

第五章 物理化学进展

王鸿飞¹, 杨俊林²

¹中国科学院化学研究所

²国家自然科学基金委化学科学部三处

本章介绍物理化学学科的基本特点、前沿动态、研究重点和重要应用,旨在使从事化学及相关学科领域的科技工作者和研究生能够较为全面准确地了解物理化学及其相关学科的发展趋势和动态、研究方法、涉及领域及增长点,以及物理化学学科在自然科学和社会发展中的重要作用。本章也为科技管理部门的有关人员以及相关产业的决策者提供一个了解物理化学学科的内容、方法特点和社会影响的一个渠道。本章的目的在于尽量提供与物理化学学科的基础和研究前沿相关的具有参照性和可操作性的事实、依据和意见。

(一) 正确认识化学和物理化学

1.1 化学面临的学科声望问题

化学科学与社会多方面的需求有关。由于化学能满足人们的需要,它一直是现代社会中国民经济的重要支柱。化学学科的基础研究对于社会的需要至关重要。由于化学学科的研究几乎涉及到物质科学和分子科学的所有方面,因而被称之为“中心科学”(Central Science)^[1]。化学学科的范围和前沿领域在不断地发展和演进,其范围和内容在过去二十多年来进一步扩展,深入到了生物学、纳米技术、材料科学、计算科学和过程系统工程中的先进方法和工程控制等等更为广泛的领域之中^[2]。这些发展进一步表现在化学科学的基础研究和化学、材料及生物技术工业之间的相互影响和作用越来越复杂和综合。这必然对化学学科的基本方法、手段和理论的交叉和综合提出了更多的挑战 and 更高的要求。物理化学是研究化学学科中的原理和方法,研究化学体系行为最一般规律和理论的学科,是化学的理论基础^[3]。理所当然地,物理化学学科也面临了更多的挑战 and 更高的要求。

更为复杂的是,现代科学发展不仅依赖于科学家和工程师的努力,以及工业界和商业界的专业支持,而且其基础部分还更进一步依赖于政府、大学和非政府组织的支持。这些支持的力度和有效程度,大大依赖于社会中公众对不同科学学科的基本了解和认识。因此,对于一个学科的内涵和外延的认识,包括对于一个学科在社会中的地位、影响和贡献,以及潜在的科学与技术能力的认识,在很大程度上已经成为需要得到广泛关注的问题。现代社会中面临一个问题是,一个学科的基础性越强,内涵越是广泛,其重要性、潜力和应该得到支持的程度就越是面临得不到被充分认识的可能,这进一步又会使得这些基础学科在社会经济资源和人才的优化配置方面得不到应有的支持。由于现代社会的可持续稳定发展越来越依赖于基础科学和技术应用的协调发展,这样的情况从而成为一个社会中非常危险的事情。化学学科,尤其是化学学科的基础内容,在此方面已经面临着严重的公众形象和社会认可问题。

近年来，国际科学界已经逐步认识到了整个化学学科在社会中存在着被人遗忘和忽视的危险。报纸、杂志、电视和广播节目中大量报道物理学和生命科学方面的重要进展，以及这些进展在社会生活中的重要作用和影响，却极少正面报道化学科学的进展和重要的社会影响^[2,4,5]。1996年，美国哥伦比亚大学化学系 Ronald Breslow 教授在就任美国化学会主席时指出^[5a]，虽然化学和化学工业为现代人类社会生活的改善带来了最为重要的贡献，但是在近年来的电影和电视等公共媒体中化学家往往是以坏人和唯利是图的生态破坏者或胁从者的形象出现。Breslow 说，他作为美国化学会主席的一大任务就是要通过各种方式力争改善化学和化学家在公众中被歪曲的形象。Breslow 还强调，“如果我们的领域（化学）不能够得到（社会）应有的正确评价和欣赏，学生将得不到鼓励来选择化学作为未来的职业，公众将不会支持资助化学的研究和教育的需要，化学、制药和生物技术工业中的创新将无法稳固发展。^[5b]”

同样的主题，也贯穿在 2001 年英国《自然》杂志发表的题为《化学一埋没在自己成功之下的学科》的社论^[6a]，以及《化学的品牌价值》的专题报道之中^[6b]。该《自然》杂志社论指出：

“在多学科的时代，化学面临着自己的学科声望的问题。那些在化学交叉边沿工作的化学家们应该认同并赞美他们的知识基础，而那些在化学核心领域工作的化学家们更值得这样做。

“化学的目标是认识分子的结构和功能，研究分子间的相互作用，所有这些都是科学事业中最重要核心。然而，这一学科却为它无所不在的能力付出了昂贵的代价：化学没有得到足够的认同和重视。

“什么是真正的化学？这一学科不再局限于它在学术界的正式的分支，如有机化学、无机化学和物理化学领域，它还包括了人们早已熟悉的催化、有机合成、高分子和材料科学。此外，化学还已经发展到其它不太熟悉的领域：如在‘化学遗传学’中的小分子的使用、用组合技术对候选药物的筛选、以及发展出涉及其它所有科学领域的新分析技术。化学是一门纯粹的多样性学科，比方说美国化学会（ACS）就有 30 个部门，因此几乎不可能对化学进行一般化的概括。

“也许对化学进行明确的定义是不必要的。但是，缺乏精确和可辨识的‘品牌’意味着化学学科很容易被误解，而那些在化学领域工作的人们则没有得到应有的尊重。这就是化学的公共形象出现问题的根本原因。化学家们长期以来容许了化学学科以外的人来对化学进行定义，让外行们来说化学是什么，或者什么不是化学。

“对公众而言，化学科学与与它同名的化学工业常常意味着同一概念。因此，化学就是喷射烟雾的烟囱和被污染的河流，而不是挽救生命的药物和太空时代的新材料。对其它领域的研究人员、政策的制定者，特别是年轻的科学家来说，化学总是被看作是一门成熟的学科，这一学科最重要的发现和最激动人心的工作都已经做出。但另一方面，化学家们讲述的却是另外一个不同的故事。他们在激动地谈论着分子电子学的前景，可持续发展对能源的需要所提出的挑战，以及由人类基因组序列而产生的药物定物所带来的机会。

“科学前沿对化学的需求

“一门学科的声望不是一件微不足道的事。如果化学在新世纪的成就要达到上个世纪的一半，那么它必须努力吸引到最优秀的年青科学家。要这样做，公众形象是非常重要的。更进一步讲，学术界和工业界的基础研究都需要得到及时的促进。大公司里化学的基础研究正在受到研究经费紧缩的困扰。而大学里基础化学的研究也因生物学节节高升的支持而黯然失色。正如一位化学家所悲叹的：‘生物学现在对人们的吸引力太大了’。

“但是，对科学事业和社会来说，化学家和化学从来没有像现在这样至关重要、必不可少。随

着学科间的界线越来越模糊，基本的化学技能比如合成和分析对新出现的交叉学科将更重要。的确，越来越多的化学家聚集到学科边界，与生物学、物理学家、工程师和计算机科学家们合作。

“在这边缘领域的研究充满的生机、神奇和巨大的利益。在利用医学研究图像探究发育，和利用合成细胞膜研究分子识别和分子结合等项目中，化学家的作用至关重要。要在蛋白质组学方面取得成功，需要蛋白质折叠的化学分析法和建立在质谱学基础上的分析技术。化学的自组装技术正在推动纳米技术的蓬勃发展。这些引人注目的交叉学科研究为化学提供了一个机会让自己的形象重现光芒。不过，化学家们首先必须学会赞美并让公众了解自己的贡献。

“化学失去自己光辉形象的一个原因是它的竞争对手在不停地表现自己最优秀的部分。其中的原因很多、也很微妙，但是，正如哈佛大学的 George Whitesides 教授所说，化学家们的谦逊可能是原因之一。如果真是这样，化学家们就应该亮出他们的本生灯，露出锋芒。

“弥补公众对化学认识的不足

“化学界逐步认识到他们所代表的学科的形象正在发生变化。德国将 2003 年定义为化学年，因为德国化学学会要公开庆祝化学学科的多样性。在英国，皇家学会的化学部正在放松会员标准，让那些正在从事化学研究而没有经典化学背景的研究人员也能加入。美国化学学会试图通过新的分类、学术杂志和会议等方面的努力，在那些新兴的研究如纳米技术、蛋白质组学等领域上打上化学的烙印。

“这是在正确的方向上迈出的值得欢迎的进步。但是，如果化学要为自己未来的成就提出更有力的权利和要求，那些跨出学科的界线、进入备受关注的多学科研究领域的前沿化学家们就必须让人们听见自己的声音。他们应该向同事显示自己的作用，并作出努力保证让新闻界知道化学的贡献。

“这样做可能并不容易，在这方面生物学更容易让非专业人士理解。但是，最近在美国圣迭亚哥召开的美国化学会上，只发布了少量的新闻稿。如果化学家希望有更好的形象，他们不能再谦虚和含蓄。

“也许到那时，化学科学的聚光灯才可能会更多地又照耀到‘核心’的化学课题上，这些课题也值得更多的关注。值得关注的领域的确很多。最近，美国麻省理工学院的化学系主任 Stephen Lippard 组织了一次对美国化学家的民意调查，列出了处于发现的成熟边缘的基础化学的 20 个最有希望的领域。这些领域包括分子自我复制、寻找能够打破惰性化学键的试剂和反应通道、为某些反应专门设计的催化剂，以及消除某些溶剂等。Lippard 说，这些通过更多地控制其中分子的化学反应所带来的发展和更好的结果，正在推动化学界一场‘静悄悄的革命’。

“但是，化学家们确实应该帮助他们的专业化学会告诉大学生、学校和媒体，化学研究中的突破能够带来什么。Lippard 没有明确指出他的名单里有希望的领域的应用前景，以及这些领域的发展对整个世界可能带来的影响。他说：‘我们相信，我们在这些领域的同事会把这些东西联系起来’。

“这确实是一次被错过的机会。如果更多的化学家建立这种化学发展与应用前景和社会影响的联系，大胆地讲出潜在的益处，那么他们的贡献就不会被轻易忽略。总之，革命总不会是鸦雀无声的。”

1.2. 物理化学：在“无处不在”中消失？

从《自然》杂志的社论来看，整个化学学科都面临着这些问题已经非常严重，决不是危言耸听。而作为整个化学学科基础的物理化学学科，则一直面临着更为严重的公众形象和社会认可问题。最近，周午纵博士在《物理化学的现状和发展趋势》一文中更进一步指出^[7]：“当谈到物理化学的发展趋势时，我们可能注意到物理化学的独立学科特点日益淡化。其原因主要有二。1，各其它学科应用物理化学方法日益普遍。2，物理化学研究对象与其它学科的结合更加紧密。因此，在许多场合，物理化学已经不再被认为是一个独立的学科。”其实，早在 1922 年，伟大的美国物理化学家 G. N. Lewis 就不无忧虑地指出了物理化学学科的这一特征（或问题）。他说^[8]：“事实是物理化学再也不存在了。那些被称作物理化学家的人们发展了大量的有用方法…，而当这些方法的应用增长得越来越

多，(物理化学)也就变得越来越难以用我们以往的学科分类方法来定义了。”这都是物理化学学科难以被人们正确认识的原因。

从 Lewis 那里可以看到，早在 20 世纪 20 年代，物理化学就呈现出了相当强的综合性、交叉性学科特征。现代物质科学的前沿发展和重要突破正是建立在其综合性、交叉性之上的。随着研究的越来越深入和专门化，不仅是化学与物理学、生物学等学科疆界出现逐步淡化的趋势，传统的化学学科分类的疆界也出现明显的淡化。从整个化学学科来看，在现代化学的研究中出现的许多交叉和综合性的研究学科，如纳米化学与物理，化学生物学等，都并不局限于传统的有机、无机、分析、和物理化学的学科之内，并且需要运用到各种相关的基础理论，实验方法，以及技术手段。在这种交叉与综合的过程中，整个化学学科也逐渐形成了两个相互独立又紧密结合的方向，即：以合成和应用为目的的合成与材料化学，和以研究化学结构与反应的特征与规律为目标的基础与理论化学。这两个方面中，前者研究具体分子和物质体系的知识，因而是化学中直接面对应用和社会需求的部分，直接导致新材料，新药物等的开发和应用，从而也是比较容易被社会所直接了解的部分；而后一方面，则是前者的基础，不仅为前者提供新的思想、方法和研究手段，而且还在大学和研究机构中为前者训练各种高素质的化学人才。如果我们仔细了解自然科学各个学科重要的研究成果，就会发现作为化学和物质科学基础的物理化学其实是“无处不在”^[7]。现代物理化学的核心内容，在过去的 100 多年中经历了热力学、结构与量子化学和反应动力学的不断发展，为现代化学与物理学在原子和分子的量子与微观层次上的研究提供了坚实的理论和知识基础，及强大的实验研究方法手段，深入到了物质科学的各个方面的应用中去，从而使得物理化学的原理、方法和手段不仅具有生命力，而且日益强盛。

1.3. 物理化学和物理化学家能作什么？

物理化学学科的基础性和重要性，以及其往往不被正确认识的尴尬状况可以用物理化学家 Gordon E. Moore (戈登·摩尔) 的故事来说明。

Gordon E. Moore 是 Intel 公司的创始人、前 CEO 和总裁。他是信息时代最为重要的开创性人物，人们常常听到的描述信息时代半导体工业发展趋势的“摩尔定律”(Moore's Law) 就是他在 1965 年首次提出的。Moore 曾于 1990 年获得美国国家技术奖章 (National Technology Medal)。Moore 的个人财产列全球前 50 名，他是仅次于微软公司创始人 Bill Gates 的最大的公共事业捐款人和慈善家，到 2004 年为止 Moore 已经捐出了超过 65 亿美元。Moore 于 1950 年在美国加州大学 Berkeley 分校获得化学专业学士，1954 年获得美国加州理工学院化学系物理化学博士学位，博士学位论文题目为：亚硝酸、氯胺和二氧化氮分子的红外光谱研究及硝酸分子的光化学分解观测。Moore 是一位经过现代实验物理化学训练的科学家。他在博士期间 Moore 在 J. Am. Chem. Soc. (到 2004 年为止 SCI 引用共 71 次)，J. Chem. Phys. (2004 年 SCI 引用分别为 110 和 8 次) 杂志上共发表了三篇研究论文^[9]。Moore 的研究内容和研究背景，是气相小分子光谱学和光化学，属于现代物理化学的核心研究内容之一。

Moore 自己认为，他的物理化学背景是他被“晶体管之父”、诺贝尔物理学奖获得者 William Shockley (威廉·肖克利) 于 1957 年招进自己开创的半导体公司 (Shockley Semiconductor Laboratory, 肖克利半导体实验室这家公司的成立

标志着美国硅谷高技术产业的开端)的原因^[10],实际上半导体工业中的关键问题是半导体材料的物理化学。Moore 并不是 Shockley 当时招聘的唯一的物理化学家。Shockley 最初招聘的人才中相当一部分是物理化学家,和一些材料化学和材料物理学家。这些人中的 8 位重要骨干,包括 Moore 本人,于 1957 年退出了 Shockley 的公司,在硅谷成立了硅谷历史上极为重要的仙童半导体共司(Fairchild Semiconductor)。这就是半导体产业发展历史上著名的“八叛徒”事件。在仙童半导体共司 Noyes 和 Moore 等人和 Texas Instruments 公司的 Jack Kilby (2000 年 Nobel 物理学奖获得者)先后发明了最早的集成电路。11 年后,Moore 和材料物理学家 Robert Noyes 等人于 1968 年退出了仙童公司而创建了现在无人不知的制造计算机芯片的 Intel 公司^[10]。物理化学家对开创硅谷高技术产业的另一个重要事实是,Shockley 成立其公司的资金是由著名的物理化学家 Arnold O. Beckman 所投资的 100 万美元。Beckman 曾经是加州理工学院化学系教授,著名的 Beckman 仪器公司(Beckman Instruments)的创始人。

但是物理化学家们开创信息技术时代的巨大贡献并没有被公众和政府了解。当然,全世界绝大多数物理化学家们自己往往也根本没有意识到他们自己中的一些人对现代信息社会的到来做出了如此重要的贡献。如果我们到网络上输入“Gordon Moore”或者“戈登 摩尔”,就很容易找到关于 Moore 的介绍。但是,绝大部分的网页中都会说,Moore 在加州理工学院获得的是“化学和物理学博士学位”(“Ph.D. in chemistry and physics”),或者干脆是说“获得了物理学和化学两个博士学位”,而不是说获得了“物理化学博士学位”(Ph.D. in physical chemistry)。一般的公众和官员往往没有对物理化学的基本了解,他们会非常自然地容易把物理化学看做物理学和化学两门学科,因此自然很难看到物理化学作为自然科学中最为重要的一门基础科学在社会进步和技术发展中的重要作用和影响。

美国硅谷是公认的全球高科技圣地,它的开创和形成过程中有不少物理化学家做出了巨大的贡献。我们并不需要夸大物理化学的作用和影响,但是我们应该如何正确地认识物理化学,和它的内容、方法、手段、科学地位和社会作用呢?这个问题,的确值得每一个关心物理化学学科发展的人,以及关心科学和技术以及社会的可持续发展的人们三思。

(二) 物理化学学科的成长过程及基本内容

2.1. 要么是物理化学,要么是核物理

物理化学学科在科学和技术上的作用是与物理化学研究的内容和特点紧密相关的。我们知道,物理化学是研究化学学科中的原理和方法,研究化学体系行为最一般规律和理论的学科,是化学的理论基础。一般来讲,物理化学可以被认为是使用物理方法研究的那部分化学,也是那些与特定化学物质有关的那部分物理,所以物理化学是处于物理学和化学的分界线上,并没有非常严格和清晰的区分。所谓物理化学(Physical Chemistry)和化学物理(Chemical Physics)本身也没有严格的区别,往往被当成侧重点稍有不同的同一个学科。比如,Zeitschrift fur

Physikalische Chemie 杂志又被称作 International journal of research in physical chemistry and chemical physics (研究物理化学和化学物理的国际性学术杂志)。

物理化学关注的内容是化学反应的本质。其实早期的许多物理学家和化学家都可以被称作物理化学家, 比如发现气体定律的 Robert Boyle (罗伯特·玻义耳), 提出万有引力定律的 Issac Newton (牛顿), 研究电磁转换本质的 Michael Faraday (法拉第), 完成电磁理论的 James Maxwell 等, 他们都称自己是自然哲学家 (Natural Philosopher)。目前人们基本上公认 1887 年是物理化学作为一个学科诞生的年份, 因为在那一年出现了第一份专门研究物理化学的杂志 Zeitschrift fur Physikalische Chemie^[11]。该杂志的创办人 Wilhelm Ostwald 在 1877 年他的硕士论文中就宣称:“现代化学需要变革。”他的努力的目标是将化学家们的注意力“从参与化学反应的物质转移到化学反应本身的研究上来”^[12], 这自然包括化学反应的条件 (热力学)、进程 (动力学), 以及研究化学反应的条件和进程的物理方法。物理化学就是在这样的环境和目标下形成一门研究化学反应本质的学科的。

17 世纪以来, 早期的物理化学研究内容, 主要是将力学的原理应用到化学问题上来。19 世纪末, 通过热力学原理研究气体、液体和固体中的化学问题成为物理化学研究的主流, 人们关注化学中的热、光、电等现象, 物理化学中的电化学、胶体和表面化学、气体运动学、化学动力学、化学热力学以及光化学等都在这一时期得到了发展。因此, 物理化学研究的内容和手段一开始就非常地广泛。早在 1920 年代, 核磁共振 (NMR) 技术和量子理论还没有发展和应用到化学问题之前, G. N. Lewis 就声称:“(自然)科学要么是物理化学, 要么是核物理 (Science is either physical chemistry or nuclear physics)。^[8]”按照 Lewis 的说法, 物理化学将包括化学、生物学、地学、宇宙学, 以及大部分的物理学。同样, 照此说法, 随着核磁共振技术等的发展, 今天的物理化学还包括部分核物理的内容。Lewis 的定义是目前对物理化学的最为广义的一个定义。这样一个过于广泛的定义, 的确表明了与物理化学相关的研究范围的广泛程度, 在很大程度上也的确表明物理化学研究范围的广泛程度, 的确往往会超出人们能够想象的范围。比如说, IBM 目前花巨资正在研制的最快的代号为蓝色基因 (Blue Gene) 的超级计算机用以进行复杂的大分子分子动力学计算。一般公众谁能想到, 负责其计算方法的小组的是包括一群进行理论研究的物理化学家。

2.2 物理化学起源于欧洲, 成长于美国

许多物理化学的研究内容实际上可以比较容易地归属到其它相关的研究领域中去, 因此, 物理化学研究的内容非常广泛这一事实的出现, 并不完全是历史的必然。这实际上是与物理化学的发展历程有很大的关系, 特别是与物理化学在美国的成长过程很有关系。虽然大家都了解美国在大多数学科中都有相当重要的地位, 但是, 人们一般却忽略了美国的物理化学在世界中的影响处于绝对主导地位的事实。在美国国家科学院院士中, 与物理化学学科相关的院士人数占整个化学学科院士人数的一半以上, 这些人都是国际上最为著名的物理化学家。同时, 由于美国的物理化学范围最广, 这些物理化学家中的一些人在其它国家中往往会被归类为物理学家。

遗憾的是，Ostwald 的物理化学在欧洲并没有成长成为一门象在美国那样特别有影响的学科。其中的原因当然非常之多，但这与欧洲的科学和学术传统，以及化学与工业的关系有密切的关系。19 世纪以来，欧洲传统化学的力量通过推动化学工业的发展从而对社会产生了非常重要的影响，由于各种与当时的应用直接相关的化学学科相当发达，物理化学这一新兴学科的影响自然很难打破原来的学科格局。当时欧洲的物理学界也已经强大和成熟，因此，欧洲的许多从事物理化学研究的科学家往往会倾向于认为自己是物理学家或者更希望自己成为物理学家。另外，由于物理化学研究的内容非常广泛和相对琐碎，欧洲的大学数目有限，其学术任命结构并不容许在整个欧洲存在许多物理化学的教授职位。因此，学习物理化学的欧洲学生人数也相当有限。

物理化学作为一个学科起源于欧洲，但是物理化学却是在美国成长成为非常有影响的系统的学科^[12]。由于物理化学研究的基础性和开放性，因而更具有国际性，所以从一开始在欧洲的主要物理化学的实验室中就有许多从美国前来的留学学生和访问学者。这一景象，与那些与工业应用结合相对比较紧密的实验室颇为不同。这样，Ostwald 的物理化学就通过他的美国学生和访问学者大量地传播到了美国。据统计，在 1889-1905 年间，就有超过 45 位美国物理化学家在德国 Leipzig 大学 Ostwald 的实验室进行研究和访问，这些人回到美国后都成为美国各个最为著名大学的教师，这些人全都成为美国和世界物理化学领域的著名科学家，其中不乏 A. A. Noyes（美国麻省理工学院、加州大学 Berkeley 分校和加州理工学院化学学科的具有开创性贡献的人物），G. N. Lewis（Lewis 酸碱理论，现代光化学研究、Lewis 电子结构式）和 T. W. Richards（1914 年 Nobel 化学奖）这样的物理化学大家，也包括后来于 1896 年创办了美国物理化学杂志（Journal of Physical Chemistry）的 W. D. Bancroft^[12]。另外还有 Irving Langmuir（1932 年 Nobel 化学奖）等则进入了 Nernst 在德国 Göttingen 大学的实验室，而 Nernst 正是 Ostwald 以前的研究助手。

这些从欧洲回国的美国人成立的物理化学实验室数目，很快就超过了欧洲所有的物理化学实验室的总数。由于这些人均具有共同的科学背景和思想，因此，也给形成具有凝聚力的学术团体和组织准备了良好的基础。同时，这些人的回国正赶上了美国大学教育扩张的时期，因此，虽然物理化学研究在工业界和社会中在当时没有表现出非常实际的用处，但却在美国大学教育体系中找到了安身之地。John W. Servos 在《物理化学—从 Ostwald 到 Pauling》一书中研究这一段历史时指出^[13]，“物理化学在美国比在其它国家得到了更友好的接受，并不是因为美国的大学对抽象的研究有更强的承诺，也不是因为美国的商业界更愿意承担工业研究，而是因为当时美国的大学和学院正在以西方世界从未有过的速度增长，而物理化学家们当时也愿意和能够适应环境，使自己适应多面手和通才的角色，使自己成为这些成长的大学机构中的万事通（jacks of all trades）”。确实，物理化学家与其它学科的科学家的相比，在一个大学里成为与不同背景的学生和同事沟通和交流的科学教授的能力毫不逊色，并且有许多优势。因为这些原因，再加上美国当时并不存在界限特别明确的特别强大的科学学科，美国的物理化学家研究的内容才能够没有太大阻力地不断扩展，并且形成了具有重要学术和社会影响的物理化学学科和学术团体。简单地对比以下，物理化学在欧洲的发展情景则是相当不同的。

二战前，特别是二战以来，美国国家国防和工业界对基础和工业研究产生了巨大的需求，这种需求使得具有相对强有力的学科影响和学术团体的物理化学学科在大学象牙塔的抽象学术研究之外，得到了进一步的发展机会。由于物理化学研究内容的基础性和在解决复杂的实际物质科学问题中的重要性，物理化学学科的研究内容和影响扩展到了更为广阔的范围。反过来，这些范围更广的对国防和工业问题的研究，又提出了许多需要解决的物理化学基本问题。因此，物理化学的研究内容在其固有的核心内容之外，得到了更为广泛的发展。因此，在了解和看待物理化学学科，以及其它学科的内容的时候，不能够完全脱离社会环境和历史阶段来看问题。在一个社会中被看做物理化学的内容的东西，在另一个社会中有可能被看做其它学科的内容。同样，我们在规划和了解一个学科的未来发展的时候，也应该充分了解在不同的社会环境和历史阶段下不同的任务和发展可能性。

2.3 物理化学是大国和强国的基础学科

从物理化学过去 100 年来在美国的传播和发展，我们可以清楚地看到，物理化学的基础性和研究内容的广泛性，表明物理化学是一个大国的学科，这包括更多的大学和更为灵活的学术制度。同时，物理化学也是一个强国的学科，没有广泛的国防和工业需求，物理化学的重要作用也无法充分发挥出来，在产业结构单一和缺乏与物质科学相关的高技术产业的社会中，物理化学往往只能局限在象牙塔之内，无法发挥在社会中的重要作用。物理化学的这些特征不仅表现在美国的物理化学发展历史中，从英国的物理化学发展历史也可以得出相同的结论。这两个国家，物理化学学科的学术团体是最为发达的。

从历史的经验来看，中国物理化学学科在未来的发展，不仅取决于物理化学学科为工业和国防研究输送了多少人才和解决了多少实际的问题。在现阶段以及未来 20 年或更长的时间内，更为重要的是，中国的物理化学学科究竟如何成长成为一个具有良好学术基础和学术团体的学科。具体来说就是为中国的大学培养和引进了多少具有前沿研究能力和教育能力的物理化学和普通化学教授，如何在物理化学前沿上开展了哪些重要的和前瞻性的研究，如何形成和培养出一个健康的和具有广泛包容性的物理化学学术共同体。从历史发展来看，无论物理化学的研究内容多么广泛，无论物理化学学科培养出来的人才可能在社会和工业中能够起多大的作用，物理化学学科的发展必须抓住与基础和前沿研究密切相关的核心内容，抓住大学与化学基础教育相关的核心内容，才能使得本学科不会成为无根之木，才能够具有强大的生命力并得到真正的发展，也更符合物理化学作为所有化学相关学科的基础的学科特点和规律。

公认的物理化学学科核心内容包括化学热力学，结构化学和反应动力学，以及与胶体界面化学、电化学、光化学和催化等具有重要应用背景领域相关的化学热力学，结构化学和反应动力学等基础性和原理性的内容。物理化学学科又被分为实验物理化学和理论物理化学两个方面。实验物理化学包括与在分子和分子相关层次上关于化学体系的物理性质的所有内容、手段和方法；而理论物理化学则包括与分子或分子相关层次上的电子结构、统计力学、化学动力学和计算机模拟

相关的理论和计算内容、手段和方法。

美国国家科学基金会（NSF）化学部认为^[14]，实验物理化学在实验方法上包括整个电磁波频谱范围的频域和时域光谱技术，当然也就是包括从高能射线、X-射线、紫外-可见光、红外和微波、NMR 等结构和动力学光谱手段，还包括通过分子态和质量选择的化学体系的时间分辨动力学，以及分子束中的反应性碰撞散射等技术；实验物理化学在化学体系上包括从单个或隔离状态下的分子或离子，到团簇、液体和固体体系，也就是所有的物质状态下的化学体系；实验物理化学在化学性质上包括分子结构，基态和电子激发态的势能面的形态，单分子和双分子化学过程的化学动力学，团簇、界面和溶液中的溶剂/溶质相互作用等；实验物理化学还包括与原子、分子和光物理学、生物物理学、大气化学，以及材料科学相关的许多内容、手段和方法。

美国国家科学基金会（NSF）化学部认为^[14]，理论物理化学的目的是要对化学性质和反应性提供分子和分子相关层次上的理解和诠释，其应用范围包括所有的化学体系，包括小分子到大分子及其聚集态、团簇和宏观分子体系，当然也包括生物学和材料科学中的分子体系体系；同时，理论物理化学还包括与化学体系的实验热力学和凝聚相动力学中实验数据与理论诠释的内容；理论物理化学还包括与原子、分子与光物理学、材料理论、生物物理学，尖端计算科学研究有关的内容、手段和方法。

美国国家科学基金会（NSF）的看法并不是唯一的标准。但是 NSF 是美国国家通过立法建立的正式国家机构，其使命是促进科学进步、促进国家和社会的健康、繁荣和社会福利，以及保障国家安全为目标的科学基金会。因此，NSF 对物理化学学科的基本内容和学科前沿的认识无疑是值得我们参考和比照的。中国国家自然科学基金委化学科学部针对近三年申请和资助自然科学基金的情况，也指出了我国物理化学学科的研究现状如下^[15]：

“从近三年（2002-2004）受资助项目情况来看，结构化学、理论化学、分子动态学方面的工作达到较高研究水平，得到国际同行重视，是物理化学中有竞争力的研究领域，但研究的深度有待进一步发展。溶液结构、动态结构与各种新的谱学方法研究的申请人较少。催化是物理化学最活跃的领域之一，近年来国内研究工作在国际上的影响和地位有较大幅度的提高，但在新催化研究方法、新催化反应体系、新催化材料等方面的工作相对较少。手性催化、电催化和生物催化等研究领域已引起申请者的注意，申请与受资助项目数开始有所增加，光催化领域的申请与受资助数明显增多。国内催化领域的研究队伍较大，每年申请项数约占本学科总申请项数的 30% 以上，但资助率低于学科平均水平（2004 年基本持平），需要引起注意。电化学和胶体与界面化学领域申请与资助数基本稳定，虽然有些领域已经形成自己的特色，但总体上研究起点不高，偏向跟踪性课题较多。化学热力学（热化学、溶液化学）近几年结合生命和材料科学，研究领域有所拓宽，但缺少具有特色的创新项目，值得强调的是非平衡态热力学研究的申请项目较少。光化学、高能化学、化学信息学等领域近几年有所发展，但与国际前沿还有较大差距，资助项目数也不多。”

相比较之下，中国物理化学学科在物理化学学科基础内容和学科前沿方面、在基础方法和技术手段方面、在与基础人才教育和培养方面与国际上、特别是美国具有较为明显的不同侧重和特点。总体来讲，中国物理化学学科在学科基础与研究前沿上的确是与国际上的学科布局与研究前沿存在较大差距。

(三) 物理化学学科前沿与发展趋势的回顾^[16]

1994年，科学出版社出版了自然科学学科发展战略报告《物理化学》专集。它是由国家自然科学基金委化学科学部组织的由具有广泛代表性的学科专家和学科管理人员组成的物理化学研究组经过几年的调研所撰写的具有重要指导意义的学科发展报告。此份报告是我国第一份公开出版的物理化学学科的发展战略报告，其出版对于我国的物理化学学科发展具有非常重要的意义，并且在过去10年中对物理化学及相关学科的发展产生了重要的影响。

基金委化学科学部前主任徐光宪院士在该报告前言中指出，“研究报告的任务是：通过广泛的调查研究，了解学科发展现状和趋势，明确学科发展前沿领域；结合我国国情和社会主义现代化建设需要，确定物理化学学科发展的政策建议，以便充分发挥科学基金对全国物理化学基础性研究工作的导向作用。”^[3]在起草“物理化学进展”之前，回顾这一具有指导性报告中的基本内容和结论，并且总结物理化学学科在国际和国内近年来的发展状况，具有非常重要的意义。

在此份报告的前言中，徐光宪总结到：“进入20世纪以来，物理化学的发展一日千里，尤如一匹奔腾的飞马，这匹马有四条腿：(1) 化学热力学；(2) 化学动力学与分子反应动力学；(3) 结构化学与分子谱学；(4) 理论化学...在四条腿中经典化学热力学的理论已很成熟，所以物理化学的发展前沿应是其余三条腿，加上有广泛应用前景的催化科学和表面物理化学（包含电化学），所以物理化学学科前沿应包括下述四个方面：(1) 结构化学与分子谱学 (2) 理论化学 (3) 分子反应动力学 (4) 催化科学和表面物理化学。本书提出三个物理化学的学科前沿及活跃的研究领域：(1) 分子反应动力学；(2) 分子工程学；(3) 表面与界面物理化学。”^[3]

报告强调了物理化学作为化学理论基础及重要组成学科的重要性。比如，“据统计，1901—1988年获诺贝尔化学奖者共110位，其中近70位是物理化学家或从事物理化学领域研究的科学家。这说明，近90年来化学学科中最热门的课题及最引人注目的成就，60%以上集中在物理化学领域。”^[3]

报告还指出，物理化学学科发展的趋势和特点可以概括为：“宏观研究与微观研究相结合，但更多地向微观层次深入；体相研究与表面相研究相结合，但更多地向表面延伸；在微观研究的领域中，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，并进入更高的层次。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，迫切需要物理化学这一方面的投入。”

此份报告对于我国1994年以后的物理化学近、中期的发展目标,建议为:“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,为我国经济腾飞做出更大的贡献;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。”^[3]报告还建议将优先发展的领域分为“具有重大理论意义的基础研究”、“具有重要应用前景的基础研究”、和“一些具有前瞻性或探索性或新派生出的领域的基础研究”,并根据各自的特点,分别进行支持。

报告对我国物理化学发展目标、优先发展领域及措施提出了如下具体建议:

a. 具有重大理论意义的基础研究

- 1)分子反应动力学;分子激发态、瞬态的物理化学。
- 2)分子剪裁、分子设计与分子工程。
- 3)表面、界面物理化学。
- 4)化学键理论的基础研究。
- 5)与生命现象相关的物理化学基础研究。

此类研究应以国家重点实验室为依托组织进行。国家基金委员会应给以强有力的资助,并力争国家其它有关部门在财力上给予大力支持。培养高水平学术带头人。鼓励积极开展国际合作研究及国际学术交流。提高我国在国际上的学术地位。争取本世纪末或下世纪初在一些重要领域达到并保持国际先进水平,建成结合国情与具有中国特色的研究队伍和学科体系。

b. 具有重要应用前景的基础研究

- 1) 国民经济中重要催化体系及其反应机制的研究;新催化材料的制备与应用。
- 2) 有序组合体、新型簇体系、纳米材料的物理化学。
- 3) 重要体系基础物理化学数据的系列测试与研究。

此类研究应与产业部门研究队伍相结合。除国家自然科学基金委员会给予较强资助外,应力争得到产业部门的协同支持。争取在本世纪末、21世纪初取得重要进展或突破。为国民经济发展做出重要贡献。

c. 某些具有前瞻性、探索性或可能成为新生长点的基础研究

- 1) 化学中分叉、分维、混沌等非平衡态、非线性问题的理论化学研究。
- 2) 高温、高压、低温、低压、临界态等极端条件下化学反应的物理化学。
- 3) 传统与新近发展的物理化学方法及技术研究。

此类研究的目的是,跟踪国际发展,维持队伍及研究方向的稳定,作好人才与知识储备,使一旦国际上有重大进展或突破时,能及时组织力量赶超。虽然对这类研究目前还没有条件给予重点支持,但应予以适当的资助和扶持。

今天来回顾1994年的这份《物理化学》自然科学学科发展战略报告,需要考虑到在1998年以来国家科学和技术发展战略的重大变化,也就是将重点转移到国家创新体系—包括知识创新和技术创新体系的建设这一背景上来。1994年的这份

报告的重点，主要集中在基本研究队伍和学科体系的建设基础上，面向国民经济中具有应用前景的研究，同时不放弃前瞻性、探索性和创新性的研究。从当时我国整体物理化学研究基础的基本情况来看是符合实际的，具有内在的合理性，并且影响和推动了过去10年来中国物理化学学科的发展。过去10多年以来，我们还是不能避免地一直存在对基础研究和创新性研究的重要性认识不够，对应用基础研究相对忽略企业的创新主体作用认识不足的问题。这在某种程度上也导致了我国物理化学学科研究在重大理论意义的基础研究方面，和具有前瞻性、探索性等方面的基础研究方面相对投入不够集中和进展较小，这特别表现在没有及时跟上许多1990年代以来发展迅速的一些重要物理化学前沿上。因此，我国物理化学的实际发展还是没有真正达到这份《物理化学》自然科学学科发展战略报告预期的目标。

根据国家对创新体系的指导原则，在强调知识和技术创新的前提下，基础研究首先需要强调的是基础性、前瞻性和创新性，技术创新要求以企业作为创新的主体。而且，创新的关键在于人才的培养和人才队伍的建设。基础研究和技术研究地开展和支持方式具有一个根本性的差别。在产业技术研究中，由于研究目标具有较为明确的目的性，产业市场扩展的速度受到多种社会、经济以及文化因素的限制，更由于知识产权保护或技术保密制度的作用使得技术研究的扩展大大落后于产品市场的扩展，所以跟踪性的研究在起步阶段很大程度上是站稳脚跟和进一步赶超的必要方法；但是，在基础研究和前沿的应用基础研究中，由于一方面对创新性具有更高的要求，而且信息传播的进步使得知识的传播更为自由，跟踪性的研究实际上总是非常容易变成低水平的重复，所以，基础和应用基础研究中，具有优秀的研究背景、研究能力和国际交流能力的人才的作用变得尤为重要。

因此，将学科资助的优先发展方向集中在具有知识创新前景的基础研究的学科前沿和发展方向上，通过对具有创新能力的优秀人才和人才队伍的支持，并且结合国家教育体系中正在发生的深刻变化来发展物理化学学科，包括大学规模和数量的扩大，以及研究型大学的兴起等，才是面向新世纪的物理化学学科前沿的重要目标。随着中国企业经营方式的逐步转制与管理模式现代化，以及中国正式加入WTO，应用和应用基础创新研究，会逐步地以企业和各国家重要应用部门为主体进行。这不仅是世界各发达国家的成功经验，也是成功建设国家创新体系的必然要求。所以，讨论物理化学学科前沿和发展趋势，必须要看到这些变化，并从物理化学学科创新的动力和创新的源泉处着眼。

那么，物理化学学科具有哪些创新特点？而最近20年来物理化学学科又有那些重要和基础性的研究前沿呢？

（四）物理化学的生命力和创新特点^[17]

物理化学无疑是化学和物质科学学科中最具有生命力和创新潜力的学科之一。物理化学作为化学和物质科学的基础学科，其创新性直接来源于它与物理、化学、生物和现代技术发展有着直接的交叉作用。物理化学的研究对象、研究方法和技术都在不断发展，并为相关学科提供了非常重要的质谱技术、光谱技术和高性能计算等关键技术和方法。

1986年诺贝尔化学奖获得者美国哈佛大学化学系教授，物理化学家杜德利·赫希巴赫教授在2000年发表于《物理化学年度评论》中的《物理化学研究50年》的文章中总结道^[18]：

“（理论物理学家）Freeman Dyson在他的Imagined Worlds一书中宣称，科学中新的方向更多地是由新的科学研究工具，而不是由新的概念所带来的。他说：‘由概念所推动的革命是用新的方式解释已有的事物。而由工具所推动的革命则是去发现必须得到解释的新的事物。’我需要补充的是，新的工具或者方法是通过旧的工具和方法以崭新的方式共生相互作用而产生的。”

中国古人也认为：“工欲善其事，必先利其器。”新的研究工具和研究方法上的创新，能够使我们新的未知领域做出最直接的发现，正是促进物理化学不断发展的最重要的动力和源泉。

第二次世界大战以来，整个化学研究在新的物理研究方法的影响下经历了巨大的变化。而最近二、三十年来新的物理研究方法和研究仪器的进展更进一步影响了生物医学和环境科学的发展。研究方法和实验仪器的进步，给化学学科带来的影响，是一场静悄悄的革命，使得化学从瓶瓶罐罐的古典化学时代进入了大量依赖于仪器分析的现代化学时代^[19]。这场革命，不仅改变了化学家的工作方式，而且在比较根本的层次上也改变了化学家的思维方式和化学研究的组织方式和社会行为。比如说，今天就几乎再也看不到一个化学家用基团反应这样的传统化学方法来推测自己合成的有机分子的结构，而是采用红外、紫外、质谱或者核磁共振这样的谱学分析方法来确定分子结构。在几十年前，掌握大量的基团反应是每一个合成化学家必须掌握的基本功，而现在它很可能已经是失传绝技。当然，通过新的工具，化学家可以较之以前更加轻而易举地确定复杂得多的分子结构甚至区分异构体。有谁可以知道今天的化学家看到一个分子的分子式时，他的想法会和大半个世纪以前的化学家相同吗？不可否认的是，这场革命正是建立在物理化学学科的对研究手段和方法的研究和认识基础之上。在历史上，一个重要的仪器方法从被认识发展到被化学家充分利用，往往会经历漫长和曲折的过程，比如，红外光谱就花了大约50年的时间才被合成化学和分析化学家所接受^[19]。但是，最近二、三十年来，新的分析方法和技术一般不到10年就被科学研究人员完全接受，比如隧道扫描显微（STM）技术和生物质谱技术等。

简要地回顾物理化学在过去50年来的发展，我们可以看到，从闪光光解技术，到纳秒甚至飞秒激光技术对化学反应过程的直接测量，到交叉分子束技术对基元化学反应过程的研究；从高真空技术、扫描显微技术（SPM），到非线性光学技术对界面物理化学科学的深入研究；从X射线对无机、有机和生物结构的精确测量，到现代质谱技术对团簇、生物分子的质量的精确测量，还有现代高分辨核磁共振光谱（NMR）技术对分子结构精确测定和生物成像研究；从光电子能谱，各种精细激光光谱技术对分子内部能态结构的精确测量，到单分子检测技术对单个分子化学行为的研究；从超高速计算技术发展对化学结构的量子化学计算，到对化学反应过程的能量、反应速率的计算；等等。过去50年来所取得的重要的物理化学进展几乎总是与物理化学研究手段的创新发展密切相关。

物理化学家不仅是先进研究手段的被动使用者，而且更是这些先进的实验技术和手段的积极开发者。由于分子结构和化学反应的复杂性，需要发展出许多专门的实验仪器和装置来对它们进行深入和细致的研究。因此，物理化学家们不断地在自己的实验室中设计和改进研究仪器和设备，通过将研究工具的不断改善，来获得对分子世界的深入认识，同时也大大推动了新的应用技术的发展，推动了其它学科的以及高技术产业的发展。一个重要的例子是对光谱和动力学的深入研究使物理化学家们发展出了大大加快人类基因组测序工作的快速荧光标记技术。徐光宪先生最近也特别指出了这一重要的事实，并讨论了作为现代理化分析技术基础的物理化学与整个基础化学学科在解决化学的两大核心任务和两大应用领域问题上面临的挑战^[4]。这一问题物理化学学科的创新和发展源泉主要来自新的研究工具和手段的开发和使用。因此，不断地发展新研究工具、手段和方法的能力，也就成为衡量物理化学学科的创新能力的重要标准。

遗憾的是，在我国的物理化学研究中，发展新研究工具和研究手段，乃至新的研究方法方面是最为薄弱的^[4]。实际上，我们即使在使用国外发展的先进研究手段和研究方法方面也表现得非常薄弱。这是因为，我们的主要的化学研究机构中具有激光化学、现代质谱、现代核磁共振、电子能谱等研究能力的屈指可数^[4]。我们的研究人员往往总是把先进仪器当做分析手段，而不是正在演进的研究技术。这种现状和思维方式不仅限制了我国物理化学的发展，同时也大大限制了我国其它相关物质科学领域的进步。比如说，在药物筛选和后基因组时代的蛋白质组工程中非常重要的现代质谱技术和生物大分子核磁共振技术，是在物理化学实验室中发展和完善起来的（2000年Nobel化学奖）。但由于我国缺乏这些方面的基础研究能力，我们甚至无法找到足够的具有现代质谱技术训练的人才来有效地从事这一方面的工作。目前在国外，特别是在美国，根据具有现代质谱研究训练的用户专门需要而改进设计的质谱仪可以在一天之内筛选测量数千个药物样品。因此，我们要在药物筛选、生物制药这些方面与之竞争，不是花大钱投入去买入昂贵的质谱仪就能解决的，必须要有对现代质谱研究相当熟悉的物理化学家加入到其中。由于缺乏物理化学方面的源头创新和基础训练而限制我们的高技术发展的例子还不胜枚举。

只有充分认识现代物理化学的发展对现代科学中物理、化学、生物和材料等物质科学的促进作用，才可以使我们不仅仅是把现代物理化学当作化学学科中的一个普通分支学科来对待。

（五）物理化学前沿动态、研究重点、相关领域和增长点^[20]

从 100 多年前诞生的时刻起，物理化学就是一门生气勃勃的科学。它始终和自然科学理论的最前沿紧密相联在一起。同时，它又与当前的应用热点密切联系。例如：近年来的蛋白质和核酸化学、纳米科学、环境科学等，无不与物理化学紧密相关。

要了解物理化学学科的前沿动态、研究重点、相关领域和增长点，最直接的办法是直接阅读物理化学及相关领域的重要学术期刊中的研究和综述论文、丛书和科学专著。从学术期刊中发表的第一手的新的研究论文中，可以直接了解到一

门学科的前沿的推进的脉搏，从相关的丛书和专著中，则能够感受到不同时期学科进展的总结和回声。

由于物理化学研究领域极为广泛，物理化学领域的学术杂志和期刊就超过120种。其中最为重要的学术期刊，应该首推美国化学会主办的 *Journal of Physical Chemistry A/B*，美国物理研究院主办的 *Journal of Chemical Physics* 两份杂志。*Journal of Physical Chemistry A/B* 在2003年共发表了3289篇文章，被引用61980次，在所有SCI收录的5907份科学期刊和杂志中列第34位；*Journal of Chemical Physics* 在2003年发表2694篇文章，被引用130931次，在SCI收录的5907份科学期刊和杂志中列第11位。其它在物理化学领域重要的杂志还包括 *Langmuir*（2003年1597篇文章，引用38487次），*Chemical Physics Letters*（2003年1771篇文章，引用43088次），*Chemical Physics*（2003年333篇文章，引用10534次），*Physical Chemistry Chemical Physics*（2003年784篇文章，引用6725次），*Journal of Computational Chemistry*（2003年201篇文章，引用9262次），*International Journal of Quantum Chemistry*（2003年302篇文章，引用5677次），*Journal of Catalysis*（2003年352篇文章，引用20903次），*Photochemistry & Photobiology*（2003年194篇文章，引用8360次），等。与物理化学前沿研究相关的期刊，实际上还包括重要的物理学、生物化学、生物物理学，以及材料等学科的重要期刊。因此从期刊种类和研究论文的总数来看，物理化学学科的研究内容的确是所有自然科学学科中最为广泛的。

因此，要从如此之多的物理化学期刊发表的文章中了解物理化学学科前沿动态和研究重点，以及近期及未来的发展趋势，是非常困难，甚至可以说是几乎无法完成的任务。了解物理化学学科的前沿动态和研究重点，以及近期及未来的发展趋势的最好办法，是阅读相关期刊或杂志中关于物理化学学科某一特定研究方向的综述文章。一般来讲，*Chemical Review*（2003年154篇文章，引用40466次）和 *Accounts of Chemical Research*（2003年101篇文章，引用17598次）发表化学领域中最为重要的综述文章，其中每年都有一定数量的物理化学领域的综述文章。对物理化学学科来讲，*Annual Review of Physical Chemistry*（2003年17篇文章，引用3768次）应该说是更为权威的物理化学学科的综述杂志。与 *Chemical Review* 和 *Accounts of Chemical Research* 中的文章相比，*Annual Review of Physical Chemistry* 更集中于物理化学领域中的重要问题和前沿，而前者往往更注重在整个化学学科中相对更为具有普遍性的问题。最近，张存浩先生对 *Annual Review of Physical Chemistry* 中近年来的内容及内容的变化做了一些研究和比较，给我们认识物理化学的前沿内容及其演变提供了一个重要的能够窥视全景的视角^[20]。

《物理化学年度评论》（*Annual Review of Physical Chemistry*）从1949年开始，每年出版一册，迄今已有55年历史。美国著名的生物化学家，原Stanford大学化学系教授 J. Murray Luck（1899-1993）在1931年创办了 *Annual Review of Biochemistry* 杂志。在此之前 Luck 在为当时他给学生和研究生教授生物化学课时发现文献太多，而很难系统整理，于是就产生了创办综述性生物化学杂志的想法，为研究人员、教授和学生提供系统的综述性生物化学材料^[22]。自1931年以来，*Annual Reviews* 系列逐步发展到包括三十个学科的内容，包括了生命

医学、物质科学和社会科学三个部分，到目前为止，其中生命医学包括 19 种（与物质科学部分有交叉部分），物质科学 10 种，社会科学 6 种^[21]，其中与化学相关的只有 Annual Review of Physical Chemistry(1949 年创办)和 Annual Review of material Research (1971 年创办)两卷。

Annual Review of Physical Chemistry 是 Annual Review 系列中创办相当早的，在 30 个科目中排名第四。Annual Review of Physical Chemistry 每年由该年度分卷主编拟定不同的、比较新颖的题目，每册约 20 章，邀请该领域方向的专家分别撰写，综述该领域方向的来龙去脉，已经解决和尚待解决的问题。从 1949 年以来，Annual Review of Physical Chemistry 基本上反应了不同时期物理化学基础研究领域中最为重要的所有进展，而且非常权威和具有时效性，平均每篇综述被引用 200 多次。

张存浩先生订阅了 Annual Review of Physical Chemistry 约 20 年，因此他通过自己的了解，对其在不同时期的内容和前沿问题进行了总结。张先生发现，该年度评论有些章的选题代表了化学中与物理化学相关的新的四五年级学科或者这些小学科的新动向，这些学科的研究平常一般研究者往往未能注意到其存在，因而可以拓宽阅读者的视野，并发现一些值得注意的新趋势，特别是在物理化学学科中新的交叉学科等新的生长点方面的一些发展。张先生指出，他在上世纪八九十年代开展的“共振多光子电离光谱的研究”，在工作开展初期就很得益于《物理化学年度评论》中的一些综述。

张存浩先生认为，大致说来，Annual Review of Physical Chemistry 的每一卷评论中都有几章写得非常好，很有参考价值，其中质量中等的也不少，个别章节也有写得不好的。但总的来说，通过对有关章节的查询阅读，科学家可以在短时间内对本行中某一专门项目的近期（大致为一年）发展趋势有比较全面的、概要的了解，所以具有非常高的参考价值。他总结到，如果靠自己阅读文摘或原文，大多数人是难以在同样长的时间内获得这种效果的。与以 Chemical Review 和 Accounts of Chemical Research 一级学科为背景的评论期刊比较，这套评论对于二三级学科对口的学者来说，内容更丰富。不难理解，由于 Annual Review of Physical Chemistry 每年只有 20 篇左右的综述文章，因此 50 多年来为 Annual Review of Physical Chemistry 撰稿的一共也就只有 1000 多人次的作者，其中还不乏几次撰稿的作者。这些作者都是物理化学相关领域中最为知名的学者，也包括一些非常知名的物理学家。值得注意的是，近年来撰稿者中中国人的名字也开始多了起来。其中 2004 年第 55 卷上，厦门大学化学系的田中群教授是第一位中国大陆受邀在 Annual Review of Physical Chemistry 上撰写综述文章的物理化学家^[23]。其综述内容为通过表面增强 Raman 光谱方法研究电化学界面的吸附和反应研究领域的最新进展。

张存浩先生将 1999—2003 年五年中 Annual Review of Physical Chemistry 目录内容列表如下，并且与 20 年前（1979—1983）的五年目录内容相比较，从中人们自然可以观察和判断物理化学学科的发展和走向。

1999—2003 年：

生物物理化学、晶体学、NMR、蛋白质折叠、DNA

与生物有关的金属中心的密度泛函理论

多原子分子中的核自旋变换

快速蛋白质折叠问题

气相中的多肽和蛋白质

蛋白质和大分子络合物中的大幅度形变

核酸的分子力学模拟

电子自旋共振的新技术

聚丙烯酰胺凝胶中及自由溶液中寡聚 DNA 的迁移特征

脉冲 EPR 谱学：生物学应用

1/2 及以上自旋：固体核磁谱学的展望

从折叠理论到折叠蛋白质：蛋白质的折叠和打开的模拟研究综述

生物分子的固体核磁：结构方法学及其在多肽和蛋白质纤丝上的应用

RNA 折叠中的早期事件

采用双量子固体核磁谱学的生物材料结构研究

胶体、膜、电化学、高分子、大分子、物理有机

过冷液体中的空间非均匀动力学

大分子溶剂化效应的广义玻恩模型

电双层间的有效相互作用

复杂流体模板法产生的自组装陶瓷

发光电化学过程

高分子吸附驱动的纳米结构自组装

单壁碳纳米管的一维电子性质的 STM 研究

共轭高分子作为分子材料：链构型和膜形态学如何影响能量传递和链间相互作用

凝聚相化学动力学和动态学，超快动力学

流体相转移的模拟

中子散射的化学应用

晶体结构分析中的运动和有序：测量和区分

相干非线性光谱学：飞秒动力学和控制

液体中的高阶光学相关光谱

憎水效应的分子理论

卤素离子水化的分子面貌：团簇处理

二维飞秒光谱学

气相化学动力学和动态学，态-态动力学、碰撞、激光化学、相干控制、超快动力学

非线性动力学和复杂反应机制的新处理方法

过渡金属团簇和小分子的反应

反应动力学的交叉束研究

HCP \leftrightarrow CPH 异构化：即时观察

电喷电离 FT 离子回旋加速共振质谱

从 ab initio 数据构筑分子的多维势能面

在热离子发射途中的延迟电离和裂解：静力学和动力学
稀有气体-卤素分子和团簇的动力学
经由波包相关函数的化学反应动力学的半经典计算
高压对分子的效应
多原子分子体系中的态态反应动力学：案例研究
红外吸收技术用于基元气相反应动力学的新进展
中性反应的交叉束研究：态分辨的微分截面
小过渡金属团簇离子的反应和热化学
弱键合络合物的光碎片平动谱：探测碎片间的相关终态分布
“拉伸”分子的动力学：以受激发射泵浦法研究高振动激发态分子
最简单化学反应中的散射共振
分子裂解的态分辨动力学
燃烧中重要化学反应的主方程模型
光电子的角分布

地球化学，宇宙化学，大气和环境化学

极地同温层云和卷云的化学和微观物理
大气中的有机微粒

量化统计力学，理论动力学

超越泊松-玻尔茨曼理论的离子效应
用于大系统的含时量子方法
金属表面的化学动力学
用于大系统电子结构的蒙特卡罗方法
以绝热通道技术实现激光诱导的布居转移
用密度泛函理论的从头分子动力学
过渡途径的采样
酶动力学的量子力学方法
非均匀液体的分子尺度范德华理论
分子体系中的长程共振传能
偶极键合阴离子理论
化学反应的量子散射计算

固体，有序阵列，纳米晶材料，纳米管

卤化银成像材料的光物理
冲激散射在地球和行星科学中的应用
用表面等离子共振成像测量超薄有机膜
纳米晶的尺寸和形状的热力学：在硅 001 上的外延锗
有关晶体生长的原子尺度过程的理论研究
半导体量子阱和量子点的光谱学和热电子弛豫动力学
金属纳米晶的光学性质和超快动力学
半导体纳米晶的隧穿和光学谱

红外，拉曼，多光子，电离和电子光谱，热化学量

激光的光热运用：金属-液体界面的超快光热现象的研究

分子材料中激波的超快光谱

瞬态激光调频光谱

从转动隧穿得到定量的原子-原子势能

高度混合量子态中隐藏的动力学信息的解码

红外反射吸收光谱和金属表面上分子吸附物的结构

电子和震动激发的多维飞秒相关谱学

复合谱学

自由扩散生物分子的单分子比例度量研究

分子和团簇的时间分辨光电子谱学

用红外振动回声法探测快速蛋白质动力学

时间分辨光电子角分布

用光电离和光电子方法的真空紫外光谱学和化学

分子哈密顿

分子-金属界面的电子转移：双光子光发射的研究

用和平振动光谱研究高分子表面

多原子分子的飞秒时间分辨光电子谱学

表面现象，催化，扫描探测显微术，纳米尺度测量，传感器

硅表面上的控制分子吸附：为分子器件打好基础

液体束流表面上分子的结构和动力学

用原子力显微术研究 DNA 的表面生物学

自组装单分子形成的机制和动力学

水基表面分子的结构与键合

通过分子和分子界面的电子发射

金属表面的电子结构和催化

超热能分子离子与固体表面的反应碰撞

表面飞秒化学：碱金属原子从贵金属表面上的受抑脱附的观察和量子控制

了解各向异性刻蚀中对缺陷的高度选择的化学

薄膜加工中的光学诊断

化学反应的 STM 控制：单分子合成

1979—1983 年目录内容

生物物理化学

血红素和肌球蛋白配体动力学

蛋白质动力学的模拟

主要类脂双分子层的相变理论

饱和转移光谱

DNA 多电解质理论及其对 DNA 的应用

蛋白质动力学

肌肉收缩机制的某些物理研究

血红蛋白的时间分辨、共振拉曼研究

生物体系的固体核磁共振

核酸体系的电子态和发光
磁场对固态反应产率的效应：以光和反应中心为例

气相化学动力学

单分子离子的分解
碰撞电离和离子对生成的分子束研究
四中心置换反应
热气体反应动力学及其在同温层化学中的应用
同温层化学过程的建模
高温燃烧的化学动力学
过渡态理论
里德堡原子和分子的碰撞
化学动力学的灵敏度分析

光化学和辐射化学

光合作用—光反应
流体中的电子
非均匀动力学
甲醛的光化学

化学动力学反应的动态学

反应分子碰撞
快离子束光碎片光谱
分子的准周期和随机行为
光碎片的排列和取向
光分解动态学理论
非平衡分子动态学
电子激发态动态学

化学动力学溶液（凝聚相）

溶液中的均相催化
马库斯关系在溶液反应中的应用
扩散控制的反应

电化学

电解质溶液动态学
溶液中光激励电子转移的电离
地球化学和宇宙化学
星际化学：宇宙中的新奇分子
激光化学传能和弛豫
电子跃迁分子激光的理论研究
多原子分子的多光子解离
振动激发分子的双分子反应
电离检测的多光子分子光谱

凝聚态中的分子动态学：全息光栅的皮秒实验
化学激光器

液态

稠密流体的重归一化动力学理论
熔岩和盐—金属溶液中的电导
平衡时的电解质溶液
离子态表面的中子散射
溶质—溶质相互作用的核磁弛豫研究
分子液体的结构
冷凝和过冷液体的计算机模拟
极性和可极性化流体的模拟
过冷水

磁共振（电子自旋和四极共振）

电子顺磁共振的近期进展：瞬态方法
分子结构
稀有气体基质中的分子离子光谱学

物理有机

气相酸碱化学

高分子和大分子

硬链高分子液晶
高分子的分子振动
缠绕高分子间的动力学
聚乙炔导电高分子的一个原型
高弹性理论

量子化学

从头计算对化学键的描述
某些烃类双基的单重态—三重态的能量间隔
单分子重排的势垒
用于分子中电子关联的多体微扰理论和耦合簇理论
电子结构计算的 X 法
原子和分子结构及动力学理论中的复坐标
准线性和准平面分子
密度泛函理论

散射现象

分子液体的光散射研究
扩展 X 射线吸收精细结构用于化学体系的进展
固体有序阵列
非弹性电子隧道光谱：表面物种振动结构的一种探测方法

固体中的相干传能

谱学—电子和光电子

负离子谱学
有机固体的光反射谱学
双光子分子电子谱学
高压下分子发光的研究
甲醛和硫甲醛的谱学

谱学—红外，拉曼和微波

光谱学中的相干瞬态效应
冷气相分子的激光光谱学
共振拉曼散射：多模问题和变化方法
高分辨振转光谱学
赝转动：一种大幅度的分子运动
弱键合二聚物的脉冲喷管傅立叶变换微波谱学
统计力学
极性流体的平衡统计力学
二体，球形。原子—原子及原子—分子相互作用能
最小熵产生原理
液体中的振动弛豫
高分子坍塌

表面

金属单晶面上的动力学过程
表面上非弹性和反应过程的动态学理论
物理吸附在晶体表面上的单分子层薄膜的相变
表面扩散
气体—表面相互作用研究的分子束技术
金属簇反应的分子特征
化学吸附表层上的有序无序相变
热化学和热力学
烃键解离能

其他

阿弗加德罗常数
激光微化学及其在电子器件制造中的应用
介电弛豫
起伏光谱
流体临界点处的热力学异常

从以上的具体内容可以明显地了解到，物理化学作为化学科学的理论基础学科的确呈现出如下的一些趋势和特点，这些趋势和特点非常明确地集中在物理化学的核心基础研究内容的深入和研究手段的发展与研究内容的扩展上。

- A. 研究对象逐渐扩大，从键合分子、稳态、基态到分子聚集体、瞬态、激发态发展。在两个时期中，与分子反应动力学相关的实验和理论物理化学研究占到一半以上，并且不断深入，表明不同化学体系中分子层次上化学动力学研究的确是近半个世纪物理化学研究的主流，也是理解化学现象的理论和方法基础；
- B. 研究领域向化学其它分支学科渗透。与材料、能源、环境、生命、信息等各领域相关的复杂分子体系的研究交叉融合产生一些新的生长点，出现与地球化学、宇宙化学、大气和环境化学交叉的生长点，生物物理化学的内容一直就是物理化学研究的主要方向之一，并且有增加和深入，尤其是在界面、生物膜、大分子和生物分子物理化学研究方面有所扩展；
- C. 研究方法上时间和光谱领域的技术和方法持续发展。呈现出宏观、微观研究相结合，并更多地向微观层次深入，尤其是各种与激光技术发展相关的光谱学方法在物理化学的研究中占有越来越重要的地位，特别是超快和飞秒激光技术的发展，使得凝聚相中分子内和分子间相互作用的超快动力学可以得到实时的观测和测量，使得研究光合作用和视觉过程中的原初电子转移等过程成为可能；
- D. 研究对象上从气相中分子向凝聚相与表面研究发展。越来越向凝聚相、表面和界面的光谱和动力学方向延伸，出现了深入研究表面现象、催化、扫描探测显微术、纳米尺度测量、传感器等相关的新的生长点，还出现了与固体、有序阵列、纳米晶材料、纳米管等材料研究交叉的新生长点；
- E. 在微观研究中，静态与动态观察相结合，更多地倾向动态研究，并进一步深入到化学反应控制的研究，气相分子反应动力学向不断深入的方向发展，并没有明显减少的趋势，并且向气相中大分子和生物分子的光谱和动力学研究方向扩展；
- F. 理论化学的研究，越来越与实验物理化学结合紧密，向研究对象和手段更为深入和复杂的方向发展，量子理论和理论化学从结构化学计算向化学动力学理论方向发展，理论和计算化学还不断地向大分子和生物体系的分子动力学、电子转移和蛋白质折叠等领域发展。

物理化学研究中的这些特点和变化趋势，在今后的相当一段时间仍然会持续下去。同时，物理化学研究中也可能会出现一些意料不到的生长点。学科的发展方向和趋势取决于两个方面，一方面是学科的基本问题被解决的情况如何，人们总是会围绕尚未被解决的已知的基本问题开展研究和发展方法；另一方面是，有哪些新的技术和手段可以被运用、发明来研究这些尚未被解决的学科基本问题。问题和手段通过研究者的能力结合起来，就会可能产生重要的科学前沿突破，并带来该方向的新的生长点。我国物理化学研究缺乏创新性突破的一个最主要问题，可能就是无法很好地把重要问题和先进手段和方法结合起来。这一方面可能是我们缺乏鼓励发展和采用新技术和手段的良好机制，一些同志认识到了仪器和手段的重要性，但是他们可能并不了解最关键的是还需要进一步进行仪器和方法的创新，并且这种创新一定要围绕科学问题进行，而不是为仪器而仪器。因此，我们往往倾向于购置仪器但并不完全清楚如何发挥其研究作用，从而与国外科学家相比，往往总是错失发现的良机，非常可惜；另一方面是我们在物理化学领域具有非常良好训练的青年科学家仍然非常缺乏，这种良好训练，正是表现在对手

段和问题具有较为充分和系统的掌握和了解上。否则,人们往往会对研究的目标和手段之一缺乏清楚的认识,常常会出现在远离科学前沿的地方勤学苦干的情况。要避免这些情况的出现,除了训练之外,有效的国际学术交流,和对学术前沿的了解非常重要。因此,对于物理化学中科学问题的特点和趋势的清楚而具体的认识,是非常之关键的。张存浩先生对《物理化学年度评论》的以上总结看似平常之举,但确实是非常及时和具有深远意义的。

2003年底,国家自然科学基金委员会化学科学部组织了国内物理化学界专家和部分海外华人学者编写出版了《新世纪的物理化学—学科前沿与展望》^[24]。此书从不同的角度讨论了物理化学前沿的现状,并且展望了今后物理化学发展的趋势。这本书中的内容不仅包括了相当多的物理化学学科基础领域的内容,还更有力地突出了物理化学在各个相关学科的研究内容和发展趋势。本书中的内容与张存浩先生对近年来《物理化学年度评论》中内容的总结相比,显得更为广泛、全面,并且包含了许多其中缺少的面向应用的应用基础的研究内容。虽然说目前国内物理化学研究中基础实验和理论物理化学方面相对薄弱,但这本书更好地反映了国内物理化学的前沿研究的现状,并且可以从中了解未来几年中国物理化学前沿研究的走向。将国内国际的研究内容和现状加以参照,更能相得益彰,使人更好地认识物理化学整个领域,包括物理化学的基础前沿和应用基础前沿的全貌。

《新世纪的物理化学—学科前沿与展望》一书内容目录如下:

《新世纪的物理化学—学科前沿与展望》目录

第一篇 结构化学

单分子化学物理	侯建国 杨金龙 朱清时	3
生物大分子间的相互作用动力学问题	艾希成	8
过渡金属团簇的最新发展动态和趋势	吴新涛 卢灿忠 曹荣 杜绍武 陈玲	14
浅谈结构化学的发展及其与配位超分子化学的关系	苏成勇	21
纳米尺度分子工程研究	王远 徐东升	31
纳米科技的兴起与物理化学学科的发展机遇	万立骏	40

第二篇 理论与计算化学

新世纪物理化学学科前沿与发展趋势--理论与计算化学	方维海	49
量子化学领域的一些前沿问题和发展趋势	黎书华 江元生	52
纳米结构材料的线性和非线性光学响应	程文旦	58
介观化学体系中若干重要复杂性和非线性问题研究	侯中怀 辛厚文	66
计算机模拟方法及其在物理化学中的应用	李泽生 吕中元	71
线性标度电子结构方法	梁万珍	75
应当进一步加强处理复杂化学体系的理论方法	刘成卜 武剑 郑斌	81
生物物理化学与新药发现	蒋华良 沈旭 沈建华 陈凯先	98
有机/高分子光电功能材料的基本理论问题	帅志刚	103
价键理论方法的研究进展与展望	吴玮 宋凌春 张乾二	108
密度泛函理论的前沿和发展趋势	杨金龙 李震宇 贺伟	113
多酸化学与分子设计	苏忠民 颜力楷 阙玉和	120

非平衡态系统及不可逆过程物理化学的理论基础:化学反应体系的随机热力学·罗久里 125

第三篇 催化科学

催化学科前沿与发展趋势浅议·····	王野 袁友珠 翁维正 万惠霖	133
多相手性催化前沿和发展趋势·····	李 灿 李晓红	142
光催化学科的前沿和发展趋势·····	付贤智	148
离子液体物理化学--物理化学学科发展的新方向·····	邓友全	154
用于石油炼制和石油化工领域的新兴催化材料·····	慕旭宏	159
二氧化碳的温和活化与碳酸酯的合成·····	孙予罕	165
多相催化研究中的理论计算方法·····	王建国	174
多相催化材料发展的一个新方向——从负载型纳米催化剂到纳米复合型或 纳米建筑型催化剂·····	徐柏庆	181
生物催化技术的发展趋势及前景·····	辛嘉英 夏春谷	187
有机-无机杂化介孔材料在催化领域的发展现状及趋势·····	杨启华	190
不对称催化反应的应用基础研究项目·····	郑卓	195
催化的纳米特性·····	包信和	202

第四篇 分子动力学与动态学

面向新世纪的物理化学学科前沿与发展趋势与分子反应动力学研究前沿··	王鸿飞 邵久书	211
量子分子动力学·····	张东辉	232
立体化学反应动力学·····	韩克利	237
分子动态结构发展的新趋势·····	翁羽翔	244

第五篇 胶体与界面科学

关于胶体科学重点课题的几点想法·····	江 龙	251
用溶致液晶组建纳米材料的新途径·····	陈 晓	255
溶液中两亲分子有序组合体结构、性质的调控与应用·····	黄建滨	260
利用有机模板合成具有特定形态、结构的无机材料·····	齐利民	266
表面科学的研究现状与未来发展趋势·····	吴 凯	273
界面分子组装·····	刘鸣华	283

第六篇 电化学

纳米结构半导体材料的光电化学·····	林 原	293
二相界面固体电解质膜的形成与性质调制·····	李伟善	299
腐蚀电化学及其研究方法的前沿与趋势·····	林昌健	311
液/液界面电化学的进展及其发展趋势·····	邵元华	316
纳米材料原子排列结构层次的电化学催化·····	孙世刚	321
离子电池的进展·····	江志裕	325
初探纳米电化学之发展·····	田中群 毛秉伟 向娟 吴德印	333

第七篇 分子聚集体化学

基于主客体作用的荧光传感器研究进展·····	丁立平 高莉宁 陈亚芍 房 喻	345
空心结构的金属纳米颗粒的制备和性能·····	王海水 席时权	360
超分子化学·····	吴骊珠 佟振合 张丽萍	363
有机分子和高分子的光物理和光化学性质及其在超高压 条件下的特殊行为··	杨国强	368
有机纳米结构的构建及其光电性能研究·····	姚建年	372

第八篇 复杂体系的热力学

复杂流体的若干物理化学问题·····	沈伟国	393
--------------------	-----	-----

超临界流体和离子液体化学热力学及其在绿色化学与技术中的作用	韩布兴 刘志敏 姜涛 何俊 吴卫泽 张建玲	399
--	-----------------------	-----

第九篇 新材料及新能源中的物理化学

太阳能光催化分解水制氢研究	李灿 雷志斌	409
基于生物学原理与材料的微纳米结构制造（合成）原理与方法	顾宁 王静 徐丽娜 何世颖 周凯常 谭逸斌	414
纳米电子学	陈萌、黄维	423
氢能与燃料电池技术现状和发展趋势	陆天虹, 邢巍, 孙冬梅	429
关于移动氢源基础研究的若干看法	沈俭一	442
高能二次电池的前沿与发展趋势	夏永姚	448
纳米多孔材料的研究现状及发展趋势	赵东元	455
具有高水热稳定性和高催化活性的新型有序介孔催化材料	肖丰收	461
纳米化学—机遇和挑战	张锦 刘忠范 朱涛	468
有机 / 聚合物激光材料与激光器	马东阁	475
中温固体氧化物燃料电池	程谟杰	479

第十篇 物理化学中的方法与技术

介绍“物理化学年度评论”	张存浩	487
微米尺度固液体体系的物理化学问题和创新契机 · 田昭武 林华水 周永亮 田中群 蒋利民		496
化学生物学给物理化学带来新的发展机遇	赵新生	502
单分子力谱：从分子、界面到超分子结构	张希 王治强	505
质谱与气相离子化学	刘淑莹	509
核磁共振波谱学前沿和发展趋势	邓凤 刘买利 叶朝辉	514
物理化学的现状和发展趋势	周午纵	520

附录

附录一 国家自然科学基金物化学科面上、重大、重点基金资助情况		527
附录二 国家自然科学基金物化学科杰出青年基金和海外、香港、澳门青年学者研究基金		530

(六) 物理化学学科近 20 年来的重要进展

1994年由科学出版社出版的自然科学学科发展战略报告《物理化学》专集指出：“据统计，1901—1988年获诺贝尔化学奖者共110位，其中近70位是物理化学家或从事物理化学领域研究的科学家。这说明，近90年来化学学科中最热门的课题及最引人注目的成就，60%以上集中在物理化学领域。”^[3]在过去20年中，有9个年度的诺贝尔化学奖授予了物理化学研究所取得的和与物理化学研究直接有关的成就，共有19位获奖者。其它的11个年度中有7年是生物化学或生物物理化学方面的成就，3年是有机合成化学，1年是材料物理化学。这充分表明了化学学科中物理化学的举足轻重的地位和作用，以及生物化学和生物物理化学，或者说化学生物学，早就已经成为化学学科的重要研究内容。物理化学的这9个化学 Nobel 奖的内容如下：

2002 John B. Fenn, Koichi Tanaka, Kurt Wüthrich, 发展确定生物大分子的结构分析方法

- 1999** Ahmed Zewail, 利用飞秒光谱学研究化学反应过渡态
- 1998** Walter Kohn, John Pople, 发展密度泛函理论和量子化学计算方法
- 1996** Robert F. Curl Jr., Sir Harold Kroto, Richard E. Smalley, 发现富勒烯 (C₆₀) 分子
- 1995** Paul J. Crutzen, Mario J. Molina, F. Sherwood Rowland, 大气化学, 尤其是大气中臭氧的形成和分解的化学
- 1992** Rudolph A. Marcus, 对化学体系中电子转移反应理论的贡献
- 1991** Richard R. Ernst, 对发展高分辨 NMR 光谱的贡献
- 1986** Dudley R. Herschbach, Yuan T. Lee, John C. Polanyi, 对化学基元反应动力学的贡献
- 1985** Herbert A. Hauptman, Jerome Karle, 发展确定晶体结构的直接方法的杰出贡献

1985, 1991, 2002 年的获奖, 是物理化学在结构化学分析方法上的直接贡献; 1996 年获奖的发现直接引发了无机化学和纳米材料化学的蓬勃发展, 1986, 1992, 1995, 1999 年获奖的内容, 都直接属于化学反应动力学方面的贡献, 其中 1995 年获奖的内容为关于全球环境和问题有关的蒙特利尔国际公约和京都议定书的签订提供了直接的科学依据, 影响了世界各国与环境相关的环境、产业和社会政策; 1998 年的获奖是量子化学理论和计算方法的进展。其中值得强调的是, 1996 年和 2002 年的获奖与化学动力学方面的研究也有密切的关系, 其中 John B. Fenn 是在 1950 年代就开始通过分子束技术研究化学反应动力学的科学家之一, 而 Robert F. Curl Jr., Sir Harold Kroto, Richard E. Smalley 在偶然发现 C₆₀ 分子之前, 是研究反应动力学和光谱学的著名专家, 发现 C₆₀ 的手段也是为研究反应动力学和光谱而建造的 (我国厦门大学的郑南荪院士在 80 年代初参与了其设计和建造)。

不过, 最近 20 年获得 Nobel 奖的工作, 绝大部分是更早的时间里就已经开展和完成的工作。所以, 还不能完全将它们等价为最近 20 年来的研究进展。了解最近 20 年的物理化学研究进展, 可能从近十几年来的专业杂志和综述文献中去寻找线索更为可靠。所以, 在前一小节中张存浩先生给我们总结的 Annual Review of Physical Chemistry 中的内容, 就更加具有参考意义了。

在过去 20 年中, 物理化学研究中的重要研究手段、方法和技术出现了长足的进步, 特别表现在各种重要的实验研究技术越来越稳定、可靠和便于使用。这在过去二十年来为物理化学, 特别是实验物理化学的研究提供了前所未有的可能性。

- 时间分辨技术: 各种时间分辨的激光和电子检测技术, 从连续波, 到纳秒、皮秒、乃至飞秒激光技术, 等等;
- 光谱分辨技术: 从 X 射线, 到紫外、可见、红外、微波甚至长波波长的光源和光谱技术, 高分辨光谱技术, 等等;
- 空间分辨技术: 各种扫描显微技术, 如 STM, AFM, 近场光学技术、共焦显微技术等单分子控制和检测技术, 等等;
- 分子运动控制与质谱技术: 分子束技术、离子阱、电子光学与离子光学、电喷雾与基质脱附电离技术等现代质谱研究中的关键技术、光镊或光钳技术, 扫描显微控制技术, 等等;
- 光电检测技术: 各种时间和光谱分辨的光子检测技术、电子和离子检测

技术、电子信号处理技术，光学和电子或离子成像技术，等等。

在过去 20 年来，计算技术和计算机运行速度、超级计算机等有了非常迅速的发展和普及，使得许多以前不敢想象的精确和复杂计算，以及对生物大分子体系的大规模计算成为可能，为理论和计算化学提供了前所未有的发展机会。

在过去 20 年中，随着实验和计算技术的发展，物理化学研究，包括实验物理化学和理论物理化学研究，至少在以下的一些方面的确取得了非常重要的和系统的进展，有望成为未来 10 到 20 年 Nobel 化学奖中有关物理化学的内容。

- 单分子的物理化学。包括结构和动力学，也包括其在生物化学和生物物理学中的应用。首先，单分子检测的方法和手段，以及相关的理论方法得到了长足的发展，其次，对单个分子的结构、性质和动力学行为，包括复杂的大分子的内部相对运动的细节也已经有了较为深入的认识，并且，在单分子、单粒子层次上研究化学、材料和生物大分子的性质和运动规律的应用方面也取得了相当大的进展，并且逐步深入开展。
- 凝聚相和界面上分子的结构、相互作用和动力学过程研究。不仅在实验方法和手段上有了重要的进展，这包括各种非线性光谱和超快时间分辨光谱的发展，还在系统的理论方法上有了系统的进展，这包括多位光谱的理论等等。这些进展将对了解复杂体系和生物体系中的重要现象和过程起到非常重要的作用。
- 化学过渡态的本质和化学反应的控制。在深入认识化学反应中化学反应过渡态的本质方面出现了一系列重要的研究进展。气相基元化学反应动力学和态-态反应动力学的研究在过去三十多年里有了非常深入的发展。最近的发展方向主要集中在结合对重要的和有代表性的基元化学反应体系的势能面的精确计算和分子束、高分辨光谱及动能谱测量、超快动力学测量等，从而对这些化学反应的量子效应，如量子干涉效应，非绝热过程等，具有重要的基本理论价值和认识价值的动力学问题的深入研究。这方面的研究要求精确的实验数据和充分细致的势能面计算的结合。在气相基元化学反应动力学和态-态反应动力学的研究的基础上，通过激光对化学反应进行量子控制和反应控制的实验和理论得到了很大的发展。
- 超快电子衍射等结构和动力学研究。最近几年通过飞秒激光技术的发展，使得产生足够束流密度的超快电子束成为可能，在此基础上已经开展了一系列的实验和理论研究工作，研究了一系列分子结构和动力学变化。此方面的研究工作的进展，向解决如何直接研究化学和生物学中相关的结构和动态结构的重要问题迈出了非常重要的一步。

以上只是物理化学领域的一些特别突出的基础性和前沿性的研究进展。在物理化学的非常广泛的研究内容中，重要的进展还非常之多。近些年来在复杂体系量子动力学方面的研究进展很快；在复杂和超大型分子动力学计算研究方面进展

也非常迅猛，使得所谓的计算生物学技术（in-silico）开始成为一门真正具有前途的学科成为可能；在材料物理化学、纳米材料科学，特别是纳米催化、光化学和功能材料研究方面研究进展的非常广泛；生物物理化学和相关的物理化学研究，特别是光合作用、视觉过程、膜蛋白的结构、动力学等研究，进展非常快，生物无机物理化学中的重要问题的研究也发展很快；界面光化学和光化学太阳能电池相关的基础物理化学研究也取得了非常重要的发展；等等。

（七）展望

任何一个学科都具有其内在的内容、方法和手段，以及其发展的内在规律，物理化学也不例外。政府和社会对物理化学学科的需求和支持，也有其内在的特点和规律。如何从物理化学学科自身和国家及社会需求的角度来认识物理化学学科，寻求发展物理化学学科的思路，创造适合物理化学学科发展的学术和教育环境，提供物理化学学科发展需要的社会环境和制度性保障，从而促进整个化学学科和相关学科的可持续发展，为国家和社会的可持续发展提供新的知识、方法、技术和人才，正是摆在我们面前的艰巨任务。

孔子说：“君子务本，本立而道生。”物理化学学科的发展需要相关的人们，包括政府中的管理者、科学基金工作者、整个科学界和社会中有影响的人士、物理化学界的专家、学者、学生，对于物理化学学科的“本”有比较清楚和一致的认识。这个“本”就是物理化学学科要为整个化学学科以及物质科学提供基础理论、研究手段和研究方法，并为发展基础教育和培养研究和技術人才的事业做出重要的贡献。这样，物理化学才能在社会的科学事业，教育发展和技术进步的同时也得到物理化学学科充分发展的机会。

为了实现这些目标，物理化学的研究应该集中在寻求基础理论、研究手段和研究方法方面的突破，通过这些前沿研究培养和训练具有研究和创新能力的研究、教育和人才队伍，并且让这些具有研究和教育能力的“多面手”能够在国家和社会的高技术和科学发展中发挥起作用。要做到这些，必须充分发挥实验物理化学和理论计算化学能够在前沿研究中对研究人员和学生进行充分综合性训练的学科优势和特点。从 Gordon Moore 的例子中，我们应该能够看出现代物理化学在高级人才训练方面的这些优势作用。从物理化学学科在 20 世纪美国的蓬勃发展的历程，我们也应该可以意识到中国物理化学学科发展的前景和道路。从物理化学发展的历史经验中可以看到，物理化学学科是一个大国的学科，它的基础性和研究内容手段的广泛性要求一定的学科规模和人才基数。我们现在正好赶在中国的基础教育和大学教育复兴和蓬勃发展的时期，这一时期应该会持续相当长的一段时间，这正是我国物理化学学科的发展和壮大的天赐良机。

但是，许多现存的因素会给物理化学学科的发展带来巨大的障碍。物理化学学科是追求认识和对自然的定量了解的学科，因此，物理化学学科中最为重要的是对原理、手段和方法的掌握，这也是为什么相比之下物理化学学科能够和大学以及研究生等高级人才的教育良好结合的原因。而一个人要对物理化学中基本原理、手段和方法很好掌握，需要在其人生较早的时期进行较为长期的专门和严格训练。这也是为什么物理化学的基础虽然将来会非常有用，但在研究和训练中却

尽量地要强调问题的科学性，而不是实用性。其实，所有基础学科都应该具有这一共同特性。目前国内的经费资助方式，学术评价方式虽然也正在不同程度地有所好转，但对于物理化学这种基础性学科的发展，以及基础人才的训练来讲仍然是相当不利的。这也正是为什么对于物理化学的资助和评价应该尽量地与尖端人才的培养联系起来是如此关键的原因。因为现代社会中研究成果向技术的转化速度较之传统社会更快，所以人们不会有太多的时间在实际的应用工作中去学习相当多的基本原理、方法和关键技术，这一现实要求将对原理、方法和技术基础的学习和教育过程与实际的应用操作过程有所分别。在片面强调应用和成果转化的环境和气氛下，无法将应用研究和开发与教育和训练的过程安排在具有不同分工的社会机构中，导致教育和训练的过程被缩短和简化，将最终直接影响到整个社会的应用和开发研究的进行。高级人才的训练不足，具体表现在博士研究生的研究训练不足，是我国社会科学和高技术发展面临的一个最大实际挑战。如果我们不能灵活地绕过这些障碍，那么物理化学和其它基础学科的发展将会成为不能实现的空想。

《物理化学的世界》(The World of Physical Chemistry)^[8]一书的作者，著名的物理化学家 Keith J. Laidler 在 1998 年有牛津大学出版社出版的《去点燃这样一枝蜡烛》(To Light Such A Candle)^[25]一书中，通过对从工业革命开始瓦特发明蒸汽机以来的两百多年中的七大重要技术突破，包括蒸汽机、照相术、电力、收音广播、电子学、大分子结构测量技术以及原子核能，与当时科学发展之间的关系的科学和技术历史研究，总结了基础科学研究与技术进步以及社会发展之间的互动关系，及其变化规律和历史教训。这些历史上的重大技术突破，也是与历史上的许多著名物理学家和物理化学家的努力都具有相当直接的关系。这可能也是促进作为物理化学家的 Keith J. Laidler 愿意和有能力和能力关心和研究这些问题的重要因素。Keith J. Laidler 在书中总结出来的重要原则性结论有三点：

- a. 纯粹的（基础性的）研究应该完全用其研究质量来评判，而不是用可能的实际应用；
- b. 技术和工程必须建立在纯粹的（基础性的）科学之上，通过经验创造发明的时代早就已经过去了；
- c. 关于科学和技术的任何决策必须基于对所有相关因素的仔细考量基础之上。

这些结论都非常简单和平实，人们也大都知晓。但是，人们是否能够在实际的操作和运行中坚守这些原则，是否在对待具体的事情的时候能够做出正确的区分、判断和决定，才是真正最为关键的问题。不管怎样，这是一个著名的物理化学家通过他一生中对科学和技术的历史的研究和体会，对他的物理化学家同事们，以及整个社会和世界提出的忠告。这也许正是我们在回顾和展望物理化学学科以及整个科学的未来进展和前沿时应该谨记的。

参考文献：

- [1]. National Research Council, "Opportunities in Chemistry", National Academy Press, 1985. 中译本 《化学中的机会》，中国化学会，1986.

- [2]. National research Council, "Beyond Molecular Frontier", The National Academy Press, 2001, p 184. 中译本 《超越分子前沿》，科学出版社，2004, 147 页。
- [3]. 徐光宪主编，《物理化学》，国家自然科学基金委，科学出版社，1994 年出版。
- [4]. 徐光宪，“从外行人的眼里远看 ‘21 世纪的分析化学’”，于 2004 年 7 月 7 日在青岛召开的“分析化学前沿暨纪念高小霞院士诞辰 85 周年研讨会”上的发言。
- [5]. a) R. Breslow, "Interesting Times for Chemistry", *C&E News Editorial*, Jan.1, 1996, p.1.
b) R. Breslow, "Not So General Chemistry", *C&E News Editorial*, July 30, 2001, p.5.
- [6]. a) "A discipline buried by success", *Nature*, 411, p. 399, 2001. 王丹红译，载《化学形象被与其交叉学科的成功埋没》，《科学时报》2001 年 6 月 6 日。
b) "What's in a name", *Nature*, 411, p. 408, 2001. 王丹红译，《化学的品牌价值》，载《科学时报》2001 年 6 月 6 日。
- [7]. 周午纵，《物理化学的现状和发展趋势》，国家自然科学基金委员会化学科学部组编，《新世纪的物理化学—学科前沿与展望》，科学出版社，2004, p. 520。
- [8]. Keith J. Laidler, *The World of Physical Chemistry*, Oxford University Press, 1995, p.6.
- [9]. a) Moore G E, Badger R M, "The infrared spectra and structure of the chloramine and nitrogen trichloride", *J. Am. Chem. Soc.*, 74, 6076, (1952).
b) Jones L H, Badger R M, Moore G E, "The infrared spectrum and structure of gaseous nitrous acid", *J. Chem. Phys.*, 19, 1599, (1951).
c) Moore G E, Wulf O R, Badger R M, "The photochemical decomposition of nitric oxide by absorption in the (0,0) and (1,0) gamma-bands", *J. Chem. Phys.*, 21, 2091, (1953).
- [10]. M. Riordan, L. Hoddeson, "Crystal Fire: The Invention of the Transistor and the Birth of the Information Age", W.W. Norton & Company, Inc., 1997. 中译本《晶体之火—晶体管的发明及信息时代的来临》，上海科学技术出版社，1999。
- [11]. Keith J. Laidler, *The World of Physical Chemistry*, Oxford University Press, 1995. Chapter 1.
- [12]. John W. Servos, "Physical Chemistry from Ostwald to Pauling—the making of a science in American", Princeton University Press, 1990. Chapter 1.
- [13]. John W. Servos, "Physical Chemistry from Ostwald to Pauling—the making of a science in American", Princeton University Press, 1990. Chapter 2, p.99.
- [14]. 见 http://www.nsf.gov/mps/vgn_bah/output/program_page/1,3120,84,00.html, 或相关网页及文件。
- [15]. 见 <http://www.nsf.gov/cen/00/kxb/hxb/images/203.htm>, 或相关网页及文件。
- [16]. 本小节内容部分参考以下文献：
a) 徐光宪主编，《物理化学》，国家自然科学基金委，科学出版社，1994 年出版。
b) 王鸿飞、邵久书，《面向新世纪的物理化学学科前沿与发展趋势与分子反应动力学研究前沿》，国家自然科学基金委员会化学科学部组编，《新世纪的物理化学—学科前沿与展望》，科学出版社，2004, p. 211-231。

- [17]. 本小节内容部分参考以下文献：
王鸿飞、邵久书，《面向新世纪的物理化学学科前沿与发展趋势与分子反应动力学研究前沿》，国家自然科学基金委员会化学科学部组编，《新世纪的物理化学—学科前沿与展望》，科学出版社，2004，p. 211-231。
- [18]. Dudley Herschbach, “Fifty Years in Physical Chemistry”, Annual Review Physical Chemistry, Vol.51, p1-39, 2000.
- [19]. P. J. T. Morris, editor, “From Classical to Modern Chemistry-the instrumental revolution”, Science Museum, Royal Society of Chemistry, 2002.
- [20]. 本小节内容部分参考以下文献：
张存浩，《介绍“物理化学年度评论”》，国家自然科学基金委员会化学科学部组编，《新世纪的物理化学—学科前沿与展望》，科学出版社，2004，p. 487-495。
- [21]. J. Murray Luck, “Confessions of a biochemist”, Annual Review of Biochemistry, Vol. 50, p.1-22, (1981).
- [22]. 见 <http://www.annualreviews.org/>或相关网页。
- [23]. Zhong-Qun Tian, Bin Ren, “Adsorption and Reaction at Electrochemical Interfaces as Probed by Surface-Enhanced Raman Spectroscopy”, Annual Review of Physical Chemistry, Vol.55, p.197-229, 2004.
- [24]. 国家自然科学基金委员会化学科学部组编，《新世纪的物理化学—学科前沿与展望》，科学出版社，2004。
- [25]. Keith J. Laidler, “To Light Such A Candle”, Oxford University Press, 1998.