

自然科学学科发展战略研究报告之五：物理化学

Strategic Research on Natural Science Disciplines: Physical Chemistry

国家自然科学基金委员会

一、物理化学的发展趋势和特点

物理化学是研究化学学科中的原理和方法,研究化学体系行为一般规律和理论的学科,是化学的理论基础。

当前物理化学的发展趋势大体上可概括为:宏观研究与微观研究相结合,更多地向微观层次深入;体相研究与表面相研究相结合,更多地向表面延伸;在微观领域的研究中,表现出静态观测与动态观测相结合,更多地向动态研究转移;理论与实践结合更为紧密,并进入更高层次。此外,国民经济的发展、国际竞争的加剧,以及与本学科密切相关的生命、材料、能源、环境及电子科学等的迅猛发展,都给物理化学提出了十分紧迫的理论与实际课题,迫切需要物理化学的投入。这些无疑对物理化学的发展将产生强大的推动作用。反之,物理化学也有赖于其它学科的发展与进步。作为化学理论基础的物理化学,历来就对物理学与数学的新成就最为敏感,不断从这些学科引入新观念、新思想和新方法。同时,物理化学的理论方法及实验技术也越来越广泛地为其它化学学科熟练地应用,更充分地发挥出基础理论的指导作用。当前物理化学的发展有以下趋势和特点:

1. 分子反应动力学是当前极为活跃的研究领域,是物理化学中最为基础的研究工作之一。随着谱学与谱学技术、激光技术、计算机技术,以及分子束技术等的发展,瞬态物种的结构化学、分子光谱及其动力学研究有了长足的进步。这些相互配合的研究结合量子化学计算,使态-态反应、“分子剪裁”的研究达到新的水平,并不断开拓出新的研究领地。分子反应动力学的研究将为弄清化学过程的详情细节作出贡献,从而使我们有从根本解释各种化学现象,为控制、选择与开发各种化学过程,提出新工艺,制造新产品提供

依据。因此,分子反应动力学的每一进展,都将促进化学科学的进步,并带来显著或潜在的经济效益。

2. 分子设计、分子工程是化学科学中日趋活跃的领域。化学及相关学科的发展,既积累了丰富的分子设计和分子工程的知识,又相应提出了进一步探索原理、总结规律的要求。分子工程学以其逆向性为主要特征,是根据对化学物质及材料各种特定性能的要求,依据结构-性能间关联的知识,在分子水平上对其结构进行设计与施工,进而总结出相应的性质-结构-制备关系一系列原理与规律。蛋白工程是目前发展较好、较快的分子工程。其次,在催化材料、药物、高分子合成、高功能材料等方面都有一些初步的研究,并取得成效。预期21世纪将会有突破性进展,将与结构化学、量子化学、分子反应动力学、光化学、胶体及界面化学、生物化学、化学合成等协同努力,互相补充,并将与生物、医药、材料等科学一道为增强国民经济,改善人民生活作出贡献。

3. 物理化学中的催化科学是一个活跃的研究领域。当今各国无不在催化基础性与开发性研究中投入巨大的人力、财力。这种巨大投入在化学领域里可能是首屈一指的。但是,对催化作用本质的了解与对催化过程的控制,催化材料的设计与催化过程的开发,最终要求在分子水平上开展基础研究,开展催化剂表面结构与分子间相互作用、吸附与脱附及其动力学等方面的研究。这些基础工作也是当前化学科学的前沿,牵动着并决定于物理化学总体的发展水平。

4. 表面与界面物理化学虽是物理化学的传统研究领域,但表面、界面效应及粒子尺寸效应的知识积累呈指数上升,使这一领域的研究有了新的研究方向,提出了在分子水平上进行基础研究的要求。当前,涉及这一领域的研究,已成为催化、

电化学、胶体化学的前沿课题,并对这些分支学科的进一步发展起着关键性(甚至是决定性)的作用。它还与生命科学、材料科学、环境科学、膜技术及医药学密切相关,是这些相关科学要研究、解决的核心课题之一。

5. 非平衡态热力学与非平衡态统计力学及其它非线性理论近二三十年来,国际上的研究已有重大进展,引起了物理化学家的关注。已有人应用这类理论开展了化学体系中分叉、分形、混沌等“复杂性”问题的研究。非线性、非平衡态理论在化工生产(传质、传热及体系动力学行为的考察等)、单晶表面催化剂和材料表征研究等方面已显示出诱人的前景。

二、物理化学主要分支学科的发展状况

物理化学在其发展过程中,逐步形成若干分支学科,其中主要的有结构化学、量子化学、催化、化学动力学、胶体与界面化学、电化学、化学热力学、光化学等八个分支。

八个主要分支中,量子化学、结构化学、化学动力学及化学热力学(包括统计热力学)构成物理化学的理论基础,为化学这一中心科学提供一系列原理和方法,探索物质性能与分子结构间的内在关系,研究化学反应的基本规律。其余分支无不与这四个分支密切关联,互相交叉,并强烈依赖于这四个分支的发展。

现就这八个分支学科的发展状况作简要阐述。

1. 结构化学已成为或将成为分子生物学、材料科学、金属有机化学等新兴、边缘或综合性学科发展的支柱。

在未来20年内,结构化学发展的主流将反映在四方面。

(1) 元素及其化合物的结构化学发展的总趋势是不断强化从碳元素向非碳元素,主要是金属元素,特别是d区元素的扩展与转化。d区元素及其各类化合物的结构化学研究当今已处于承上启下的前沿地位。

(2) 药物、有生物活性的分子的结构化学的发展反映出中、小分子的结构研究正向生物大分子强烈倾斜的趋势,且正沿着高效率、高精度、高难度方向发展。

(3) 从体相结构向深入研究结构缺陷和表面结构发展。当前此类研究活跃的课题有:与固体表面吸附和多相催化相关的活性组分在载体表面分散态、分散机制与分散阈值的研究;分子有序组合功能体系的研究;以分子束外延法制备混晶薄层固体(微)电子器件等。

(4) 从静态、稳态结构向动态、瞬态结构研究转化。

2. 量子化学当前发展的特点是尽量引入数学的研究成果,并以这些数学工具来讨论、处理量子化学问题;在计算方法上,注意采用计算数学的最新成果;量子化学计算所涉及的体系越来越广泛,计算的精度越来越高,并呈现出向相关学科更加深入、广泛的渗透和交叉的趋势。

(1) 基础理论方面,主要是采用非相对论近似、绝热近似和单电子近似,进行严格或近似求解运动方程的研究,以及对各种近似进行校正性计算的研究。后者已成为现在理论研究中特别活跃的研究方向。三大化学键理论有着相互渗透、相互影响及相互融合的趋势,可望利用群论方法,将价键理论和分子轨道理论在形式上统一起来。

(2) 计算方法方面,发展趋势是努力提高计算精度和扩大计算体系;量子化学定性理论和方法的研究也受到化学家的重视,注重结论、规律、方法的定性意义及简明的、便于应用的结果,强调化学概念的直观性等。

(3) 应用研究方面,量子化学的一些研究成果,从理论上揭示了分子的结构与性能的关系,为分子和反应设计以及新功能材料研制等前沿交叉领域提供理论依据。其中,活跃的研究课题和领域有:新型分子结构与化学键性质(如稀土化合物、原子簇合物、长程力分子或超结构的研究等);分子激发态及其谱学(如作为“分子剪裁”基础的化学键断裂和形成等基本过程的研究等);化学反应的量子理论和光化学;固体表面与催化机理;生物与药物化学以及材料科学等。

3. 催化作用几乎遍及化学反应的整个领域,当前的发展趋势主要有三。

(1) 以催化剂结构与性能关系为主线,逐步形成一些带根本性的研究课题和方向。如关于一些类型催化剂的表面结构与性能、表面修饰、活性中心性质、表面活性结构的设计与表征、反应分子与催化剂表面的作用细节等的研究。为此,不断引入和发展表征催化剂和催化过程的新实验技术。

(2) 继续朝着认识催化作用机理,利用基础研究成果进行催化剂分子设计的方向发展。当前一些重要催化过程的机理研究已取得进展,提出了一些催化理论,而仿生催化、膜催化、簇合物催化、均相配位催化等研究正在跨入“分子设计”的门槛。在理论计算方面,量子化学已进入催化领域,模拟催化反应机理和催化剂设计的计算机专家系统的研究正在取得进展。

(3) 开拓新催化材料和新催化过程。这些工作与理论研究正在相互促进、并肩发展,如合成了一些新的分子筛催化剂,除对反应物和底物具有择

形作用外,对反应的过渡态也有限制;膜催化材料的研究十分活跃;用于不对称合成的一些均相配位催化剂能达到极高的旋光选择性,产品胜过天然产物。此外,如开发使用廉价原料的燃料、化学工业路线所用的催化剂、满足环保要求的催化剂等。

4. 化学动力学发展的重点与趋向可概括为五个方面。

(1)有关气相分子反应的研究。预计在未来十年中,分子束和激光技术会结合得更好。将在激发态分子反应、瞬态过程和过渡态探测方面取得重大进展;研究对象将由小分子向大分子转移。

(2)分子内、分子间的传能研究方面,现在已开始利用紫外超短脉冲进行选键光解的研究。最近,又实现了原子与特定化学键相互作用的选择性反应。了解其中的能量传递规律具有极为重要的意义。

(3)界面反应方面,各种粒子束与固体表面的原子或表面上吸附物的相互作用的研究,密切关系着材料科学、催化发展,有重要科学意义与良好应用前景。气液界面动力学研究也开始为人们所注意。

(4)凝聚相反应方面,各种波谱和激光技术的发展,展示出研究溶液中分子反应动力学的可能性。而在生命过程的研究中,各种生化反应机理的研究将是化学动力学新的用武之地。分子簇参与的化学过程的动力学研究已是目前活跃的课题。

(5)宏观反应动力学方面,基元反应、极端条件下的反应、特殊分子反应的速率常数的精确测定和积累,仍然是化学动力学基础工作的重要组成。

5. 胶体及界面化学研究的内容大致可分为胶体、有序组合体系和界面现象三大部分。近年,胶体的研究在单分散超细微粒与两亲分子有序组合体方面比较突出,水溶性大分子与表面活性剂分子的相互作用是人们颇感兴趣的课题。表面活性剂溶液成为胶体体系中极有特色的一大类——缔合胶体。胶团以及其它缔合胶体与各种界面膜一起,则已概括为“有序组合体”。表面活性剂在实际应用中有其广泛性与重要性。通过表面活性剂在各种界面上所起作用原理的研究,以及表面活性剂形成缔合胶体,单、多分子膜,LB膜,黑脂膜(双分子膜,BLM)等有序组合体的结构与性能的研究,可进一步推动胶体及界面化学的发展,并对目前人们极力探索生命奥秘的生命科学以及作为现代文明支柱的能源、材料和信息科学的发展有所促进。各种界面现象研究,特别是吸附的研究,近年仍不断发展。其中,有关气体吸附(气/固界面)的研究较溶液中的吸附(液/固界面)为

多。LB膜研究在几乎沉睡数十年之后又重新活跃起来,这是与当前微电子技术的发展需要和有序组合体体系基本性质研究的进展分不开的。

6. 电化学当前的发展有三个特点:研究的对象范围大为扩展;处理方法和理论模型开始深入到分子水平;实验技术迅速提高、创新。中近期电化学发展主要集中在六个前沿领域:

(1)界面电化学(电化学界面微观结构、界面吸附、界面动态学,理论界面电化学);

(2)电催化(新型电催化剂和电催化反应,电催化机理,电催化剂性能与结构关系,电催化的分子设计);

(3)光电化学(光电化学中的电荷转移与能量转换过程);

(4)生物电化学(生物体系和生物界面电位,生物分子电化学,生物电催化,光合作用,微生物电化学,生物技术中的电化学技术);

(5)能源、材料等领域的电化学基础(电池和燃料电池,金属电沉积及材料的电化学表面处理,腐蚀的电化学控制,材料的电化学制备);

(6)电化学研究方法。

7. 化学热力学虽然是一门古老而成熟的分支学科,但当今仍然存在着不少待开拓与探索的领域。精确测定各种体系在各种条件下的热力学性质的实验热力学,是长盛不衰的基础研究工作。当前国际上热衷研究的一些课题是:

(1)生物热力学和热化学的研究(如细胞,包括癌细胞,生长过程的热行为研究;球蛋白分子的“热开拆”反应研究;生物模型分子的热力学研究等;

(2)分子内原子或基团间相互作用的热化学研究(分子力学研究中的分子力场参数需要系统、精确的热化学数据;各种特殊化学物质的量热学研究尚存在不少实际困难需要解决);

(3)溶液热力学(溶剂化效应、高浓度电解质溶液、水溶液与疏水效应以及临界现象等方面的研究都面临不少理论及实验技术的问题尚待攻克);

(4)一些重大的实用性课题,如各种温度范围热容、构型热容、相变点附近的热容等的测定;标准热力学函数的测定;化学储能体系的研究;临界态在化工和石油开采方面的应用研究;包合物的热力学研究等。

(5)化学热力学与化学统计正面临向非线性非平衡态的发展,这一领域的进展有可能回答众多的理论和实际的重大问题。各种分支现象的模型分析和实验研究、非平衡态相转变、涨落理论等是非平衡态热力学和非平衡态统计热力学研究的活跃领域。

8. 光化学近30年来取得了巨大的进展,当前光化学的前沿课题可概括为六个方面:

(1) 激发态的能量转移和迁移及其影响因素的研究;

(2) 激发态电子转移的研究(如设计新的实验方案以验证经典或非经典的电子转移理论;生物体系中的光诱导电子转移;电子转移在太阳能转换中的作用等);

(3) 光化学反应中间体及其激发态性质的研究,以及利用双步激光法研究反应机理;

(4) 激发态的外场效应(发现一系列光化学反应受磁场效应影响,引起了人们极大的注意);

(5) 微多相体系光化学和超分子光化学(将活性反应物放置于胶团、微乳、囊泡以至LB膜或液晶中将大大影响反应进程和产物的分布状况,以利于某些特定反应的发生);

(6) 成像过程中的光化学。

三、我国物理化学研究现状及发展战略

1. 我国物理化学研究现状

我国物理化学研究有较强的队伍及较好的基础,特别是近年来取得了令人瞩目的发展,在一些学科点上取得了国际水平的研究成果。但从总体上看,与国际先进水平还有相当差距,多数研究工作还处在模仿跟踪国外工作的水平,缺乏独创性与系统性。

结构化学近年有长足发展,如关于胰岛素系列晶体结构、天花粉蛋白三维结构、胰蛋白酶与抑制剂复合物结构的研究,以及盐类和氧化物在载体表面上单层分散规律的研究等达到了国际先进水平。

量子化学已逐渐建立起一支具有国际水平的队伍,作出了一些有特色的工作。配位场理论和分子轨道图形理论的研究及其应用,在国际上已被称为中国学派的工作。原子价新概念和稀土元素化学性质等一系列研究成果已达国际先进水平。

催化已形成一支相当大的研究队伍,骨干近5000人,已建成或即将建成五个与催化相关的国家重点实验室,具有较强的研究实力。基础与应用基础研究涉及面都较广,取得了一些有特色、有创新性的成果。

分子反应动力学研究已取得一些好的研究成果,建立了分子束实验装置。分子反应动力学国家重点实验室最近也已建成,成为国际上拥有这类装置的少数国家之一。在分子激发态光谱和分子间传能以及态一态反应动力学方面已取得一些新结果,少数工作已经达到国际先进水平。特别是近来发现了锗烷和硅烷高泛频区光谱的局域振动模

的转动结构,并作了理论分析,取得了具有突破性的进展,受到国际同行的重视。界面反应动力学的研究已经起步。

胶体与界面化学,在个别领域中,作出了有特色、达国际水平的系统工作。开始应用一些新方法、新技术研究有序组合体体系,特别是关于LB膜、囊泡、双分子膜、胶团精细结构的研究。与特性材料有关的均一、高分散体系的研究也有明显的发展。

电化学在研究队伍、仪器设备和已取得的成果等方面,都在国际上占有一席之地。近年来,在电化学研究方法(包括谱学电化学技术)、界面电化学及光电化学等领域,取得了一些达国际先进水平的成果。

化学热力学已有一支一定规模的研究队伍。建立了相当数量的溶液热力学实验室,其设备和研究力量已达到或接近国际同类实验室的水平。建立起了低温和中低温绝热式热容测量装置,达到或接近国际最好水平。细胞生长过程的量热研究已开展少量工作。我国研究化学统计的人数不多,但已开展的非平衡态统计理论在化学中的应用(高分子反应的固化理论、溶胶—凝胶相变的标度理论)的研究已取得国际先进水平的成果。我国物理化学界在非平衡态、非线性领域已开展了少量研究工作,但工作层次较低。

光化学研究有了重大进展,已建立了一批能稳定进行研究工作的实验室及队伍;在稳态和瞬态光化学研究方面,获得了一批重要的值得称道的成果。

2. 我国物理化学的研究发展战略

我国物理化学近、中期的发展目标,建议定为:对国际普遍重视的学科前沿,集中力量进行跟踪,力争在一些基础好的领域能重点加以突破,并达到国际先进水平;加强对国民经济有重大应用前景的研究领域的支持,为我国经济腾飞作出更大的贡献;加强对学科发展有重要意义的薄弱环节的建设,使在一些重要的研究领域能跟上国际发展的步伐。争取经过一段较长时间的艰苦努力,使我国物理化学学科在总体上达到国际先进水平。为此建议,将优先发展的领域分为下述三个层次,分别提出不同要求、采取不同措施、给予相应支持。

对具有重大理论意义的基础研究,可以国家重点实验室为依托积极开展国际合作研究与学术交流。培养高水平的学术带头人,建立一支结合国情的研究队伍与较完善的学科体系。争取在本世纪末,21世纪初,在一些重要的基础理论研究领域,达到或保持国际先进水平。

(责任编辑 刘先曙)