

未来化学学科的发展趋势

王 夔*

(北京大学医学部 北京 100101)

摘要 回顾了 20 世纪化学学科的发展,明确提出化学在推动人类进步和科技发展中起了核心科学的作用;论述了未来化学学科发展趋势和研究模式;探讨了相关学科中的基本化学问题。

关键词 化学,回顾发展方向



1 20 世纪的回顾

1.1 对科技发展的基本考虑

人类对物质世界的利用和改造的能力逐渐提高。最初,人类活动只为满足生存的基本需要,后来就进一步要求满足日益增长的生存质

量的需要,到 20 世纪后期才认识到,要在保证生存安全的前提下提高生存质量。在满足人类生存、生存质量和生存安全的要求方面,科技进步起了巨大的推动作用。

1.2 核心科学的作用

1.2.1 为人类进步提供物质基础

进入 20 世纪,人类开始遇到人口增长、资源匮乏、环境恶化等问题的威胁。化学在解决这些问题时具有核心科学作用。其主要表现在三个方面:

(1) 化学不但大量制造各种自然界已有的物质,而且能够根据人类需要创造出自然界本不存

在的物质。

(2) 化学能够提供组成分析和结构分析手段,使我们能在分子层次上认识天然以及合成物质和材料的组成及结构,掌握和解释结构-性质-功能的关系,从而能够预测、设计和裁剪分子。

(3) 化学掌握了决定化学过程的热力学、动力学理论,而且能从理论上指导新物质(如催化剂)和反应新条件(如高压、高温、超临界状态)的设计及创造,因而能够达到自然过程不能达到的目标。

1.2.2 在相关学科的发展中起了牵头作用

(1) 牵动其它学科向分子层次发展。在 20 世纪,整个自然科学领域中出现过一次大变化,即所有物质科学都向分子层次发展。这一发展趋势与化学的牵头作用有关。例如,生物学从描述性科学发展成为 20 世纪末的前沿学科,在很大程度上依靠化学提供的理论、概念、方法,甚至试剂和材料。在化学和天文学相互促进下,天文学进入分子水平,并且从研究天体扩展到星际空间,诞生了宇宙化学。

(2) 化学研究带动其它学科的过程研究。化

* 收稿日期: 2000 年 12 月 14 日

学作为研究物质世界各种变化的科学,使我们逐渐掌握了物质变化的规律和各类化学反应的机理,并在此基础上认识化学过程;揭示自然界物质变化的本质。因此,化学与其它学科融合之后分化出许多研究各种化学过程的学科。

(3) 化学研究带动了材料科学的发展。人类从利用天然材料到创造和利用合成材料是人类历史上的一大关键性进步,是化学发展的里程碑。包括合成化学、高分子化学、催化化学、过程化学等。

(4) 化学实验方法学推动其它学科在分子层次上观察和测定物质的变化过程。化学研究不断建立各种分析和检测方法,检测物质组成、形态、结构,分析理化性质,推动各个学科的发展。新测试原理和技术往往是打开新领域的钥匙。例如由点滴分析到多孔板技术,成为生物学的重要实验手段。其后再融入固相合成形成、组合合成技术,又推动了高通量筛选技术的发展。

2 未来化学的地位与研究模式

2.1 未来化学的作用和地位

未来化学在人类生存、生活质量和安全方面将以新的思路、观念和方式发挥核心科学的作用。可概括为:

(1) 化学仍是解决食物短缺问题的主要学科之一。

(2) 化学在能源和资源的合理开发和高效安全利用中起关键作用。

(3) 化学将继续推动材料科学发展。

(4) 化学是提高人类生存质量和生存安全的有效保障。

2.2 21 世纪化学的研究模式

从 21 世纪初期化学发展的总趋势看,目前化学研究应该把握几个原则:

(1) 微观与宏观相结合。

(2) 静态研究与动态(过程)研究相结合。

(3) 复杂系统的简化研究与回归复杂系统相结合。

普遍认为未来化学将在与其它学科综合研

究中取得突破。这种综合将会产生若干新的领域,是未来科学的生长点。

我们可以提出以下几个研究模式:

(1) 从实际问题中抽出化学问题来研究。

研究天、地、生任何物质体系的变化规律都需要化学的理论和方法。要发挥化学理论和方法的作用,在解决具体的、复杂的实际问题的同时,注意从中寻找、提炼化学科学中的新问题来研究,从而深化和丰富化学学科。

(2) 吸收其它学科的新理论和新结果孕育化学生长点。

(3) 与其它学科融合开拓化学新领域。

由两个或几个不同学科的理论、概念和方法融合,产生新的理论、概念和方法,并有可能产生一个新的研究领域,重组成一个新的学科。

(4) 把握动向和时机提出新的思路和研究方向。

在继承与创新之间,必须把握动向和时机,提出新的思路和研究方向;同时必须随时调整研究模式,适应学科发展和面临的新问题。

(5) 重视化学学科的自身发展与整体科学技术的发展相结合。

重视化学学科的自身发展和建设,研究本学科的基本问题,即纯化学问题。纯化学研究要逐步深化,以发展化学科学的新理论、新方法。只有这样,才能解决其它学科向化学提出的问题。

3 相关学科中的基本化学问题

3.1 生命科学中的基本化学问题

生命体系中的基本化学问题是什么?看法很不相同。有人从现代生命科学的前沿中寻找化学问题;有人主张通过研究生物物质的结构-功能关系和作用机理,进一步模拟和应用它们;有人认为应该研究应用目标(如开发新药)中的化学问题。

是否可以认为,生命科学中的基本化学问题应该是当前研究生命系统屡屡遇到的、各种生物系统所共有的问题。那么,以下几个方面应是主要的基本问题。

(1) 生物大分子之间、生物大分子与小分子

之间的各种相互作用的规律。

(2) 关于生物体系的多层次结构(特别是分子以上细胞以下的高级结构)与功能的关系。

(3) 生命体系复杂过程的化学研究。

3.2 材料科学中的基本化学问题

(1) 分子结构-分子聚集体高级结构-材料结构-理化性质-功能之间的关系,特别是定量关系。

(2) 合成功能分子与构筑高级结构的理论和方法。

(3) 分子器件的研究。

(4) 仿生材料研究。

(5) 智能材料研究。

3.3 实现可持续发展的基本化学问题——绿色化学和环境化学

可持续发展基本战略包含保证人类(现在和未来)生存、生存质量和生存安全三方面的内容。其中基本化学问题分属于两个学科,即环境化学和绿色化学。

环境科学向化学提出的基本问题已经从早期的分析监测方法和环境治理方法转向环境过程研究:

(1) 环境过程化学:环境中的化学过程的跟踪、分析、模拟和预测。

(2) 环境生物化学:研究天、地、生相互作用的基本化学反应,特别是人和生物对外来物质和能量所做的应答以及人类生活生产活动对环境影响的化学基础。

绿色化学的主要化学基础问题是:

(1) 改变现有生产的化学合成路线和工艺路线,包括环境友好的原料、介质和反应条件及原子经济性,使其成为保证人类可持续发展并与生态环境协调发展的洁净、节能、节约的生产方式。

(2) 用新的环境友好的、对人类和生物无害的化学品,取代现在使用的有害化学品;用新的工作方法代替原来的有害工作方法。

4 21 世纪的发展方向

4.1 寻求结构多样性的研究与功能研究结合

未来一段时期内合成化学将要开拓若干新

领域:

(1) 寻求结构复杂性和多样性的目标结构应该包含高级结构。因此合成化学既研究传统的分子合成化学,也应研究高级结构,特别是高级有序结构的构筑学(Tectonics)。

(2) 组合化学是基于与传统合成思路相反的反向思维,加上固相合成技术,并受生物学大规模平行操作(如用多孔板操作)启发而产生的。组合化学不是一种技术,而应该看到以它为基础的化学研究的生长点。首先,要探索适于平行合成的反应;其次,寻找以可更换的合成子为基础的合成反应。另外,平行合成要求有平行检测配合。

(3) 发现和寻找新合成方法,包括为可持续发展提供新反应、新路线。此外,基于结构-功能关系设计合成新功能分子或功能材料:基于分子或合成子组装的合成,构筑高级结构的研究。包括控制大分子缠绕、折叠和有序聚集研究(多层次);基于模拟生物材料形成过程的合成方法研究等。

4.2 复杂化学体系的研究

(1) 复杂体系中的多层次结构。

(2) 尺度效应和多尺度问题。

(3) 复杂体系过程问题。

4.3 化学信息学和高效计算机信息处理

要加速化学信息学研究和化学信息库的建设。

(1) 功能分子信息处理的理论和方法。

(2) 与生物学衔接的化学信息学。

(3) 与化学反应和化学过程衔接的化学信息学。

4.4 新实验方法的建立和方法学研究

当今国际上科学研究的领先权,在很大程度上取决于研究方法和研究手段的先进程度。化学研究首先要发展先进的研究思路、研究方法以及相关技术,以便从各个层次研究分子的结构和性质的改变。应该建立时间、空间(能够分辨作用位点和变化位点)的动态、原位、实时跟踪监测技术。要研究各层次结构和各个尺度物质的物

理化学特性的测试技术。为适应各种复杂混合物成分分析的需要,须研究分离-活性检测联机技术,以实现高效、高选择性的分离、高灵敏度分析鉴定和结构分析与功能筛选一体化的技术。总结和建立新分析原理,建立自己的方法学。

化学分析仪器的小型化、微型化及智能化也是应该注意的方向。

化学还应有适当的方法和仪器去研究微小尺寸复杂系统中的化学过程(如扫描显微技术),要积极引进生物学和物理学方法为我所有。

4.5 跟踪、分析、模拟化学反应过程

化学有三个基本武器:用分析手段测定物质的组成和结构;用合成手段制造物质;用对化学过程的认识去控制化学过程。过程科学是现代化学工程学的重要基础。化学反应过程也是人类与环境相互作用的基础。

化学将会利用现代科学技术手段揭示化学变化的瞬态面貌,及时观察最快的化学反应过程和其中的各种效应,阐明决定化学反应速度的各种因素和反应机理。

但是更多的过程是相对慢过程,而在真实系统和实际问题中可能极快的反应和极慢的过程互为因果或互相牵制。过程的化学研究必然向复杂过程研究发展。

参考文献

- 1 王佛松,王夔,陈新滋等主编. 展望 21 世纪的化学,北京:化学工业出版社,2000.
- 2 2015 年化学学科发展专题论坛. 化学进展,2000,12(4): 409—462.

The Development Trend of Chemistry

Wang Kui

(Peking University, 100101 Beijing)

The development of chemistry in twentieth century is reviewed. The chemical researches have been and are now still playing utmost important roles in the progress of human being and of science and technology. Based on the current status of chemistry and relevant sciences, the modes, themes and the topics of chemical sciences in the near future were outlined.

王 夔 北京大学医学部化学生物学系教授。中国科学院院士,中国科学院学部主席团成员。1949年毕业于燕京大学化学系;其后在燕京大学及北京大学化学系读研究生。曾任北京医学院药理学系主任、北京医科大学药学院院长。1987—1991年任天然药物及仿生药物国家重点实验室主任。1994—1998年任国家自然科学基金委员会化学学科主任。早年研究分析用有机试剂的结构与功能关系,寻找分析功能结构。60年代研究金属离子水解聚合的络合掩蔽。80年代以来,转向细胞层次的生物无机化学研究,用这种方法研究了若干病理和毒理过程的化学基础。