

21世纪是信息科学、合成化学和生命科学共同繁荣的世纪

徐光宪

北京大学化学学院

1. 20世纪的化学取得了空前辉煌的成就，但未获得社会应有的认同。

化学的核心是合成化学，是以人工合成或从自然界分离出新物质供人类需要为中心任务的。因此20世纪化学的成就可用合成或分离出的新物质的数量和质量（重要性和用途）来衡量。1900年在《美国化学文摘》(CA)上登录的，从天然产物中分离出来并确定其组成的，和人工合成的已知化合物只有55万种。经过45年翻了一番，到1945年达到110万种。再经过25年，又翻一番，到1970年为236.7万种。以后新化合物增长的速度大大加快，每隔10年翻一番，到1999年12月31日已达2340万种。所以在这100年中，化学合成和分离了2285万种新物质、新药物、新材料、新分子来满足人类生活和高新技术发展的需要，没有一门其它科学能像化学那样在过去的100年中，创造出如此众多的新物质。

2. 20世纪发明了七大技术，最重要的是信息技术、化学合成技术和生物技术

报刊上常说20世纪发明了六大技术：(1) 信息技术 (2) 生物技术 (3) 核科学和核武器技术 (4) 航空航天和导弹技术 (5) 激光技术 (6) 纳米技术。但却很少有人提到包括合成氨、合成尿素、合成抗生素、新药物、新材料和高分子的化学合成（包括分离）技术。

上述六大技术如果缺少一二个，人类照样能够生存。但如果失去哈勃在1909年发明的用锇作催化剂的高压合成氨技术，世界粮食产量至少要减半，60亿人口有30亿要饿死。哈勃因而在1918年获诺贝尔奖。C.博施改进了哈勃流程，又获1931诺贝尔奖。所以国外传媒把 Haber Process 评为20世纪最重大的发明。

如果没有合成各种抗生素和大量新药物的技术，人类不能控制传染病，无法缓解心脑血管病，平均寿命就要缩短25年。如果没有合成纤维、合成塑料、合成橡胶的技术，人类生活要受到很大影响。信息技术的核心是集成电路芯片，这是化学合成硅单晶片上经过光刻生产的，计算机的存储器材料也是化学合成的，其它部件用了大量合成高分子材料。又如核电站的关键是核燃料，而核燃料铀、钚等的生产和后处理、废水处理等都是化学工业。激光、航空、航天、导弹和纳米等技术无不需要化学合成的高分子材料。所以如果没有化学合成技术，上述六大技术根本无法实现。这些都是无可争辩的事实。

但化学和化工界非常谦虚，从来不提抗议。我们应该理直气壮地大力宣传20世纪发明了七大技术，即化学合成（包括分离）技术和上述六大技术。在20世纪的七大发明中，人类最迫切需要的，对人们的生活和世界经济的发展影响最大的两大发明是信息技术和合成化学技术。再过30—50年人类对生物技术需要的迫切性和生物产业的规模，才有可能超过信息产业和合成化学产业。所以21世纪是信息科学、合成化学和生命科学共同繁荣的世纪。

3. 化学是一门中心科学，与八大新兴学科产生了许多交叉学科，但化学作为中心学科的形象反而被其交叉学科的巨大成就所埋没。

(1) 化学在“数理化天地生”六门传统科学中是承上启下的中心科学。

(2) 化学又是一门社会迫切需要的中心科学，化学与人们的生活有非常紧密的联系。

(3) 化学是与信息、生命、材料、环境、能源、地球、空间和核科学等八大新兴或朝阳科学(Sun-rise sciences)都有紧密的联系、交叉和渗透的中心科学。

化学与八大朝阳科学之间产生了许多重要的交叉学科，但化学家非常谦虚，在交叉学科中放弃冠名权。例如“生物化学”被称为“分子生物学”，“生物大分子的结构化学”被称为“结构生物学”，“生物大分子的物理化学”被称为“生物物理学”，“固体化学”被称为“凝聚态物理学”，溶液理论、胶体化学被称为“软物质物理学”，量子化学被称为“原子分子物理学”等。

这样化学这门重要的中心科学(Central science)反而被社会看作是配角，是伴娘科学(Bridesmaid science)而不受重视。世界著名的《自然》杂志也为化学家鸣不平，发表了评论。评论中提到“当其他学科从自己的成就中声名远扬时，化学往往发现本学科中最辉煌的成就的名声被其它学科所占有。”哈佛大学化学教授 George Whitesides 也说：“许多化学中最有趣的部分往往被称作别的名字。我从来没弄清化学家们是怎么回事。他们总是过于谦虚和本分。他们发现了这些有趣的技术，别人把它们拿走了，他们居然不喊不叫也不抱怨。你从来不会发现一位生物学家会容忍别人把他们所做的东西这样拿走。”化学家的谦虚本是美德，但因此吸引不到优秀的年轻学生，这个问题就大了。

4. 21世纪化学的四大难题

4.1 第一世纪难题：合成化学难题—化学反应理论

建立严格彻底的微观化学反应理论，既要从初始原理出发(From first principle)，又要巧妙地采取近似方法，使之能解决实际问题，包括决定某两个或几个分子之间能否发生化学反应？能否生成预期的分子？需要什么催化剂才能在温和条件下进行反应？如何在理指导下控制化学反应？如何计算化学反应的速率？如何确定化学反应的途径等，是21世纪化学应该解决的第一个难题。

对于这一世纪难题，应予首先研究的课题有：(1) 充分了解若干个重要的典型的化学反应的机理，以便设计最好的催化剂，实现在最温和的条件进行反应，控制反应的方向和手性，发现新的反应类型，新的反应试剂。(2) 在搞清楚光合作用和生物固氮机理的基础上，设计催化剂和反应途径，以便打断CO₂，N₂等稳定分子中的惰性化学键。(3) 研究其它各种酶催化反应的机理。酶对化学反应的加速可达100亿倍，专一性达100%。如何模拟天然酶，制造人工催化剂，是化学家面临的一大难题。(4) 充分了解分子的电子、振动、转动能级，用特定频率的光脉冲来打断选定的化学键—选键化学的理论和实验技术。

4.2 第二世纪难题：功能结构化学难题—结构和性能的定量关系

这里“结构”和“性能”是广义的，前者包含构型、构象、手性、粒度、形状和形貌等，后者包含物理、化学和功能性质以及生物和生理活性等。虽然W.孔恩从理论上证明一个分子的电子云密度可以决定它的所有性质，但实际计算困难很多，现在对结构和性能的定量关系的了解，还远远不够。所以这是21世纪化学的第二个重大理论难题。

要优先研究的课题有：(1) 分子和分子间的非共价键的相互作用的本质和规律。(2) 超分子结构的类型，生成和调控的规律。(3) 给体-受体作用原理。(4) 进一步完善原子价和化学键理论，特别是无机化学中的共价问题。(5) 生物大分子的一级结构如何决定高级结构？高级结构又如何决定生物和生理活性？(6) 分子自由基的稳定性和结构的关系。(7) 掺杂晶体的结构和性能的关系。(8) 各种维数的空腔结构和复杂分子体系的构筑原理和规律。(9) 如何设计合成具有人们期望的某种性能的材料？(10) 如何使宏观材料达到微观化学键的强度？例如“金属胡须”的抗拉强度比通常的金属丝大一个量级，但还远未达到金属-金属键的强度，所以增加金属材料强度的潜力是很大的。又如目前高分子纤维达到的

强度要比高分子中的共价键的强度小两个数量级。这就向人们提出如何挑战材料强度极限的大难题。以上各方面是化学的第二根本问题，其迫切性可能比第一问题更大，因为它是解决分子设计和实用问题的关键。

4.3 第三世纪难题：生命现象的化学机理—生命化学难题

生命活动的过程，可以用也必须用化学过程来理解。虽然生命过程不能简单地还原为化学过程和物理过程的加和，但研究生命过程的化学机理，就是从分子水平来了解生命，可以为从细胞、组织、器官等层次来整体了解生命提供基础。充分认识和彻底了解人类和生物的生命运动的化学机理，无疑是21世纪化学亟待解决的重大难题之一。例如：

(1) 要了解生命的化学机理，最重要的是了解如何调控。这就是**化学生物学**的任务：如何用配体小分子的钥匙去打开生物大分子的锁。人类估计有4万个基因，它们表达的蛋白质约有25万种，这就是29万把锁。要找到能激发或抑制这些基因、蛋白质的配体小分子，就是钥匙，需要58万把，才能调控生命，现在只知道5000个，不到1%。过去，要选一把钥匙（药物）至少合成数以万计的化合物。现在用组合化学的方法，可以大大提高筛选比，但还需要合成几千万个新化合物。找到了这些钥匙后，与生物学家、医学家共同合作，人类就可以避免疾病的痛苦，享受150岁的天年。

(2) 哈佛大学化学教授 Schreiber 所创建**化学遗传学**，为开创化学蛋白质组学，化学基因组学（与生物学家以改变基因密码来研究的方法不同）奠定基础。

(3) 搞清楚光合作用、生物固氮作用，以及牛、羊等食草动物胃内酶分子如何把植物纤维分解为小分子的反应机理，为充分利用自然界丰富的植物纤维资源打下基础。

(4) 人类的大脑是用“泛分子”组装成的最精巧的计算机。如何彻底了解大脑的结构和功能将是21世纪的脑科学、生物学、化学、物理学、信息和认知科学等交叉学科共同来解决的难题。

(5) 了解从化学进化到手性和生命起源的飞跃过程。如何实现从生物分子[biomolecules]到分子生命[molecular life]的飞跃？如何制造活的分子(Make life)，跨越从化学进化到生物进化的鸿沟。美国加州 Scripps 研究所的化学家 Julius Rebek 认为在化学与生物学边界真正开创性的工作是在通过化学手段合成生物系统努力。他说其中最大的挑战是从“设计图纸合成出活体细胞，以及有生物活性的分子，并重新创造新陈代谢。”他又说：“这是纯化学问题，在取得成功以前，还不会变成生物学。”换句话说，如果化学家得不到支持来做这些开创性的工作，则生命科学的发展会受到很大的限制。

(6) 研究复杂、开放、非平衡的生命系统的热力学，耗散和混沌状态，分形现象等非线形科学问题。

4.4 第四世纪难题：纳米尺度难题

现在中美日等国都把纳米科学技术定为优先发展的国家目标。在复杂性科学和物质多样性研究中，尺度效应至关重要。尺度的不同，常常引起主要相互作用力的不同，导致物质性能及其运动规律和原理的区别。

纳米粒子体系的热力学性质，包括相变和“集体现象（Collective phenomena）”如铁磁性，铁电性，超导性和熔点等与宏观聚集态有很大的差异。当尺度在十分之几到10纳米的量级，正处于量子尺度和经典尺度的模糊边界(fuzzy boundary)中，此时热运动的涨落和布朗运动将起重要的作用。例如金的熔点为 1063°C ，纳米金(5-10nm)的融化温度却降至 330°C 。银的熔点为 960.3°C ，而纳米银(5-10nm)为 100°C 。

当代信息技术的发展，推动了纳米尺度磁性（Nanoscale magnetism）的研究。由几十个到几百个分子组成的分子磁体表示出许多特性，如量子隧穿效应、量子相干效应等。纳米粒子的比表面很大，由此引起性质的不同。例如纳米铂黑催化剂可使乙烯催化反应的温度从600°C降至室温。

又如电子或声子的特征散射长度，即平均自由程（mean free path）在纳米量级。当纳米微粒的尺寸小于此平均自由程时，电流或热的传递方式就发生质的改变。所以纳米分子和材料的结构与性能的基本规律是21世纪的化学和物理需要解决的重大难题之一。

由此可见，21世纪的化学是有伟大的目标和难题需要我们去解决的。与物理学相比，物理的难题重于认识世界。研究物理学的难题，需要超高能加速器和航天飞机上的磁谱仪等大型科学工程为基础，是我国国力难以承受的。而21世纪化学的重大难题和突破口则偏重于改造世界和保护世界，有更现实的目标，不需要大型科学工程的支持，对化学的研发（R&D）投入，通常有较高的回报率。21世纪是生物学大发展的世纪，但现代生物学是建筑在分子水平上的生物学，所以研究化学难题对生命科学的发展重要意义。如果淡化化学的重要性，减少化学的R&D投入，在大学中吸引不到优秀的中学生来报考化学专业，那么对国民经济和生命科学的发展都是十分不利的。

5. 21世纪的化学不但要认识世界、改造世界，而且还要保护世界

化学家缺少品牌意识，没有在社会上树立化学的美好品牌。化学与化工被认为是污染源，这也是中学生不愿报考大学化学专业的原因之一。其实，造成环境污染的不仅仅是化学，更重要的是森林植被的破坏，水土流失，沙漠化和沙尘暴，汽车尾气排放，煤燃烧，还有微电子工业等。而分析、监测治理环境污染的正是化学家。化学家已提出绿色化学的奋斗目标。化学家不但要认识世界、改造世界，还要保护世界。

化学界有一个奇怪的现象，大学中的化学教授很多是长寿的。例如美国加州大学柏克来分校的Hildebrand教授逝世时101岁，南京大学的戴安邦先生逝世时99岁，北京大学现有83岁以上的资深院士6位，其中张青莲先生95岁，身体非常健康，张滂先生86岁，还骑自行车到系办公。这是因为化学家知道那些化学品有毒，并熟悉如何防护。正如医生接近病人多，但知道如何防护，所以也是长寿的。因此中学生的家长们可以不必为此顾虑子女报考化学专业。

从上面的讨论可以看出，20世纪的化学取得了辉煌成就，21世纪是信息科学、合成化学和生命科学共同繁荣的世纪，化学发展的前程繁花似锦，期待社会对化学的重要性给予应有的认同，希望有更多的优秀年轻学生选择化学专业，共同迎接化学的黄金时代，实现我们人类美好的远景。

6. 对中国化学会的几点希望

1. 一门学科的声望不是微不足道的小事，希望中国化学会和全体化学界同仁共同努力，利用各种场合，各种机会宣扬20世纪化学的辉煌成就和21世纪化学发展的美好远景，树立化学的美好形象，鼓舞和吸引优秀中学生来报考化学专业。

2. 希望中国化学会在组织机构上作相应的调整，以适应交叉学科发展的需要。

3. 建议在本届理事会通过决议，修改会章，设立多名团体单位理事，发挥团体会员的积极性，收取较高的团体会员会费，拓展学会经费来源。