

略谈分子反应动力学的过去、现在和未来

On the Past, Present and Future of the Chemical Dynamics

赵新生

(北京大学化学系,教授 北京 100871)

化学的研究对象为物质的存在形式和相互间转化的运动过程。化学动力学是化学的一个分支,着重研究物质转化过程的现象和规律。随着人们认识能力的提高,对化学运动的研究与探讨也逐渐地从宏观走向微观,化学动力学便发展出一个新的方向:分子反应动力学。在英文文献中,相应的词有 chemical dynamics, molecular reaction dynamics, 在中文中,化学动态学、微观反应动力学等也表达类似的含义。

分子反应动力学的理论发展开始得很早。原子、分子论的创立,导致了用分子碰撞的观点解释化学反应现象。这当中最成功的、应用范围最广的、可以定量地解释化学反应速率的微观理论是30年代由艾林(Eyring)等人提出的过渡态理论。由于过去的化学动力学的实验研究都是宏观的,理论正确与否只能通过它所预言的宏观性质是否与实验吻合来检验。虽然用分子束的技术直接观察化学反应过程的优点显而易见,虽然粒子束技术已经为物理学的发展立下了汗马功劳,但由于化学反应的复杂性,这样的尝试到1955年才由泰勒(Taylor)和达茨(Datz)报道。以后的十多年被称作分子束研究的碱金属时代,因为此时的检测手段只允许进行对碱金属参与的反应的研究。不过,以赫希巴赫(Herschbach)为代表的科学家们观察到一些重要的新现象还是深化了对化学反应的认识。1969年李远哲等研制成功了普适交叉分子束,与此同时波拉尼(Polanyi)等人将激光技术应用于化学反应的研究。从此分子反应动力学进入了理论与实验研究共同蓬勃发展的现代时期。1986年,李远哲,赫希巴赫和波拉尼分享了该年的诺贝尔化学奖,标志了这一学科的成熟。目前,分子反应动力学是物理化学和化学物理这一交叉领域最活跃的前沿之一,它的成果使人们对与化学反应相关的基本化学物理过程的认识推进到前所未有的广度和深度,大大提高了人类利用化学规律认识世界、改造世界的能力。

分子反应动力学作为一门基础学科,对科学技

术发展的贡献迄今主要表现在:

第一,为化学反应提供了细致、系统的理论框架和实验手段,从而使我们对自然现象有了更全面、更深入、更准确的理解和认识。它的成果已经渗透到其他学科,促进了这些学科的发展。例如关于电子传递的理论对于认识包括生命现象在内的一大类自然现象是必不可少的,这一理论的创立者马库斯(Marcus)因此获得了1992年的诺贝尔化学奖;又如高效低耗低污染的新型发动机的设计和臭氧层破坏等环境问题的治理在很大程度上也依赖于人们对与此相关的化学反应的动力学的研究是否透彻。

第二,在它的研究过程中发展起来的理论和实验技能,为其他学科或生产部门所借用,成为新兴技术和新的科研领域的源头。例如轰动一时的富勒烯热,就是由斯莫利(Smalley)等人在分子束中发现稳定的碳60簇开始的;又如激光辅助的化学气相沉积技术已发展成为新的膜材料加工技术。

就目前和不远的将来而言,分子反应动力学发展的趋势如何?笔者的基本估计是:

1. 继续研究态-态水平上的基本化学物理过程,进一步完善化学反应的微观理论。

这一方向过去是分子反应动力学研究内容的主流。一系列现代研究手段如分子束技术、各种高分辨光谱技术、直至飞秒量级的时间分辨技术等使研究者“看到”某些化学反应过程的每一个细节,使人们可以重新审视迄今为止化学文献中积累起来的各种理论和概念,向理论提出挑战。更重要的是采用更新的先进实验技术对化学过程进行深入精细的研究将发现新的现象,提出新的概念,并为新的更准确的理论的提出和检验提供实验基础,使化学动力学理论进一步完善与发展。目前这样的研究依然活跃,并会在一定时期内保持其主流位置。

2. 探索实现分子裁剪的条件和途径。

化学的梦想之一是实现“分子裁剪”,即按人们的意愿控制反应的速率和方向。化学发展到今天,

已取得了极大的成功,为社会提供了成千上万不同性能的材料,并且是人类现代活动的物质基础。从很大程度讲,人类已经实现了分子裁剪,但所有这些都是平衡态统计热力学的限度之下进行的,以往化学动力学的应用只有在控制反应速率这一方面。人类的下一个目标将是在突破统计热力学限制的意义上实现分子的裁剪。如果这一目标能够实现,人类就将在更大的自由度下获得对自然的支配权。但有迹象表明,这是一个艰巨的目标。70年代初,二氧化碳激光器的红外多光子激发现象的发现,曾激起人们关于选键化学的极大热忱,但随后的研究表明,这样的途径是行不通的。现在关于选键化学、选模化学的论题又多了起来,人类不会停止对走向自由王国的道路的探索。就分子裁剪而言,分子反应动力学将在基础研究和准备方面起关键作用。

3. 研究界面与凝聚态中的基本化学物理过程。

分子反应动力学发生的土壤是气相体系。这决不是说分子反应动力学不关心其它物相,更不是其它物相不重要。事实是,自然界中绝大多数与人类直接相关的化学过程是在凝聚相和界面上发生的。其中我们只需指出生命现象和大多数有机合成反应就够了。那末,为什么分子反应动力学在它生长的早期出现这种“与世隔绝”的状况呢?原因在于以探索化学反应的微观机制为己任的分子反应动力学必须从最简单的对象开始,否则就会陷在复杂性之中,理不出头绪,迈不开步子。现在,分子反应动力学已经有了巩固的阵地,取得了丰硕的成果,

积累了丰富的经验,建立了较系统的理论,加之现代技术提供了研究手段,分子反应动力学已经开始了对簇团、界面、凝聚态化学过程的研究。我相信,这样的方向将逐渐地成为主流方向,其研究成果的可应用范围也将扩大,改变其“纯”基础研究的形象。

4. 更多地向相关学科渗透。

一门基础学科发展的动力来源于两个方面,一是学科本身探索自然规律的本性需要,二是回答其他相关学科及应用中所提出的问题。在发展早期,分子反应动力学的动力主要在前者。随着它的成长与成熟,后一因素的作用将越来越明显。将分子反应动力学研究的成果扩散到化学的其他分支以及诸如生命科学、材料科学、环境科学和能源利用这样的相关及交叉学科中去是我们将会看到的又一重要趋势。与此并行的是它也将更密切地与应用结合,解决现代工艺、生产、加工等生产实际应用中提出的问题。

5. 形成新的交叉学科、领域和生长点。

自然科学发展不断地产生新的领域,这些新领域许多是前沿学科交叉的结果。分子反应动力学与其他学科在相互促进相互影响的同时,也会形成新的交叉学科。象纳米材料、分子器件、分子电子学等正蓬勃兴起的领域的发展,也将会成为分子反应动力学作出贡献的场所。而将学科成就与发展溶入新的学科和方向,正是科学之树常青的生命力所在。

(责任编辑 孙立明)

(上接第 61 页)

不到三年时间建成广深第二条线路,综合运输能力提高 70%。1992 年起又投资 11 亿元,修建广深高速铁路,预计 1994 年投产。该公司剔除加价因素,营业每公里劳动生产率为全国铁路平均值的 4.3 倍,人均运输收入为 8.6 倍,人均创利为 6.6 倍。

三茂铁路公司修建的三茂铁路于 1987 年动工,1991 年正式运营。该公司被广东省政府授以自贷、自建、自管、自偿的权力。三茂铁路每公里造价 470 万元,低于全国 500 万元的水平;用三年半的时间建成,比全国平均六年时间缩短两年半。该路的特点是大力发展多种经营,由铁路牵头,推动地方经济的发展,现有广告、饮食、服务、旅游、外贸等十大行业,几十个公司。它利用铁路沿线风景优美的特点,开出豪华型旅客列车“希望号”,当年收入 2500 万元,深受港澳游客的欢迎。肇庆水电段,原定员 743 人,主动精简员工至 486 人,并抽调 50 多人

从事多种经营,仅半年时间创利润 80 万元。三茂铁路投资来自世界银行、亚洲开发银行、广东发展银行贷款和发行债券。三茂铁路原定 10 年还清借款,现已提出缩短为 8 年,开创了借债修建,依靠自我积累 8 年还清贷款的先例。

广州铁路局在推进铁路企业改革方面取得了巨大的成绩,现在已组成广州铁路集团公司,进一步在广东、湖南、海南境内推行铁路体制的深化改革,这必将促进广梅汕铁路、平南铁路等新线的建设。

我国国民经济正在上一个新台阶,要求铁路的高速增长。我们深信通过概念更新,模式更新,深化铁路机制改革和采取革新措施后,中国铁路是能够迅速改变面貌,真正成为我国经济建设“先行官”的。

(特约责任编辑 王 骨)