

关于用经典力学计算氢分子结构的商榷

张武寿

中国科学院化学研究所, 副研究员 北京 100080)

〔摘要〕 针对陈景先生用经典静电力学方法计算氢分子结构的 3 篇文章, 提出了不同的学术见解。

〔关键词〕 经典静电力学 氢分子结构 量子力学 量子化学 〔中图分类号〕 O6

最近, 陈景先生用经典的静电力学方法讨论了氢分子的键长、键能和力常数^[1-3]。其结果看起来不仅具有简单漂亮的形式和较高的精确度, 而且如果该方法可以推广的话, 对量子力学、量子化学甚至材料的设计都可能产生积极的影响。为此, 笔者对其理论推导进行了重复, 遗憾的是, 发现陈文的结果是错误的。这种错误首先表现在数学推导, 其次是由此导出的物理结论。在此, 笔者以陈文的模型为基础进行讨论, 为简明起见, 所用符号与文献^{[1]-[3]}中的相同。

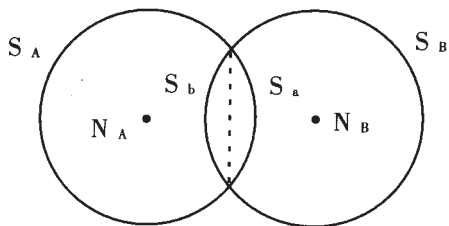


图 1 文献[1]~[3]中用到的原子间相互作用模型

首先, 我们计算两个氢原子的相互作用。所用仍是以原子核为中心、波尔半径为 a 的电子球壳层原子模型(见图 1)。根据静电力学的基本原理可以理解, 由于壳层负电荷对核正电荷的屏蔽, 在两球未交叠时相互作用为零。当两球交叠时($a < R < 2a$, R 为原子核间距), 考虑 B 球在 A 球电场下受到的作用。对于 A 球外的 B 原子部分(包括壳层 S_B 和原子核 N_B), 由于 A 球的总电荷为 0 且具有球对称性, 所以不受作用; 只有进入 A 原子的壳层 S_b 才受到 A 原子核的吸引作用, 其作用力已由陈文给出^[2,3]。另外, 当核间距小于原子半径后, 核相互间的排斥开始起作用, 此时要在前吸引作用上再加 1 项。由此得出两个氢原子间作用力和作用势分别为:

$$f = \frac{e^2}{a^2} \times \begin{cases} \frac{1}{4}, & 0 < R \leq a \\ \frac{1}{4} - \frac{1}{R^2}, & a < R \leq 2a \end{cases}$$

$$U = \frac{e^2}{a} \times \begin{cases} -\frac{1}{4} \frac{R}{a}, & 0 < R \leq a \\ 1 - \frac{a}{R} - \frac{1}{4} \frac{R}{a}, & a \leq R \leq 2a \end{cases}$$

其中 e 是单位电荷, 相应的结果见图 2。可见在两

个原子球相遇后, 相互间会吸引到原子半径的距离, 且根据维里定理, 其结合能为 $e^2/8a$ 。虽然这是考虑一个球在另一个球力场作用下得出的结果, 其实将原子分为不同部分, 将各部分作用力求和后也可得到同样的结论。这与氢分子实际的键能 ($0.174e^2/a$)、键长 ($1.401a$) 不符。如果在理论上走得更远一点的话, 此处不仅两个原子可以吸引在一起, 多个原子还可以吸引在一起形成更大的分子链, 乃至三维的团簇或堆积结构, 这些都与共价键的饱和性和性相矛盾。

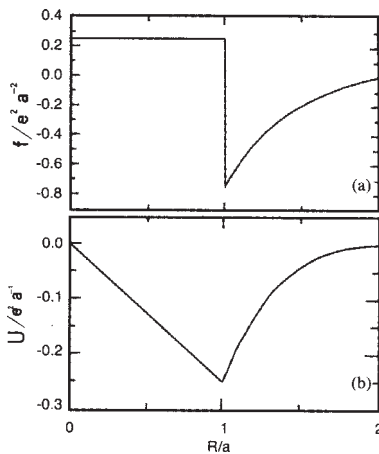


图 2 由图 1 的原子模型导出的两个氢原子间的作用力与作用势

能; 实际情况是, 将文中作用力在 $2^{1/2}a$ 至 $2a$ 区间积分后得出的势能变化为 $(3/2 - 2^{1/2}) = 0.0858e^2/a$, 再考虑到维里定理的要求, 键能仅为实验值的 $\sim 1/4$ 。因此, 陈文所得键能虽然接近实验值, 但其推导过程太牵强。

上面是完全按照陈文的假设推导的, 即认为氢原子中的电子壳层分布在形成分子的过程中不变, 该模型可以进一步改进为电子壳层发生畸变。为此, 笔者先考虑图 1 中两个电子壳层相互交叉的部分 S_a 和 S_b 塌缩为两核连线的中垂面 (见图 1 中的虚线), 数值计算表明整个系统的总作用是排斥性的。笔者还用卡西尼卵形线(包括双纽线, 两原子核分别在两个焦点上)绕焦点连线为轴形成的旋转球面作为电子分布的近似, 但得出的总作用能没有稳

对照参考文献 [2]~[3] 的推导可以发现, 文中将吸引力多算了 1 倍, 而且两核间作用力也不对。此外, 文献 [1]~[3] 中计算键能的方法明显不规范: 如果作用力表达式正确, 将作用力对距离积分求得作用势即可得出键能

科技出版与科技学术道德

乔少杰
(北京航空航天大学出版社社长兼总编辑、中国大学版协副秘书长 北京 100083)

〔摘要〕 本文从科技出版的角度探究和思考了当前关注的学术腐败问题,对学术腐败产生的原因、学术腐败在科技出版中的表现以及科技出版如何抵制学术腐败进行了分析,提出了解决问题的意见。

〔关键词〕 科技出版 学术腐败 学术道德 〔中图分类号〕 C93

一段时间以来,涉及学术腐败的报道多见于各种媒体,成为社会关注的热点之一。从小学生雇人写作业,到名教授的论文和成果受到质疑;从学生考试作弊、论文抄袭,到科研成果鉴定中的暗箱操作;从专业技术职务评定的弄虚作假,到院士评选中的是非非……虽然这些都只是个别现象,但在社会上的影响却极坏。当然,违反科学道德的学术腐败现象并不是现在才有的,古今中外留存有许多违反科学道德的案例,有的重大发现多年后却被证实为弥天大谎,有的重大研究成果却被后人揭发为抄袭。因此,我们决不能小视科学道德以及由此引发的学术腐败问题。当前,“科学技术是第一生产力”已成为全社会的共识,“科教兴国”成为实现中华民族伟大复兴的战略国策,“求真务实”成为我们工作的指南,在这样的形势下,追求崇高的科学道德、自觉抵制学术腐败将有着十分重要和深远的意义。

一、探究学术腐败产生的原因

任何一个领域的不良现象,都有着其产生的深刻社会根源和发展脉络。当今社会正处于激烈的变革时期,计划经济向市场经济转轨,且社会主义市场经济体制尚未十分完善,在这样的形势下,必然会产生这样或者那样的问题,反映在科学研究领域的浮躁浮夸、功利主义、拜金主义、剽窃抄袭、弄虚

定的极小值,只有分离或塌缩解。此外,还用棒锤形(中部为圆柱面,两头为等半径半圆球,原子核在圆柱轴线两端)表面分布的电子作过计算,虽然该分布有稳定的核间距,但其数值具有任意性,这是可以理解的,因为用静电力学的方法可以得出氢原子的稳定解是以量子化作为约束条件的;而对于氢分子的计算,无法独立给出这样的条件,因此这样的分子键长不可避免地具有一定的任意性,从而失去明确的物理意义。另外,由棒锤形分布得出的键长、键能间比值与实验值也相去甚远。

上述内容是针对陈文的具体推导过程而言的。因为其过程的错误,导致了结果的错误,也就证明

作假等学术腐败现象也就在所难免。究其原因,可以归纳为以下4个方面。

1.科学领域的学术不端或学术腐败,是社会不良现象或腐败问题在科学领域的延伸或特定的表现方式。

2.科技成果和科技工作者的评价、评估体系不够科学和完善,片面强调眼前利益、论文数量等,忽视了科技发展的规律,专业技术职务评定、科研成果获奖等与科学工作者个人的住房、待遇、津贴、地位、名誉的联系过于紧密,客观上助长了急功近利、抄袭剽窃等学术腐败现象的滋生。

3.科学道德和职业道德教育十分薄弱。个别导师难以为人师表,工作在后,名利在前,直接影响到学生的成才;普遍缺乏对学生进行科学精神、科学态度、科学思想以及相关法律的教育。

4.对于可能产生学术腐败的各个层面,缺乏统一、严格的科学道德规范和行之有效的规章制度以及适时有效的监督约束机制。

当然,以上4点并不能完全概括学术腐败产生原因的方方面面。总的来讲,社会因素、制度因素和个人因素直接影响着科学领域的道德表现,外界环境对个体的影响以及个体道德修养的高低也直接体现在个体的科学道德表现上。因此,认真分析学术腐败产生的原因,将有助于预防学术腐败的产生,有助于建立完善的科学道德体系和约束机制,有助于“净化”科学研究领域的学术氛围。

了其假设的不合理。同理,文献[1]中以此为基础而得出的关于量子力学的其它结论也就不需赘评。

以上是笔者阅读文献[1]~[3]后的个人见解,仅供参考。

参考文献

- [1]陈景.量子力学与经典力学计算氢分子结构的比较讨论[J].科技导报,2003,(12):3-7
- [2]陈景.用经典力学计算氢分子的键长键能及力常数[J].中国工程科学,2003,(6):39-43
- [3]陈景.用静电力理论计算氢分子的键长及结合能[J].辽宁师范大学学报,1978,(1):13-21

(责任编辑 邱夜明)