

包括高分子和生物大分子的操纵实验结果反映出了分子在拉伸过程中的变形特征^[4],对于了解高分子的基本性质有重要价值

对于大分子的研究活动的一个重要方面是对处于凝聚或结晶状态的大分子进行结构和性质分析,这方面的研究涉及精细结构的表征以及构象变化,后者则可借助于荧光方法及近场光学方法,获得关于单分子的光谱学信息,并成为研究大分子构象的有效途径之一。如已经发表的单分子荧光光谱和喇曼光谱等结果^[5],这方面的研究活动与 SPM相结合为深入认识生物大分子的结构和性质提供了有利条件。

利用 SPM方法围绕单个和少数分子进行的原位和实时检测研究虽然时间并不长,但已经在一些方面产生了重要影响。除了对用其它实验技术得知的研究成果给予直接证实之外,还提供了更为详细的信息。这方面的努力不仅对有关学科领域提出更多更高的挑战,还将极大地促进扫描显微技术的发展。

参 考 文 献

- [1] Bai C L, *Scanning Tunneling Microscopy*, Springer-Verlag, 1995.
- [2] Stipe B C, Rezaei M A, Ho W, *Science*, 1998, 280, 1732
- [3] Wilbur J L, Biebuyck H A, MacDonald J C, Whitesides G M, *Langmuir*, 1995, 11, 825.
- [4] Rief M, Oesterhelt F, Heymann B, Gaub H F, *Science*, 1997, 275, 1295.
- [5] Xie X S, Trautman J K, *Annu. Rev. Phys. Chem.*, 1998, 49, 441.

'98诺贝尔化学奖简介

张红星

(吉林大学理化所 长春 130023)

徐 昕

(厦门大学化学系 厦门 361005)

1998年10月13日,瑞典皇家科学院宣布:将1998年度诺贝尔化学奖授予两位成就卓著的量子化学家——美国加利福尼亚大学的沃尔特·库恩(Walter Kohn, 1923年出生)和美国西北大学的约翰·波普尔(John A. Pople, 1925年出生),以奖励沃尔特·库恩的密度泛函理论和约翰·波普尔的量子化学计算方法对化学的巨大贡献。在瑞典皇家科学院发布的公告中,量子化学被提到前所未有的重要地位——量子化学理论和计算的丰硕成果被认为正在引起整个化学的革命。量子化学家几十年的辛勤耕耘得到了充分的肯定。这标志着古老的化学已发展成为理论和实验紧密结合的科学。

化学来源于生产实践,百余年来,一些重要的化学原理和规律,如门捷列夫元素周期律,

都是根据实验总结归纳出来的。元素周期律的本质在 1925 年量子理论出现后才真正得以揭示。从 1927 年 Heitler-London 用量子力学处理氢分子起, 化学的一个新分支——量子化学悄然兴起。量子化学的每一次重大突破, 都深刻地影响并推动了整个化学学科的发展。从 50 年代到 80 年代, 由于提出了新的化学概念和化学思想, 量子化学曾 4 次荣登诺贝尔奖领奖台。这些新概念和新思想不断加深了人们对化学现象微观本质的认识。本年度量子化学第 5 次赢得诺贝尔化学奖, 是因为 60 年代初所建立的新理论和积蓄了 30 几年的计算方法学在今天使化学发生了革命性变化, 使人们从理论计算可以预测分子的结构和性质, 为最终实现分子设计的梦想开辟了道路。

长期以来, 化学家一直探索一种理论方法以理解分子中原子间的成键行为, 企盼通过这种理论方法成功地计算分子的性质, 阐明分子结构和性质之间的关系。本世纪初量子力学的诞生提供了打开这扇方法之门的钥匙, 但将量子力学应用于复杂的化学问题却仍显得遥遥无期。量子力学奠基人之一狄拉克曾清楚地阐明这一棘手的问题: “我们已经找到了从数学上处理大部分物理问题和全部化学问题所需要的基本定律, 但从这些基本定律所推导出的数学方程是如此复杂, 以至于它们无法求解。” 沃尔特·库恩和约翰·波普尔正是发展了量子化学理论和计算方法, 解决了如此重大的科学问题而荣获 1998 年诺贝尔化学奖。

狄拉克的观点在 1929 年是无可非议的, 因为人脑的运算确实无法解决预期的庞大的计算。进入 60 年代, 计算机的发展使整个科学的格局悄然地发生了变化。当人们应用计算机求解那些复杂的数学方程时, 量子化学家看到了曙光, 几代人的企盼有了希望。30 几年来, 量子化学家对狄拉克的悲观观点严肃地提出了挑战, 进行了不懈努力和尝试。今天, 当我们步入 90 年代末, 所看到的是量子化学理论和计算的丰硕成果正在引起整个化学的革命。沃尔特·库恩和约翰·波普尔是这 30 多年发展过程中的杰出代表。沃尔特·库恩的密度泛函理论构成了简化以数学处理原子间成键问题的理论基础, 是目前许多计算得以实现的先决条件。约翰·波普尔系统地建立了量子化学方法学, 被应用于化学的各个分支。

随着计算机科学的飞速发展, 量子化学计算已成为与实验技术相得益彰、相辅相成的重要手段。几十年来, 量子化学计算方法不断地发展与完善, 今天已可以对物质的结构和性质进行细致的分析。传统的分子性质计算基于每个单电子运动的描写, 使得计算本身在数学上非常复杂。沃尔特·库恩指出, 知道分布在空间任意一点上的平均电子数已经足够了, 没有必要考虑每一个单电子的运动行为。这一思想带来了一种十分简便的计算方法——密度泛函理论。方法上的简化使大分子系统的研究成为可能, 酶反应机制的理论计算就是其中典型的实例, 而这种理论计算的成功凝聚着无数理论工作者 30 余年的心血。如今, 密度泛函方法已经成为量子化学中应用最广泛的计算方法。

基于薛定谔等人所建立的量子力学基本方法, 约翰·波普尔发展了多种量子化学计算方法, 波普尔的方法使得在理论上研究分子的性质以及它们在化学反应中的行为成为可能。

简单地说,应用波普尔的方法(程序),人们把一个分子或一个化学反应的特征输入计算机中,所得到的输出结果就是该分子的性质或该化学反应可能如何发生的具体描述,这些计算结果通常被用于形象地注释或预测实验结果。通过设计 GAUSSIAN 程序,波普尔使他的计算方法和技术容易地被研究者所采用。该程序的第一版本 GAUSSIAN70 于 1970 年完成。此后,他和合作者相继推出了从 GAUSSIAN76 到 GAUSSIAN 98 八个版本的逐步完善的程序库系列。GAUSSIAN 程序库已成为当今全世界在大学、研究所及商业公司中工作的成千上万化学工作者的重要研究工具。

时至今日,量子化学已应用于化学的所有分支和分子物理学。它在提供分子的性质和分子间相互作用的定量信息的同时,也致力于深入了解那些不可能完全从实验上观测的化学过程。概括起来,量子化学已在或将在以下方面的研究中作出举世瞩目的成绩:分子的稳定结构和激发态结构;分子的电学、磁学和光学性质;分子谱学(从 NMR 到 X 射线衍射);化学和生物化学中的反应机制;给定位能后的分子间相互作用(用于研究大分子,溶剂效应,晶体堆积和催化作用)等。毫无疑问,量子化学所取得的巨大成就得益于两位获奖者所创建的不朽的理论和方法学。正是由于以沃尔特·库恩和约翰·波普尔为代表的量子化学家的辛勤劳动,我们才能看到今天理论化学和实验化学携手探索化学奥秘的局面。

从 50 年代起,我国的老一代理论化学家就十分重视中国的量子化学发展。唐敖庆先生是其中的典范。唐敖庆先生把自己毕生最主要的精力贡献在量子化学研究和培养中国的量子化学专业人才上。他主要倡导并亲自领导举办了数届量子化学讲习班和研讨班,极大地推动了中国量子化学的发展,为国家培养了一批又一批的量子化学英才。我国优秀的量子化学家在量子化学基础理论、微观反应动力学和量子化学应用等方面取得了骄人的成绩,并在“七五”、“八五”和“九五”连续三次承担国家自然科学基金重大项目。现在,我国完整的量子化学研究梯队已经形成。几代量子化学工作者正在继续攀登理论化学新的高峰,携手迈向 21 世纪。