

论唐敖庆的研究风格

乌力吉*

(内蒙古师范大学化学系 呼和浩特 010022)

摘 要 简要论述了唐敖庆教授的研究成果及研究风格。

关键词 唐敖庆 理论化学 研究风格

The Discussion of Tang Aoqing's Style of Research

Wu Liji

(Inner Mongolia Teachers University Department of Chemistry Huhe Haote 010022)

Abstract In this article a brief introduction to Professor Tang Aoqing's achievement of research and style of research is given.

Key words Tang Aoqing, Theoretical chemistry, style of research

唐敖庆是我国著名化学家和化学教育家。他奠定了我国理论化学的基础,创建了在国际上具有重要影响的中国理论化学学派。他在配位场理论、分子轨道图形理论、高分子反应统计理论等方面均获得国际领先的研究成果,并四次荣获国家自然科学基金,其中一等奖两次^[1],是我国迄今为止唯一两次获国家自然科学基金一等奖的科学家。他 1955 年当选为中国科学院学部委员,1981 年当选为国际量子分子科学院院士。1995 年获何梁何利科学与技术成就奖,1993 年获陈嘉庚化学奖。50 余年来唐敖庆教授与他的研究集体合作出版了《配位场理论方法》(中、英文版)、《分子轨道图形理论》(中、英文版)、《配位场理论方法补编》(中、英文版)、《高分子反应统计理论》、《量子化学》、《应用量子化学》、《约化密度矩阵引论》和《微观反应动力学》等八部学术专著,200 多篇学术论文^[2]。他为中国培养了一大批高级理论化学人才,他与他的八名学生组成的科研集体,国内称之为“八大将”^[3],国际上称之为中国学派。唐敖庆教授在理论化学研究中取得蜚声国内外卓越成就的同时形成了富有特色的研究风格。本文就此予以简要论述。

1 继承和创新相结合研究风格

从科学史来看,化学学科的形成比物理学科晚许多年。而理论化学作为化学中的一门二级学科形成的时间更晚。并且理论化学是伴随着物理学科的不断成熟而发展起来的。理论化学的一个重要分支量子化学形成的时间更晚,从海特勒与伦敦 1927 年首创应用量子力学处理氢分子问题奠定量子化学的基础迄今还不到 80 年的时间。唐敖庆教授在这一年轻学科的前沿领域有重大建树多项。他在理论化学的另一重要领域——统计力学在分子化学中的应用方面也有重要

乌力吉 男,46 岁,副教授,从事化学史、结构化学教学和研究工作。

2001-11-21 收稿,2002-01-10 修回

建树。

50 余年来,唐敖庆教授的研究工作在分子内旋转、配位场理论方法、分子轨道图形理论、原子簇化合物结构规则、高分子反应动力学统计理论与高碳原子簇化学等方面展开,并取得了多项创造性研究成果。

唐敖庆教授从 50 年代初开始研究分子内旋转势能变化规律,对美国著名量子化学家皮特(Pitzer)提出的分子内旋转公式进行了创造性改造,从化学键的相互作用出发,找到了系列分子的内旋转势能函数一般公式,对国外的实验数据成功地进行了总结,改造过的公式可计算许多复杂分子内旋转的能量变化情况,具有一定的普遍意义,得到美国著名量子化学家威尔逊的高度评价。该公式被国外教科书反复引用,为从结构上改变物质的性能提供了可靠的依据。

从 50 年代中期开始,唐敖庆教授与他的高分子物理化学研究集体对高分子的主要反应如缩聚、交联与固化、加聚、共聚及裂解等反应进行了深入研究,将凝胶化理论发展成为溶胶凝胶分配理论,使研究范围从凝胶点以前扩展到全过程,形成了较完整的高分子固化理论,为国内涂料工业与固体推进剂工业提供了理论依据。在加聚反应领域内提出了用概率论解动力学方程的一种新方法,在求解 Ricatt 方程方面作出了贡献,提出了反应机理与分子量分布关系的统一理论。并由该理论推导出共聚物链段分布与分子量分布函数。唐敖庆教授与其研究集体在分子五种类型反应方面所开展的创造性研究工作,丰富和发展了高分子反应统计理论,揭示了高分子结构与反应参数间的定量关系,为设计预定结构的产物确定反应条件,生产工艺和配方提供了理论依据。唐敖庆教授和他的研究集体,30 多年来一直辛勤耕耘在分子反应统计理论领域,进一步用现代标度概念揭示了高分子固化的本质,建立了溶胶-凝胶相转变的标度定律,将高分子固化理论推进到高分子内环化领域,并将该理论成功应用于无机高分子合成反应中。

60 年代初,唐敖庆及其研究集体在吉林大学“构质结构学术讨论班”开始了对配位场理论的研究工作。

配位场理论是理论物理和理论化学的一个重要分支,也是近代无机化学的理论基础。早期的配位场理论,创建于 20 世纪 20~30 年代,其后一段时间,这项研究工作几乎处于停滞状态。进入 20 世纪 50 年代,由于光谱、磁共振以及激光技术的发展,才促使人们重新研究配位场理论。

唐敖庆教授与其研究集体在配位场理论方面的研究成果,集中体现在对配位场理论的系统化、标准化发展上。他们成功地定义了三维旋转群到分子点群间的耦合系数,建立了一套完整的从连续群到分子点群的不可约张量方法,并构造出了三维旋转群到分子点群间的耦合系数的数值表,在进一步统一配位场理论的各种方案基础上,提出了新的方案。该研究成果是中国理论化学方面的比较系统的一项达到世界先进水平的重大研究成果。该理论及其方法,被国内外学者广泛采用,且受到高度称赞,认为“丰富和发展了配位场理论,为发展化学工业催化剂和受激辐射技术提供了新的理论依据。”该成果 1982 年获国家自然科学奖一等奖。

70 年代初,分子轨道图形理论作为理论化学一个重要分支,引起了国际化学界的广泛关注。70 年代中期,唐敖庆和江元生以分子的近邻拓扑作用为基点,借助数学图论中不变量概念,寻求分子的整体与局域的关系,总结碳氢化合物性质与结构变化的规律,对分子轨道理论的两

个基本问题, 本征多项式和分子轨道, 作了本质分析, 并从反映分子结构本性的分子图形出发, 简易直观地得到了它们的普遍形式。他们破除了原有分子轨道理论关于从久期行列式的展开中求得本征多项式的思维定势, 开拓出从直观的图形出发直接给出本征多项式的新方法。原有分子轨道理论往往通过展开久期行列式而得到本征多项式, 再通过求解久期方程得到分子轨道的能级。这一传统方法随着共轭分子的增大其久期行列式呈现高阶化趋势, 以及同系列分子的本征多项式的复杂计算使理论学家感到为难。唐敖庆和江元生通过引进 $G(X)$ 函数, 利用分子图的拓扑性质, 找到了本征多项式与反映分子中原子相互作用的图形之间所存在的明确关系, 并将这种关系简洁地表述为三条定理, 把繁杂的运算步骤同割断键或去掉局部链段的直观过程联系起来, 从而不必经过普通展开步骤, 只需画出分子的图形和有关的子图形, 就能直接导出共轭分子的本征多项式, 进而可以通过解代数方程求得能级。总之分子轨道图形理论引进和发展了一系列新的数学技巧和模型方法, 使这一量子化学形式体系, 不论是计算结果还是对实验现象的解释, 均可表达为分子图形的推理形式, 概括性高, 含义直观, 简便易行, 深化了对化学拓扑规律的认识, 得到国内外学术界的好评, 被誉为中国学派的分子轨道图形理论, 基于上述贡献, “分子轨道图形理论方法及其应用”研究成果获 1987 年国家自然科学奖一等奖。

80 年代, 唐敖庆教授及其研究集体, 敏锐地注意到, 原子簇化学在国际上已经成为一个重要研究领域。他们从原子簇化合物的化学键性质和结构规则出发, 在对碳烷和多面体碳烷的化学键性质进行量子化学计算研究的基础上, 按其骨架多面体顶点数和面数相对大小进行分类, 从理论上建立了适用于多种原子簇化合物的统一拓扑结构规则, 用于解释 600 余个已知化合物的结构, 得到满意结果。揭示了上述各类化合物的化学键和几何结构之间的关系。

90 年代, 唐敖庆教授及其研究集体, 开始从事高碳原子簇化学的理论研究, 其研究成果主要集中于碳原子簇与硼原子簇对称性与几何结构的对应关系方面, 提出了以下新概念: 多面体碳原子簇与硼原子簇之间结构的共轭关系, 即碳原子簇的顶点数和面数恰是相对应的共轭硼原子簇的面数和顶点数, 并提出 B_{32} 等原子簇存在的依据。在高碳原子簇化合物中, 引入了结构单元的概念, 研究了具有正二十面体对称性的高碳原子簇的拓扑性质, 电子结构和稳定性规律等问题, 提出了 C_{240} 、 C_{540} 、 C_{960} 、 C_{1500} 、 C_{2160} 、 C_{2940} 等可能稳定存在的依据, 研究了具有管状对称性高碳原子簇的拓扑性质, 电子结构与稳定性规律问题。讨论了某些管状高碳原子簇的导电性和半导体性质。研究了多层碳原子簇的几何结构、范德华引力、热力学函数与稳定性规律等问题。

唐敖庆教授 50 余年来, 以其精湛的学术造诣, 敏锐地把握国际理论化学学术研究前沿的新动向, 不断开拓新课题, 创造性开展研究工作, 取得了一系列具有国际先进水平的研究成果。唐敖庆教授立足于国内, 及时把握国际学术前沿动向, 赶超世界先进水平的经验对举国上下正在进行的科技创新工作中具有十分重要的借鉴意义。

2 教学和研究相结合研究风格

唐敖庆教授作为我国理论化学的奠基人, 始终把培养高层次学术带头人作为首要任务, 运用教学和科研相结合的方法, 以开办以学术前沿重大课题为研究方向的学术讨论班为形式, 获得高水平研究成果的同时也培养了高水准的学术带头人。纵观唐敖庆教授几十年的科研生涯,

教学和研究相结合开展科学研究的典型范例当推 1958~1960 年间创办的高分子物理化学学术讨论班和 1963~1965 年间创办的物质结构学术讨论班。

1958 年唐敖庆教授在吉林大学创办了高分子物理化学学术讨论班。这一为期二年的学术讨论班的科研主攻方向为“高分子缩聚、加聚与交联反应统计理论。”该学术讨论班首先在国内开设了高分子物理化学方面的系列课程,运用教学与科研相结合的方法,边学习、边开展研究工作,对于高分子的四个基本反应类型——缩聚、加聚、交联和裂解的动力学规律作了比较全面的探索,获得了理论上有创新的研究成果。

1963 年,唐敖庆教授又受教育部委托主办了物质结构学术讨论班。该班的正式学员大多数是副教授和讲师,有些学员已经开始指导研究生。尽管如此,他们首先用一年的时间,学习了《有限群表示理论》、《连续群表示理论》、《群论在核谱学中的应用》、《分子对称群的不可约张量法》、《群论在固体物理中的应用》和《李代数及李群的表示理论》^[4],并查阅了该课题前沿领域的相关文献,从 1964 年开始正式转入研究工作,经过一段时间的艰苦攻坚战,搞清楚了原子结构和配位场弱场理论的关系,在二者之间架起了一座桥梁,使计算方法大大简化,而且也搞清楚了配位场弱场理论和强场理论的关系,对低对称的计算方法实现了标准化,提出了混合组态的配位场理论,从而丰富和发展了配位场理论,仅用一年时间在配位场理论研究领域达到了国际领先水平。

唐敖庆教授 50 余年来始终把培养高层次学术人才当作己任,为在我国普及理论化学,并构建理论化学研究队伍在全国曾多次举办以学术前沿重大课题为研究方向的研讨班,1978~1980 年,以吉林大学为主,联合山东大学、北京师范大学、厦门大学、四川大学、云南大学和东北师范大学等 6 校在长春市举办了量子化学研究班,来自全国高校、科研单位的中、青年学员,共有 259 人参加;1986 年暑期,与徐光宪教授等在长春市举办了量子化学教学研究班,学员达 140 人;1988、1989 年两个暑期唐敖庆教授又两次在长春举办高分子标度理论讲习班,学员达 200 余人。这些研究班均采用教学与科研相结合的方法,一边学习基础理论,一边了解该理论的前沿发展状况,一边开展研究工作。一次研讨班培养出一批人才,攻克一个研究课题,获得一个高水平的研究成果。1991、1993 年新当选的中国科学院院士中,沈家聪院士出自 1958~1960 年高分子物理化学学术讨论班。孙家钟、江元生、张乾二、邓从豪院士则出自 1963~1965 年的物质结构学术讨论班。

唐敖庆教授 1953 年在全国率先招收 5 名理论化学研究生,到 1966 年,他曾先后指导过物质结构、高分子物理专业的研究生达 20 多人。1978 年恢复研究生制度以来,他共招收 17 名博士生和 33 名硕士生^[5]。上述研究生大多成为高等院校、科研院所的教学和研究骨干。

唐敖庆教授的教学和研究相结合的科研实践,为我国基础学科、应用基础学科高层次人才的培养提供了可供借鉴的重要经验。

3 理论和实践相结合研究风格

数十年来唐敖庆教授的主要研究领域是理论化学。但唐敖庆教授自觉用唯物辩证法指导自己的科研实践,既重视理论对实验的指导作用,又坚持理论依赖实验这一原则,较好地处理了理论和实验的关系。

理论的创立依赖实验,理论的发展也依赖实验。50 年代初,美国著名量子化学家皮特(Pitzer)提出了“分子内旋转”公式,但它的运用范围具有很大局限性,只能用于解释某些比较简单的分子内旋转。唐敖庆教授从 50 年代中期开始,本着理论联系实际的原则,对当时所能得到的实验数据和资料,重新进行了深入分析,提出了一个可以计算诸多复杂分子内旋转能量变化规律的公式。由该公式可以推算出物质的某些性质,并且该公式也为从结构上改变物质性能提供了重要依据。1955 年,这项研究成果公开发表之后,美国著名量子化学家威尔逊给予了很高评价。此后这一公式被吸收进国内外一些专著和教科书中。后来,随着红外、微波等实验技术的发展,有关内旋转的实验数据在国外文献中逐渐增多。唐敖庆教授本着理论联系实际,在实践中检验真理、发展真理的原则,以这些新的实验数据重新检验了势能公式,经过一番去伪存真、去粗取精、由表及里的改造和加工,使其更加简明,更具有指导意义,并于 1962 年重新发表^[6],再度引起国际理论化学界的关注。

在选择科研课题时,唐敖庆教授始终注意正确处理为生产实践服务的课题和基础理论课题的关系,优先将理论研究工作立足于为实践服务的基点上。唐敖庆教授 1956 年积极响应国家号召,暂时放弃自己熟悉的物质结构研究课题,着手研究高分子动力学。唐敖庆教授在研究工作中积极采集第一手实验数据的同时,慎重地选用国外实验数据,作为理论分析和探索的“原料”,并且将得到的理论研究结果不断返回到实践中去进行检验。唐敖庆教授开始研究分子凝胶理论时,将研究的着力点放在高分子凝胶理论上,探索什么条件下产生凝胶,什么条件下不产生凝胶,他们将由实验形成的凝胶理论拿到实践中去进行检验,又进一步发现,凝胶点和高分子材料的合成配方有关,由此又找出了一个凝胶区域,明确了什么范围内产生凝胶,什么范围内不产生凝胶,从而使配方具有了一定的预见性。以后又进一步发现在某种配方下达到某一反应程度时凝胶量有多少,不凝胶量有多少。经过由实践到理论,又由理论到实践的这样多次反复,使理论产生了质的飞跃,把凝胶理论发展成高分子固化理论。

唐敖庆教授在研究工作中始终坚持实践是第一的观点,当理论与实践发生矛盾时立即予以修正使其与实践吻合。查尔斯贝是美国著名的辐射化学家,他在 1954 年连续发表了两篇关于辐射实验理论的论文,提出了一个交联度和溶解性能关系的公式。唐敖庆教授在研究中发现该公式与实验现象不十分吻合,于是本着尊重实践、尊重实验实事的原则,写文章对其提出了质疑,论文发表一年多后,在实验中又发现,缩聚反应后的凝胶和交联反应后的凝胶并无本质区别。而以前发表的论文中唐敖庆教授确认这两种凝胶点是不一样的。于是他又本着尊重实践、尊重实验的原则,对自己提出的理论提出质疑,重新建立了新的物理模型^[7],严格进行了理论处理,得到一个当时被认为较好的结论,把高分子交联理论向前推进了一步。唐敖庆教授在研究工作中多年来始终坚持实践第一的观点,做一个彻底的唯物主义者,既敢于纠正权威的错误,又敢于纠正自己的错误,堪称学术研究中的一个彻底唯物主义者。

唐敖庆教授 50 余年来的学术生涯,是不断创新的学术生涯,是不断勇攀理论化学高峰的学术生涯,他作为中国理论化学的开拓者和奠基者尤其作为量子化学的学术大师深谙唯物辩证法,具有雄厚的哲学基础,曾撰文阐述了量子化学研究中哲学思想^[8]。唐敖庆教授的学术研究方法以及在量子化学研究中贯穿的哲学思想对促进科技创新、赶超世界先进水平将具有十分重要的

指导意义。

参考文献

- [1] 《唐敖庆科学论文选集》编委会. 唐敖庆科学论文选集. 长春:吉林大学出版社,1996:9.
- [2] 高等学校化学学报编辑部. 庆祝唐敖庆教授执教五十年学术论文专集. 长春:吉林大学出版社,1990:9.
- [3] 郭保章. 中国现代化学史略. 南宁:广西教育出版社,1995:265.
- [4] 高等学校化学学报编辑部. 唐敖庆教授执教五十年学术论文专集. 长春:吉林大学出版社,1990:6.
- [5] 《唐敖庆科学论文选集》编委会. 唐敖庆科学论文选集. 长春:吉林大学出版社,1996:12.
- [6] 唐敖庆, 陈世元. 物理学报,1962.(3):144~157.
- [7] 唐敖庆. 红旗,1965,11:19.
- [8] 《化学哲学基础》编委会. 化学哲学基础. 北京:科学出版社,1986:375~384.