

·科学论坛·

与分子概念有关的几个问题

吴征铠*

(中国核工业集团总公司,北京 100082)

[摘要] 介绍了与分子概念有关的几个问题,提出原来的分子定义已不适用,建议将分子定义为一个由若干原子核和若干电子所组成,受量子力学规律的约束,有一定的稳定性的体系。

[关键词] 分子,概念,新定义

自从道尔顿创立原子分子学说以来,化学和物理学得到迅速的发展,特别是20世纪的许多发现,在各方面都突破了原来的学说的基础。例如,原子是原子核和电子所构成,而原子核是中子和质子构成,以及其下还有夸克等。量子力学为微观世界立了基本理论和法则,波函数的概念使得一个质点的影响范围可以达到无穷远。同时,还出现了许许多多所谓跨学科的新学科。这些新发现不但模糊了原来的化学,物理和生物,甚至和地学,天文学科的界限,还使得分子概念产生许多问题。下面将就几个比较重要的谈一些个人的看法。

首先,道尔顿的分子概念是从气体中提出的,物质只有在气体中才是比较独立的,但即使在非常低的气压下也存在相互作用,由于在凝固态中,相互作用很大,所以有许多新的性质。以金为例,虽然是单质,但它也可以被认为是单原子分子。这个单质具有金属光泽,导电等性质,但在金的原子束中这些性质都不见了,所有金属也如此。所有半导体也有类似的情形。高温超导的铋钡铜固体也如此。这说明分子在气体和固体中在当前的情况下是不一样的。在它们中间还有团簇,又有不同的性质。它们的化学组成相同。那么,谁是他们的“分子”代表呢?

凝聚态物质存在界面,存在界面层,由于介质两面的物质不同,其相互作用不对称,存在界面张力而使表面分子受力不均衡,产生和内部分子不同的分布和变化。在纯物质中表面分子间的距离改变,甚至分子中的原子间距也改变。在溶液中则表现为溶

液浓度不同。溶质增加引起表面张力下降时,则表面浓度增加,反之则减少。在固体中同样存在这一现象,由于存在向内的力,使得晶面呈凸状,在NaCl型的晶体中表面层的原子间距缩短。如有分子具有一个亲介质的集团基而同时又有大的疏介质的基时,这一物质不能溶于这个介质中,而在介质的表面上成为一个单分子层,这种例如硬脂酸盐在水面上所成的单分子层就是有名的Langmuir膜。这种膜可以移转到玻璃或金属等物体上并成为多层膜。显然表面分子具有和内部分子不同的性质。

道尔顿的分子是稳定的分子,分子的不稳定性有两种,一是它本身没有能量最低点,原子不能形成分子,二是分子本身有最低点,但在遇到碰撞时就分解了。后者有一定的稳定性,可以短时存在,或在没有碰撞时可以长期存在,在星际空间存在大量分子,其中大部分属于这类,人们将它们叫做自由基,显然,自由基是分子。

人们将带有电荷的分子叫做离子,但在化学反应中,电荷和原子同样守恒。将离子也归属分子一类比较方便。

原来认为相同分子的质量是相同的,自从发现了同位素后,这一认识改变了。不同的同位素有不同核自旋量子数,因此它们的性质也有不同。这样,才有了同位素化学。

现在有一门叫做高分子的学科。其实在胶体体系中,只有大小不全相同的质点,而不是分子。并且这个体系是多相的。而超分子则是将分子内的力和

* 中国科学院院士。

本文于2001年5月9日收到。

分子间的力的不同当成绝对的了。实际上,超分子还是分子。

自从电子被发现以后,在分子中电子一般处于基态,但也有不是基态的。电子受到激发,此时分子可以分解,也可以形成激发态分子,由于电子比较多,激发态分子的种类非常多,激发态的寿命的长短的范围非常大,所以这是个相当广大的新领域。

过去,小分子研究得比较多,而对大分子的研究则比较少。大分子因为有较长的链,所以键长和键角都不恒定,而且可以弯曲甚至成为螺旋状。因此,存在于较远的两个的基团也可以有相当大的相互作用,这种相互作用如何计算和测量现在都存在问题。分子生物学现在还不能从理论来解决。现在,基因只能用经验方法去利用。就象在量子力学前的化学一样。

从上述的事实可以看出,原来的分子定义是不适用了,必须一个比较广泛的新定义。我建议:分子是一个由若干原子核和若干电子所组成,受量子力学规律的约束,有一定的稳定性的体系。

在这个定义下,最重要的是在大学中,不应再设立分开的物理和化学两个系,而应设立包括分子生物学在内的分子科学系或院,使学生一开始就看得高些远些。另外,必须从整个分子来看问题,必须从电子和电子,原子核和原子核,电子和原子核间的相互作用来考虑问题。那些将分子中的一部分孤立出来并且认为是恒定的如化学键,价和价数,以及价键;力常数等等概念虽然还有用途,但要注意其局限性。在量子力学计算中,它们还有用途。

分子概念的发展是辩证法的必然结果。

PROBLEMS ON THE CONCEPTION OF MOLECULE

Wu Zhengkai

(Chinese National Nuclear Corporation, Beijing 100082)

Abstract Problems on the conception of molecule were introduced in this paper. It's suggested that the conception of molecule should be as follows. molecule is composed of a certain number of nuclei and electrons, and is a stable system which is kept itself with in the bounds of laws of quantum mechanics.

Key words molecule, new conception

·资料·信息·

“大型旋转机械非线性动力学问题”中期研究工作取得重要进展

国家自然科学基金重大项目“大型旋转机械非线性动力学问题”(19990510)自1999年3月立项至今已工作了2年。两年来,项目组在国家自然科学基金委员会和11个单位的支持下,顺利完成项目任务书规定的各项研究任务。主要成果有:

(1)建立了300MW汽轮发电机组有关轴承的非线性油膜力数据库,并在此基础上建立了非线性油膜力近似表达式,研制和改造两台能研究油膜非线性行为的试验台,在寻找椭圆轴承油膜力解析公式上取得重要进展;

(2)首次研究了余维5分岔及约束分岔问题,在内共振条件下的系统降维及模态分岔方面取得了进展;

(3)改进和发展了多自由度非线性动力学系统的数值分析方法,将线性时变系数动力系统等价类做了一定的拓展;

(4)提出了转子系统非线性动力学设计的总体设计框架,对非线性转子动力学稳定裕度的定义及计算方法进行了探索;

(5)对2台大型汽轮发电机组进行了现场振动故障分析和处理,完成了300MW汽轮发电机组模型试验台的设计和调试等。专家组认为该项目全面完成了计划,研究工作取得若干突出结果,进展情况评价为A。

(天津大学科技处 供稿)