无机化学的研究内容,从而使无机化学进入了蓬勃发展时期,面貌发生了巨大的变化,有人称之为“无机化学的复兴”。1983年,美国斯坦福大学无机化学家陶布教授由于对无机化学、尤其是金属配位化合物电子转移反应机理的杰出研究而获得诺贝尔化学奖。他的研究刷新了自维尔纳以来的经典无机化学,其研究成果给予整个化学巨大影响。当前无论是信息、电子技术,还是能源工业的发展都有无机化学的研究成果,一维导体、固体电池、金属催化剂产生氢,太阳能的转换等问题的解决,也都必须要广泛的无机化学知识。无机化学是使当代化学家感到兴奋鼓舞的领域。

无机化学是一个十分活跃的,潜力很大前途宽广的领域。据文献报道,从1963年到1979年,先后有 Ziegler, Natta 等七位化学家在金属有机化学领域中荣获诺贝尔奖。在1981年美国化学会颁布的15个国家奖中,无机化学就有四项,它们是:(1)普渡大学化学教授 H. Brown,长期从事金属硼的研究,使大量制取二硼烷的方法获得成功,并由此发明了硼氢化

钠及其生产方法,使它成为化工生产上极为重要的选择性还原剂,因而获得 Priestley 金牌纪念奖。他还是 1979 年诺贝尔化学奖获得者。(2)斯坦福大学化学教授 H. Taube,他在无机化学的实验方法和反应机理方面作了开拓性的工作,获得无机化学奖。(3)麻省理工学院化学教授 D. Seyferly,从事有机主族金属元素化学的研究,发明了烯基羰基试剂及过渡金属含 S-S, Fe-Fe 链原子簇化合物的研究,获得无机化学奖。(4)麻省理工学院化学教授 M. Wrighton,在金属有机化合物的光化学,光催化和光电化学等方面的贡献,获得纯粹化学奖。

1983 年 9 月美国第 186 次化学年会上,各类分支学科共有论文 3630 篇,其中物理化学 169 篇,分析化学 173 篇,有机化学 318 篇,生物化学和生化技术 279 篇,而无机化学有 367 篇,是工作开展的最活跃,论文最多的一个化学分支。

以上一些资料表明,在国外无机化学是一个非常吸引人们兴趣和受重视的领域, M. H. Chisholm 教授在“21 世纪无机化学”一书的序言中说道,无机化学正在为广阔的化学领域的发展提供源泉,它已深入到固态化学、高聚物化学、生物化学,由金属有机化合物发生的有机合成、均相和多相催化、能量贮存、与能量有关技术、分析化学、物理化学和理论化学等领域,无机化学正在很多新的方向上迅速成长,无机化学家面临着前所未有的世界性挑战,因而在这时期中他们的贡献也是前所未有的。

近几十年来,无机化学研究的新发展主要是许多新型化合物,如夹心、笼状、簇状和穴状等化合物的合成和应用,以及新的边缘学科如生物无机化学,有机金属化学和无机材料化学等的开拓和发展,下面就无机化学发展前沿作一个概括性介绍。

1、金属有机化学

金属有机化学是以研究金属和有机烃基结合的一类化合物为对象的化学。由于它在有机合成,生物化学及催化等多方面有着广泛的应用,它是无机化学中迅速发展着的一个领域。从无机化学来看,它是具有有机烃基为配体的配合物;而从有机化学角度则注意配体的合成方法以及反应的机理。无机化学和有机化学家从不同的角度共同研究这个领域,所以它是无机化学和有机化学交叉的边缘学科。目前人们有兴趣的方向是:与能源开发、环境保护、新反应的探索有关的小分子如 CO、N₂、CO₂、O₂、H₂、SO₂ 等的催化活化研究;金属有机化合物应用在有机合成方面的研究;金属有机体系中的反应研究;金属有机化合物的催化性能的研究,估计近三十年来 50% 以上的有机合成方法是利用金属有机化合物作催化剂来完成的。如用 1,4 双(二苯基磷)丁烷与乙酰丙酮二羰基铑形成的金属有机化合物作催化剂,可以把 α,β- 不饱和醛酮还原成相应的饱和醛酮,选择性很高,结果满意。

2、原子簇化学

由金属原子直接键合组成多面体或缺顶多面体骨架为特征的分子或离子称为原子簇化合物。这类化合物具有与金属催化剂及金属酶的活性部位有非常类似的多面体结构,对 CO、H₂、N₂、CO₂ 等小分子的活化有重要的作用。如近年来合成的 Mo-Fe 簇的化合物,如 [Fe₈MoS₈(SR)₉]³⁻ 或 [Fe₉W₂S₈(SR)₉]³⁻ 作为模拟固氮的模型,引起了人们的极大兴趣。钼钨原子簇化合物是一种对磁场衰减电流具有高抵抗能力的超导物质,与新型材料、能源及环境保护等国民经济有着密切关系。合成新的原子簇化合物,研究它们的结构和性能是原子簇化学今后发展的主要方向。

3、生物无机化学

生物无机化学是近年来迅速发展起来的一个方向,它主要研究金属配合物和某些其它元素化合物的生物活性。例如人们注意到钾、钠、钙、镁、铜、锌、铁、钴等元素在生物体内是怎样与无机小分子、生物高分子一起承担物质传递、能量产生、转换和传递等基本功能的。研究的方法或是从微观角度考察结构、性质与活性的关系,或是从宏观角度研究它们在体内的行为,或者将微观与宏观结合进行研究。例如把热力学和动力学相结合,把化学工程中的恒流搅拌反应器模型引入多金属多配体生物体系,对了解中毒、螯合治疗等的时间性效果,有一定的意义。目前生物无机化学发展的趋势是:探讨大量生物无机化学反应的机理,金属-碳链化学、配位化合物的主体化学,以及对含氧、含氮分子配合物的系统研究。

4、新型无机材料化学

能源、信息、材料是新技术革命中的三个组成。尼龙、橡胶、涂料、塑料、纤维等有机材料的问世,曾导致了巨大的石油化学工业的发展,而新型的无机材料由于它的优良性能,正在显露头角。新型无机材料有人工晶体、特种玻璃、功能陶瓷以及特种涂料等,它们具有特殊的功能。比如高温下的高强度、韧性、耐磨等机械功能;耐热、导热、隔热、集热、散热等热功能;透光、导光、发生荧光及偏光等光功能;绝缘导电、压电磁性等磁功能;例:砷酸锂单晶所做成的滤波器,有体积小、性能稳定的优点,大量应用于彩色电视机中。目前无机材料化学发展的方向是重点解决能源、交通、通讯手段领域中的一系列问题。

5、能源化学

氢是理想的能源之一。利用太阳能分解水制氢是化学家很感兴趣的工作。水分解为氢和氧所需的最低能量,太阳光中只有紫外线才能达到这个要求。但从太阳到达地面的紫外线只占极小部分,而且水不吸收这个频率的光,因此不能直接用

太阳光来分解水。目前许多科学家从多方面探索光化学催化放氢或半导体催化放氢反应,已有一些实验结果。虽然距实际应用尚有不小距离。然而这些结果确是令人鼓舞。例如用双吡啶的配合物 $Ru(bipy)_3^{2+}$ 作催化剂及 $Ru(bipy)_2^{2+}-Eu^{3+}$ 双分子氧化还原体系为催化剂分解水制氢,已取得较好效果。能源化学是一个很有希望的无机化学新领域。

二、分析化学

分析化学是化学的一个分支学科,分析化学的起源可以追溯到古代的炼金术。分析化学作为一门学科却是近百年来事。进入二十世纪。由于现代科学技术的发展,相邻学科之间相互渗透,分析化学的发展经历了三次巨大变革。第一次在本世纪初,由于物理化学溶液理论的发展,为分析提供了理论基础,建立了溶液中四大平衡理论,使分析化学从一门技术发展成为一门科学。第二次变革发生在第二次世界大战前后,物理学和电子学的发展,促进了分析化学中物理方法的发展,分析化学从以化学分析为主的经典分析化学发展到以仪器分析为主的现代分析化学。从七十年代末到现在,以计算机应用为主要标志的信息时代的来临,给科学技术发展带来了巨大的冲击,分析化学正处在第三次大变革时期。由于生产和现代科学技术的发展,特别是生命科学和环境科学的发展,对分析化学的要求不再局限于“有什么”和“有多少”,而是要求提供物质更多的,更全面的信息。从常量到微量及微粒分析;从组成到形态分析;从总体到微区分析,从整体到表面及逐层分析;从宏观组分到微观结构分析;从静态到快速反应追踪分析;从破坏试样到无损分析;从离线到在线分析等等,分析化学吸取了当代科学技术的最新成果(包括化学、物理、数学、电子学、生物学等),利用物质一切可以利用的性质,建立了表征测量的新方法、新技术,形成了新的领域。分析化学正走向一个更新的境界,因此分析化学是化学中七个最活跃的领域之一。目前分析化学主要发展趋势和特点有:(1)从传统化学分析到仪器物理化学分析,如光谱、色谱、波谱等。(2)从单组分的分步分析到多组分的同步分析,如大型多道谱仪所能达到的分析功能。(3)从组成分析到结构分析,如X射线衍射,红外光谱,核磁共振等方法所具有的功能。(4)从常量分析到超微量分析,如X射线荧光分析,激光荧光分析,放射性活化分析等所测定的限度。(5)从静态分析到动态分析,如激光和分子束所完成的动力学分析。(6)从间接分析到直接分析,如空间分析、结构分析等方法所具有的特点。(7)从近距离分析到远距离分析,如遥感、遥测等。(8)从破坏性分析到保护性分析,如X探伤,γ探伤,激光照相。(9)从单一手段到多种手段相配合的多功能分析,如色谱-质谱联用法,分子束-激光并用法等。(10)从手工到自动化分析和数据处理,如人工智能分析法等等。目前分析化学中热点之一是与生命科学有关的分析化学。从1989年第40届匹兹堡分析化学会议论文分类看,在应用研究(对象)方面,生物分析及生物科学的论文居首位,达九十四篇之多。在方法研究方面,目前在生物分析及生命科学中应用最多的分子分析方法,如色谱、质谱、电化学分析,红外光谱等居于前列。1989年会议的主题是90年代中分析化学在生物药物领域中的作用。生命科学向分析化学提出的课题目前集中在多肽、蛋白质,核酸等生物大分子分析,生物药物分析,超痕量、超微量生物活性物质,如单个细胞内神经传递物质(多巴胺等)分析及活体分析等。在生物无机分析领域中,痕量元素分析已集中到元素在生物组织层,单个细胞,甚至细胞膜中。人体蛋白质碎片内的微分布及其结合形式方面,使用超微量样品的微量分析,检出限要求达到 f_0 级(10^{-15} 克)水平。

美国分析化学家B. R. Kowalski曾指出:八十年代对分析化学来说,可能是最激动人心的时代,如果分析化学家能够认识到,并且参加到当前科学界和社会上正在发生的巨大变革中去。这些巨大变革的核心就是计算技术的发展。目前,一门新的科学“化学计量学”正在兴起,它将训练分析化学家利用数学和统计的方法及计算机科学作为工具去设计或选择最优的测量步骤,并从分析数据中获得最大限度的化学知识。作为“化学计量学”重要分支的化学模式识别与专家系统,能协助分析工作者将原始分析数据转化为有用的信息和知识,为进行差别决策及解决实际生产、科研课题提供依据,分析化学的作用由单纯的提供原始数据上升到直接参与实际问题的解决,分析化学已发展到名符其实的信息科学。同时,“化学计量学”的基础研究,将为各种类型分析仪器的自动化与智能化提供理论依据与技术基础。

总之,现代分析化学已经远远超出化学的概念,突破了纯化学的领域,它将把化学与数学、物理学、计算机科学、生物学紧密地结合起来,发展成为一门多学科性的综合性科学。

三、有机化学

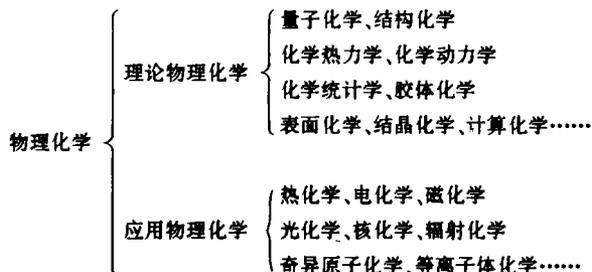
有机化学的创始和开端就是和生命现象紧密联系着的。自有机化学发展成为一门独立的科学,直到现在,分子结构的测定和有机物的合成,仍然是有机化学的两大主要任务。但是方法上有了很大的改进和发展,使用的手段也大大地改变了,从而缩短了测定结构的时间并改进了合成的方法,积累了大量的资料。从多方面扩展了有机化学的研究范围,其结果是由有机化学中划出某一部分成为一门单独的科学,如生物化学、大环聚醚化学;或与某门其它科学紧密联系,发展成为

一门所谓边缘科学,如金属有机化学、物理有机化学等。

目前传统的有机化学主要发展趋势和前沿是:(1)含磷化合物和含硼化合物用作有机合成试剂的研究;(2)合成可模拟重要的生物过程的分子的研究;(3)人工合成生物高分子;(4)量子有机化学理论的进一步完善;(5) $H-H$ 、 $C-C$ 和 $C-H$ 键的断裂如何随催化剂金属原子簇增大而改变;(6)能否做到在烷烃末端的选择性均相氧化催化;(7)有机溶剂中起作用的人造酶的设计;(8)有机合成的选择性反应途径;(9)利用计算机进行有机合成的设计。

四、物理化学

物理化学这一名称,是俄国大学者 *M. B. JTOMOHCOBD* 在十八世纪中叶提出的。从方法论角度给物理化学的定义是:运用物理学的原理、方法,来研究化学反应过程的学科。从物质运动形式角度给物理化学的定义是:从物质的物理现象和化学现象的联系入手来探求化学变化的基本规律的一门科学。我国学者廖正衡教授把物理化学分成理论物理化学和应用物理化学两大类:



目前物理化学主要发展趋势和研究前沿是:(1)分子及新材料性能的预测;(2)精测实验结果及各种谱图的解析;(3)化学反应量子理论的研究;(4)量子生物,量子药理,量子固体等边缘性学科的发展;(5)在特定的激发下,留在分子中的能量是如何重新分配并如何随时间而变化的;(6)彻底描述和理解分子间和分子内能量转移过程;(7)多电子迁移反应的机理、速度,如何控制这类反应;(8)新的催化剂的发现和研制;(9)反应位能面的量子化学从头计算;(10)分子中的能量(能量大小、能态、能量的分布)对化学反应性能的影响;(11)高振动激发态的研究。

上面依据化学科学的四大分支学科无机化学、分析化学、有机化学、物理化学顺序介绍了现代化学的主要发展趋势和前沿,随着科学技术的发展,相邻学科的互相渗透,新的研究成果不断出现,现代化学的发展趋势和前沿也会不断的变化,这也需要我们经常性的研究和了解现代化学的发展趋势和前沿,把握好现代化学这门学科的脉搏,为祖国现代化建设培养更多更好的人才。

参 考 文 献

- | | |
|--------------------------------|------------------------------------|
| [1] 戴安邦, 化学通报, 1982,1(8) | [14] 王 甍, 化学通报, 1985,1(7) |
| [2] 梁树权, 化学通报, 1982,2(8) | [15] 徐抗成、邱文元, 化学通报, 1985,65(7) |
| [3] 高 鸿, 化学通报, 1982,3(8) | [16] 吴成泰, 化学通报, 1988,25(7) |
| [4] 张青莲, 化学通报, 1982,12(8) | [17] 郭 础, 化学通报, 1989,47(12) |
| [5] 黄耀曾, 化学通报, 1982,8(9) | [18] 曹左幅, 化学通报, 1991,49(7) |
| [6] 王祖陶, 化学通报, 1983,53(2) | [19] 唐雯霞、祝世彤、戴安邦, 化学通报, 1991,1(11) |
| [7] 邢其毅, 化学通报, 1984,65(4) | [20] 叶秀林, 大学化学, 1991,1(2) |
| [8] 高小霞, 化学通报, 1984,51(6) | [21] 赵新生、高查良, 大学化学, 1991,1(2) |
| [9] 严东生, 化学通报, 1984,1(10) | [22] 高 鸿, 大学化学, 1991,3(3) |
| [10] 倪德良, 化学通报, 1984,6(10) | [23] 俞汝勤, 化学通报, 1992,22(8) |
| [11] 谢高阳, 化学通报, 1984,55(11) | [24] 张家治, 化学史教程, 山西人民出版社, 1988 |
| [12] 邓道利, 化学通报, 1984,50(12) | [25] 高 鸿, 分析化学前沿, 科学出版社, 1991. |
| [13] 徐抗成、邱文元, 化学通报, 1985,69(6) | |

【收稿日期: 1993—03—19】