

院士笔谈: 21 世纪的中国科技

21 世纪的量子化学

张乾二(厦门大学)

由于个人的兴趣, 长期以来执迷不悟地从事理论化学基础研究。随着年纪的老化和知识的增加, 才逐渐了解到“基础研究”常常是科学技术的创新和发展的源泉, 是培养高科技人才的摇篮。所以无论形势怎样变化, 我总是甘受“冷落”而理直气壮地从事基础理论研究。人们总是希望了解 21 世纪科学理论会怎样发展, 其建立和发展将对技术产业发生什么影响? 限于个人学识和洞察问题的能力, 不可能作出预测。根据我所了解的, 19 世纪末, 显然没有人会想到 20 世纪初量子力学理论的建立及其对 20 世纪高技术产业的发展会产生这样大的影响。有一点可以肯定的是, 科学技术和实验方法的建立和发展, 促使了量子力学理论的建立及其应用的高速发展。

谈到我的专业, 理论化学的一个主要基础是——量子化学(量子化学是应用物理学的量子力学原理和方法来研究化学体系的结构和化学反应性能的科学)到 21 世纪会怎样发展呢? 我也只能说, 随着微观结构理论在探索高科技产业中的应用, 以及计算机和计算技术的发展, 量子化学的应用研究将从小分子体系朝复杂分子体系(如材料科学、药物化学、分子生物学等等)方向发展; 不过, 还有一点可以说的是, 不论计算机和计算技术怎么发展, 其研究结果及研究方法的依据, 不能认为是非常可以“信得过”的。所以, 为了发展量子化学理论及其应用, 极其需要数学和物理学的新观点、新思想, 建立创新性的量子化学研究和计算的新方法, 只有这样才能使量子化学理论和应用走出困境。