

化学的今天和明天

- [中国科学院戴立信院士的推荐信](#)
- [译序](#)
- [前言](#)
- [作者简介](#)
- [美国专家的评介](#)
- [原书内容简介](#)
- [内容简介](#)
- [第1章 化学是一门中心的、实用的和创造性的科学](#)
 - [1.1 什么是化学？](#)
 - [1.2 化学家做些什么](#)
 - [1.3 早期的化学有些什么？](#)
 - [1.4 为什么化学家称这门学科为“中心科学”？](#)
 - [1.5 是什么使化学成为“实用的科学”和“创造性的科学”？](#)
 - [1.6 哪些是化学的基本原理？](#)
 - [1.7 化学领域有多大？](#)
- [关于未来1](#)
- [第2章 健康和生命的化学](#)
 - [2.1 药物化学在过去对人类健康有哪些贡献？](#)
 - [2.2 药物化学家是怎样设计或发现新药的？](#)
 - [2.3 药物化学家现在忙于什么问题？](#)
 - [2.4 化学家对了解生命的本质有什么贡献？](#)
 - [2.5 化学在分子生物学和生物技术中的作用是什么？](#)
- [关于未来2](#)
- [第3章 再谈化学是一门实用的科学](#)
 - [3.1 化学在住房和家庭陈设品方面起什么作用？](#)
 - [3.2 化学在穿着方面起什么作用？](#)
 - [3.3 化学和运输的关系怎样？](#)
 - [3.4 化学是如何改进食物供应的？](#)
 - [3.5 化学和国防的关系怎样？](#)
 - [3.6 化学和执法方面的关系怎样？](#)
 - [3.7 化学对生活的质量作出了哪些贡献？](#)
- [关于未来3](#)
- [第4章 化学与环境](#)
 - [4.1 我们能否有一个建立在先进技术上的现代社会，而这些技术不会无休止地污染地球？](#)
 - [4.2 工业能否干净地制造化学产品？](#)
 - [4.3 在解决从核能发电厂排放出放射性废弃物的问题上，化学家们能作什么贡献？](#)
 - [4.4 人类日常生活（如驾驶汽车）会造成什么样的污染？](#)
 - [4.5 我们能否控制虫害而不危害有用的动物呢？](#)
 - [4.6 我们怎样才能保证新合成的化学制品不会破坏环境，或没有不良的生物效](#)

- [应?](#)
- [关于未来 4](#)
- [第 5 章 计算机与化学——电子学的革命](#)
 - [5.1 现代的电子学革命诞生了计算机，化学对此有何贡献?](#)
 - [5.2 什么是计算化学?](#)
 - [5.3 计算化学怎样帮助我们测定蛋白质的形状?](#)
- [关于未来 5](#)
- [第 6 章 在生物体和工业中的催化作用](#)
 - [6.1 催化剂能扮演什么样的角色?](#)
 - [6.2 作为生命催化剂的酶是何物?](#)
 - [6.3 酶催化生物反应时，能加速多少? 又如何进行选择?](#)
 - [6.4 维生素能起生物催化作用吗?](#)
 - [6.5 酶的作用知多少?](#)
 - [6.6 对酶的认识是否有助于新药的设计?](#)
 - [6.7 汽车用的固态金属催化剂是怎样起作用的?](#)
 - [6.8 为什么工业界常用的固体催化剂并不具有金属特性?](#)
- [关于未来 6](#)
- [第 7 章 化学家怎样创造新分子](#)
 - [7.1 化学家如何决定应该研制什么新分子?](#)
 - [7.2 化学家如何计划未知分子的成功合成?](#)
 - [7.3 在哪里进行合成实验?](#)
 - [7.4 新化学物质一旦被创造出来，还要做些什么?](#)
- [关于未来 7](#)
- [第 8 章 认识分子结构和化学变化](#)
 - [8.1 化学家怎样测定新分子的结构?](#)
 - [8.2 分子的精细结构与它们的性质之间存在什么关系?](#)
 - [8.3 化学家如何测定化学反应的历程?](#)
 - [8.4 在哪里进行分子结构与性质及反应历程的研究?](#)
- [关于未来 8](#)
- [跋](#)

中国科学院戴立信院士的推荐信

1997 年美国化学会出版了“Chemistry Today and Tomorrow—The Central, Useful and Creative Science”（化学的今天和明天——化学是一门中心的、实用的和创造性的科学）一书。作者 Ronald Breslow (R. 布里斯罗) 是美国化学会会长，美国哥伦比亚大学教授，曾获美国 1991 年国家科学奖。这本书用简洁、清晰的语言向公众说明，化学对于人类文明生活的实际贡献以及化学是如何作出这些贡献的。本书出版后，受到美国化学界的普遍好评。康奈尔大学的 Roald Hoffmann (诺贝尔化学奖获得者) 认为，此书不单展示了化学的实用性，而且还展示了化学的生机勃勃的形象。另一位诺贝尔化学奖获得者，哈佛大学的 Dudley Herschbach 认为，这本书说明了分子科学是我们日常生活中各个方面的

基石。他又认为该书简洁易懂，可被广大读者所接受。普通读者说，阅读本书后，更感“以化学家为荣”。美国化学会为了普及化学科学的知识，将向全美中学化学教师赠送此书。

我不久前，得到此书，阅读之后确实感到很好：

1.可读性好，采用问答形式，更加通俗易懂。

2.全书分为八章，包括了医药，环境，工业化学等诸多方面，涉及到化学对文明生活的各方面关系。

3.本书不仅叙述了现状，还提出了很多未解决的问题，未说明的现象等，对于青年，对于科学工作者都有很好的启示。

本书的副题是：化学是一门中心的、实用的和创造性的科学。在人类多姿多彩的生活中，化学可说是无处不在的。著名有机化学家，诺贝尔奖获得者 R. B. Woodward 在讲述化学合成时曾说过：化学家在老的自然界旁边又建立起了一个新的自然界。我国著名化学家唐敖庆、唐有祺曾说：化学是总管物质在原子、分子层次上变化的学科。基于这个定义，我们说只要是生活在物质世界之中，化学的中心科学的地位实在是十分清楚的。和很多事物一样，化学也有它的负面影响，例如“光化学烟雾”，“化学武器”，“化学污染”……等。正如同火给人类带来了文明，但人类也有各种灭火技术、灭火手段来解决火的负面影响。化学污染等诸多问题正是化学家面临的课题。本书在每一章之末，都有“The Future”（关于未来）一节，列出了向化学家提出的主要挑战和有待解决的问题，这又是读者十分有兴趣的内容。

为此，我积极推荐翻译此书，并希望早日出版。相信人类的未来必将更加美好，而在实现更加美好的未来的努力中，化学将一如既往地，贡献出它的重大作用。

中国科学院上海有机化学研究所

戴立信

译序

本书作者 R. 布鲁斯罗是美国哥伦比亚大学教授。他在化学科学研究方面成绩卓著，曾获美国国家科学奖。他高度重视向公众普及化学知识，本书是他就任美国化学会会长期间的力作，书中用生动的语言，深入浅出

地向读者介绍了化学家对人类现代文明生活所做的巨大贡献，以及当今面临的挑战和机遇。

全书分 8 章，提出了 44 个有趣的问题，例如为什么说化学是中心科学？其实用性和创造性何在？化学对人类健康有何贡献？人类活动对环境产生了哪些污染？化学家有何对策？电子学的革命诞生了计算机，化学对此有何贡献？维生素是否有生物催化作用？工业常用固体催化剂与处理汽车尾气用的金属催化剂有何不同？化学家怎样设计并制造新的分子？怎样测定它们的结构？怎样研究化学反应的历程？等等。每章都以展望未来作为结尾。全书内容涉及人们的衣食住行，健康和医药，环境的污染与治理，石油化工，电子技术，化学合成，反应机理和结构测定等广阔领域。从中可以领悟化学在人类历史进程中的作用和地位。

本书出版前后，在美国已受到各界人士的普遍关注和好评。现经美国化学会、中国化学会和科学出版社协议商定，委托我们译成中文出版，以飨读者。我们先睹为快，感到这确实是一本高屋建瓴、深入浅出的优秀化学普及读物。本书还附印了英文版原文，以便读者对照参考。想必我国的广大科技工作者，大学和中学师生，行政管理领导者读后都将受到启发和收益。

本书的第 1、2 章由宋心琦（清华大学）翻译，第 3、4 章由张德和（中国科学院化学研究所）翻译，第 5、6 章由华彤文（北京大学）翻译，第 7、8 章由吴国庆（北京师范大学）翻译。全书由华彤文审校、统稿。

中国化学会邱希白、方智等，科学出版社为中译本的出版付出了辛勤的劳动，在此表示衷心感谢。同时也让我们代表广大的中国读者对 R. 布里斯罗教授和美国化学会表示由衷的敬意和感谢。

译者

前言

化学是最古老的科学之一。在改善人类生活方面，它也是最有成效的科学之一。应用化学于生产产品的工业——化学过程工业——在先进社会的生产中占有最大的份额；以美国为例，它们在全部分生产中要超过 30%。这个统计数字还不包括诸如电子、汽车、农业等相关工业的产值。后者都要用到化学工业的产品。

设计和生产化学产品诸如新药等要做多少工作，一般人是并不知道的，或者是想当然而已，其实大多数人并不知道这些有用的物质都是化学所创造的，我们常听见人们谈到“有毒化学物质”，或者“化学污染”，

但听不到关于化学在人类生活中绝对起着核心作用的声音，我试图在这本书中给化学描绘一个公平的图象。

我希望读者中，能够包括那些可能从事科学或者会用到科学知识的某些领域的学生们。我还希望家长们也能够阅读这本书，以便对这个影响我们全部生活并对未来有巨大作用的领域有所了解。

我并不要求读者事先学过任何化学课程，但我相信读者以前一定学过“化学物品”是由元素的原子结合成的分子所组成的。例如，一个分子的水含有两个氢原子和一个氧原子，因此化学式为 H_2O 。这些原子之间以化学键相联结。化学键通常用连接原子间的短线表示，因此 H_2O 可以表示为 $H-O-H$ 。这种表示方法简明地表示了每个氢原子都和氧原子相连接。在读这本书时，并不需要更多地知道有关化学键是由什么组成的，或者它们为什么能够把原子连接在一起。

本书内容是这样安排的，前面一部分主要涉及化学对文明生活所做的和将要做的贡献。后面一部分则讲一点化学家是如何做出这些贡献的。这部分尽管比较简略，但它着重介绍了人类在这个广阔的领域里的活动。对于可能考虑从事科学事业的青年人或者他们的父母来说，这部分可能特别有用。像在其他各章一样，它指出了新一代化学家将可能有所贡献的未来。

像目前的化学这样广阔的领域，要想充分地加以介绍是困难的，而要对未来做出预测则更加困难。为了协助我们完成这项工作，我曾请教过多位特别有远见的化学家，请他们告诉我个人对于未来所做的预测。有些有趣的想法就是由他们提出来的（如果将来和这些预测并不完全符合，他们当然不必负任何责任）。在此我向他们表示感谢。他们是：Brian Bent, John Bercaw, Robert Bergman, Esther Breslow, Jean Chmielewski, Harry Gray, Kendall Houk, Martin Karplus, Stephen Lippard, Harden McConnell, Ann McDermott, Arthur Patchett, Kenneth Raymond, John Ross, Alanna Schepartz, Stuart Schreiber, Richard Schrock, Edward Solomon, Gabor Somorjai, Barry Trost, George Whitesides, Richard Zare, 和 Ahmed Zewail。

此外，在成书的不同阶段，还有不少人，包括化学家和非化学家曾读过初稿，并提出了有益的建议。Jeff Holtmeier 是本书的发行编辑。本书的责任编辑 Esther Breslow, 我的同事 Brian Bent 和 Chemical & Engineering News 的编辑 Madeleine Jacobs, 也都提出过许多有益的批评。对本书很有帮助的其他读者有：Steve Baldwin, Frank Cardulla, Margaret Holland, Rita Nalebuff 和 Pat Smith 等。

作者简介



Ronald Breslow (R. 布里斯罗)，美国哥伦比亚大学教授，美国化学会会长。早在中学时，由于感受到化学可以像魔法一样把一种物质转变成另一种物质而对化学产生兴趣。1952年毕业于哈佛大学，主修化学。1953年获生物化学与药学硕士，1955年获有机化学博士。

他于1956年受聘于哥伦比亚大学，其后一直从事物理有机化学和生物有机化学的教学与科学研究工作。他的研究兴趣在于合成具有有趣性质的新分子，特别是那些能模仿酶起催化作用的分子，以及了解化学反应是怎样发生的。他曾获教学奖和多项研究奖，其中包括1991年布什总统授予的美国国家科学奖。此外，他已发表研究论文300余篇，著作有：

“Organic Reaction Mechanisms”（有机化学反应机理）和“Enzymes: The Machines of Life”（酶：生命的机器）等书。

美国专家的评介

化学带给人类的巨大效益，未曾有过像Breslow这样清楚而透彻的描述，而且不是从国民经济方面论述的。本书还包含着我所见过的有关酶及其他催化剂工作机理的最精辟的说明。并且不怕指出还有许多我们不了解的事情，诸如分子间如何相互作用。Breslow展示了化学不仅是一门实用的科学，并且是一门有生命力的能振奋人心的科学。

—Roald Hoffmann

康奈尔大学教授，诺贝尔化学奖获得者

专业科学家也欣赏这本书。他提供了一种能具有吸引力地向公众宣讲科学的极好榜样。

—Dudley Herschbach

哈佛大学，Barid 科学教授，诺贝尔化学奖获得者

这本书向读者提供了一幅人人都受益的,重要的,美丽而特殊的景观,这就是化学已渗入每个人的日常生活。这本书几乎适合各种水平的读者阅读。—— Frank Cardulla

高中化学教师, 曾获美国总统科学教学奖

原书内容简介

化学是最古老的学科之一,在改善人类生活方面,它也是最有成效的学科之一。你是否想知道化学家在做什么或化学是如何形成的?你想知道化学家如何设计和发明新药吗?或化学家如何改善食品供应?你是否体会化学家在交通运输、立法以至于家具等方面所起的重要作用吗?你是否愿成为下一代化学家中的成员,他们借助于具有想象力的高级计算机,继续解开酶的奥秘和基因的结构等难题,这对我们了解人类生命至关重要。这本可读性很强的书用非技术性的语言纵览化学的广大领域,而视点却放在化学对文明生活所做的具体贡献,并且阐明化学家是怎样做出这些贡献的。本书共8章,讨论了化学广阔的分支学科,如医药、环境、工业化学等,但总是着眼于蕴藏在这些领域背后有趣的细节及人类的活动。作者 Ronald Breslow 是一位获奖的教师和研究员,他曾获 1991 年美国国家科学奖,他用生动的“问答式”进行书写,他审视化学的今天,同时也鉴定留给将来的主要挑战和问题。想投身科学事业的年轻人,家长和指导员或其他读者,若渴望知道化学如何影响着我们的生活的世界,将得益于这本具有洞察力的好书。正如 Breslow 教导我们:化学是最古老的科学之一,经过下一代化学家的继续努力,它将仍是最新的科学之一。

内容简介

本书系美国著名化学家 R. 布里斯罗就任美国化学会会长期间撰写的力作。全书分 8 章,提出了 44 个热点话题,以一问一答的形式,向读者介绍化学家对现代文明生活所做的巨大贡献,以及当今面临的挑战和机遇。内容涉及衣食住行,健康医药,环境保护,电子学革命,石油化工,化学合成和反应机理等广阔领域。读者可以从中领略到化学在人类文明进程中的作用和地位。本书还附印了英文版原文,以便读者对照参考。

本书是一本通俗易懂的优秀普及读物。化学工作者,非化学类的科技工作者,高等学校的教师和学生,中等学校的教师和学生,各行各业的行政管理干部都值得一读。他们将会从书中得到启发,受到裨益。

Ronald Breslow

CHEMISTRY TODAY AND TOMORROW

——The Central, Useful and Creative Science

American Chemical Society 1997

ORIGINAL ENGLISH LANGUAGE EDITION PUBLISHED BY

Jones and Bartlett Publishers, Inc, 40 Tall Pine Drive Sudbury, MA
01776

COPYRIGHT 1997 ALL RIGHTS RESERVED

第 1 章 化学是一门中心的、实用的和创造性的科学

你看见了万物，因而你说“为什么能存在？”而我则冥想那个不曾存在过的世界，因而我说“为什么不能存在？”

——George Bernard Shaw, Back to Methuselah, Act I, Part 1

1.1 什么是化学？

化学是一门试图了解物质的性质和物质发生反应的科学。它涉及存在于自然界的物质——地球上的矿物，空气中的气体，海洋里的水和盐，在动物身上找到的化学物质——以及由人类创造的新物质。它涉及自然界的变化——因闪电而着火的树木，与生命有关的化学变化——还有那些由化学家发明和创造的新变化。

化学的历史很长。事实上，人类的化学活动可追溯到有历史记载以前的时期。

1.2 化学家做些什么

正如本章一开始所指出的那样，化学包含着两种不同类型的工作。有些化学家在研究自然界并试图了解它，同时另一些化学家则在创造自然界不存在的新物质和完成化学变化的新途径。自人类出现在地球上那一刻起，这两方面的工作就都有了，但是在上一个世纪以来它们的步伐大大地加快了。

1.3 早期的化学有些什么？

对自然界物质的好奇心，使得人们很早就从自然界分离纯粹化学物质方面获得了一些成功。人们已经发现，可以从花卉和某些昆虫提取颜料，并用来作画和染布。直到上个世纪，化学家才弄清楚这些天然颜料的详细化学结构。人类很早就通过化学变化来制造新的物质，这类新物质中，最早的可能是肥皂和活性炭。

加热木材时，它将失去水分并生成活性炭，在这个过程中，木材中的纤维素——一种含有碳，氢和氧并全由化学键联结在一起的化合物发生了化学反应，使氢和氧断裂下来变成为水而失去，剩下的碳成为活性炭，这是发生的主要化学变化。但是，仅靠把活性炭和水混在一起，不能使这个过程反过来生成纤维素。因为氧原子和氢原子不能自发地与碳生成所需的键。活性炭燃烧时的火焰温度比木材要高。考古文献表明，活性炭在史前时期已经得到应用。

肥皂的出现可能还要早些。肥皂不是一种天然产物，但它可以通过加热脂肪和碱使连接脂肪酸和甘油的某些键断裂的办法来制造。肥皂就是脂肪酸和碱生成的盐。因为木材燃烧时能够生成某些碱，这在木材燃烧后的灰烬中可以找到。所以人们相信，古代人类是从脂肪滴到烹调时的火焰上以后，开始注意到所产生的这种不寻常的物质的。

早期的这些“化学家们”的发现多属于偶然，而且在相当长的时间里，偶然性是发现的主要途径。偶然性对于发现至今仍然是重要的，但是随着人们化学知识的增长，现在我们经常通过设计来创造新的化学物质。至于化学家是怎样创造新分子的，将在第7章中进一步讨论。

当有了早期的随机发现的经验之后，人类开始有意识地将物质放在一起加热，看看会出现些什么。当一种我们现在称之为铁矿的物质和木炭一起加热时，产生了一种新物质**金属铁**（我们现在用由煤生产的焦炭来代替木炭）。铁矿中含有一种化合物，其中的铁原子是和氧原子化合在一起的。当和木炭一起加热时，让木炭中的碳原子和氧原子结合并以一氧化碳气体的形式把它们带走，遗留下来的就是金属铁。以金属形式天然存在的只有金和与铂相关的一些金属；其他所有的金属都是通过这类化学过程从它们的矿石中得到的。

当铜和锡一起被加热时，铜原子和锡原子以金属键相连接，生成**青铜**合金，它比铜或锡都硬。在公元前大约3600年的**青铜时代**，这种金属合金的坚硬使得它成为制造工具和武器的主要材料。青铜曾经是第一种能够保持锋利的边缘的金属。埃及人早在公元前1400年就会通过把一些天然矿物共热制造**玻璃**，当加热使主要反应发生时，就生成了玻璃。（图1.1）



图 1.1
玻璃是最古老的发明之一，这个古代器皿就是用玻璃制作的。

文明的进步涉及人类创造新物质以满足需要，而这些新物质则是由天然物质转变而成的。例如，把皮革染成褐色，已改变了它的化学性质。即使是烹调食物，也会改变它们的化学结构。这个世界上的万物都是由“化学物质”构成的，或者以化合物的形式存在，其中的原子以化学键联结在一起；或者在少数情况下以未与其他原子联结的形式存在，如氦气。没有可以称之为“与化学物质无关”的物质。实际上，“天然”化学物质并不总是对人有益的。已知由微生物和其他生物产生的某些天然化合物，就属于最危险的毒物之列。

现代化学致力于了解天然化合物的化学结构、性质和制造自然界已有的化合物构成的化学物质。本书的其他部分将从这些知识出发，介绍化学对日常生活所作的许多贡献，并举一些例子来加以说明，还有哪些问题是今天和明天的化学家将要解决的。

1.4 为什么化学家称这门学科为“中心科学”？

化学与很多的其他科学领域有关。它对农业、电子学、生物学、药学、环境科学、计算机科学、工程学、地质学、物理学、冶金学，以及很多其他的领域，都有重大的贡献。这不需要问物理学家感兴趣的问题：物质的终极特性是什么？而需要问化学家关心的问题：为什么这个世界上的物质性质千变万化？我们怎样才能控制并最有效地利用这些性质？

就像物理问题一样的有趣和激动人心，要回答化学家的问题，我们就要创造新药，生产用于制造住所、衣服和交通用的材料，发明提高和保证粮食供应的新办法，以及多方面地改善我们的生活。因此，我们认为化学在人类由古代穴居人的野蛮生活进化到现在这样一个世界的变化中起了“中心”的作用。使得我们不仅可以和自然处于和谐之中，而且可以和我们自己的愿望相吻合。

1.5 是什么使化学成为“实用的科学”和“创造性的科学”？

这两个问题是相互联系的。一些化学家在探索大自然时，为了找出过去并不知道的有效化学物质，曾通过大量地研究从植物和动物中发现的化合物来进行这种探索，而且仍在进行着。从海洋植物和动物中寻找新的化学物质也是目前一项主要的工作（图 1.2）。这些化合物一旦被分离出来并测定出它们的化学结构，化学家就可以进行创造了。

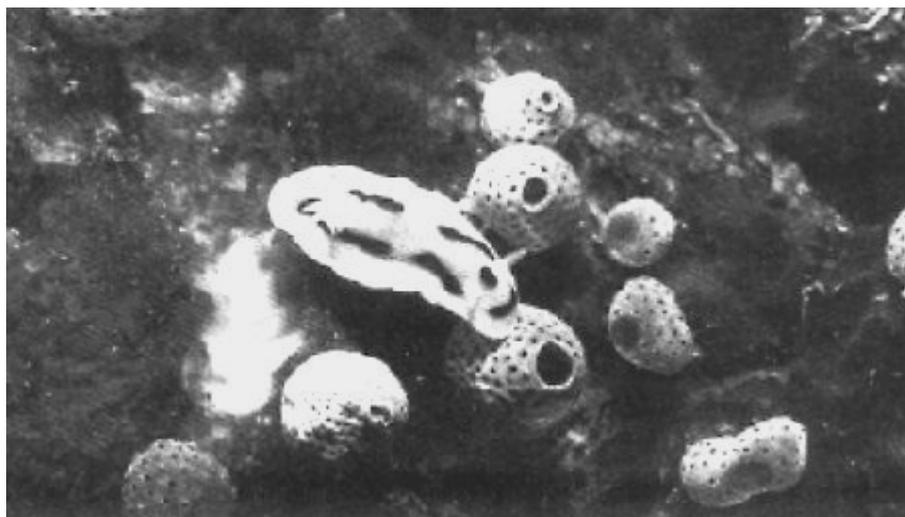


图 1.2

化学家在深海生物体内寻找有用的新化合物，包括药物。

通常我们不希望以生物为来源不断地获取有用的新药物，它可能是太具有破坏性和太昂贵了。化学家通常想办法来合成新发现的化合物，由一些比较简单的物质经过化学变化把它们制造出来，所以人们很快就能拥有这些新化合物。有的会通过合成来改变它们的原始化学结构，以便考察和天然化合物相近的新化合物是否能更好些。

还有一个理由是：对有用天然化学物质的寻找有时会遭到报复。大自然并不是像我们所想象的那样是个世外乐园，这里有着为生存而进行的凶猛战斗。昆虫要吃植物，同时有些植物已能排放出可以驱逐这些昆虫的化学物质。当我们知道这是些什么物质之后，我们就可以把它们合成出来。用它们来帮助保护我们的农作物。细菌并不只限于侵害人类，也可以侵害植物、动物和许多其他微生物，如酵母菌、霉菌等。有些生物可以产生强有力的抗生素来保护它们自己。人们所用的大多数高效抗生素是从大自然的化学那里学来的，虽然我们所用的这些药物有时只是经过化学家改进过的翻版物而已。

昆虫也用化学物质作为求偶时彼此间进行联络的信号。当我们知道这是些什么物质之后，我们就可以制造它们，并试图用它们来控制有害昆虫的繁殖。

化学中最有创造性的工作是设计和创造新的分子。这是如何进行的呢？这个问题将在第 2 及第 7 章详细地介绍，此处先给一个简单的答案。化学家通常是用所谓的“振荡和焙烧”的办法来制造新化合物的：把某些混合物放在一起加热看看有什么现象发生，就像从前制造金属和玻璃时那样。古代的炼丹家一生致力于加热各种混合物，梦想把铅变成黄金。他们没有成功，但是他们却创造了不少有趣的新的化学方法和新的物质（图 1.3）。



图 1.3
在实验室里工作的中世纪炼丹家希望通过加热不同的混合物来制造黄金，炼丹家的希望落空了，但却完成了许多有趣的发现。

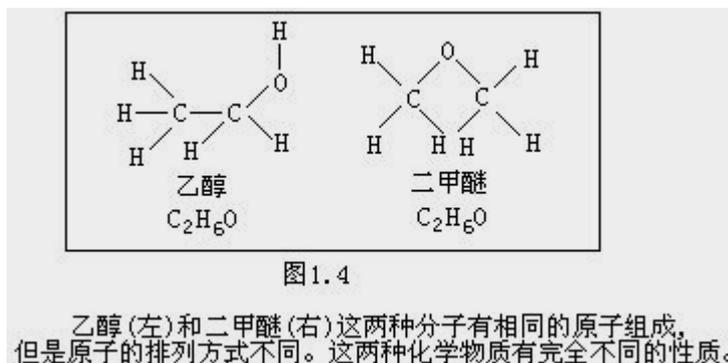
如今的合成通常是利用化学家们已发现的原理来进行设计的。有时需要用到 30 或者更多的化学步骤（这是一系列事先设想好的化学步骤）。从而使复杂的分子可以由现有的简单化学物质把它合成出来。如果对化学原理的理解不够清楚是做不到的。

1.6 哪些是化学的基本原理？

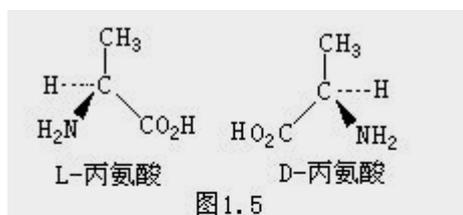
第一条也是最重要的原理是，化学物质是由分子组成的，分子中的不同元素的原子是以一定的方式联结在一起的。第二条原理是，现在已有大约 100 多种元素，它们被排列在**元素周期表**中。第三条原理是，这些元素是按照它们核内质子数目的递增而排列的，表现出**周期性**。亦即，当这些元素的原子序数（核内的质子数）增加时，每个元素经常表现出和已排在周期表中的某个元素有相似的性质。例如，在核中有三个质子的锂之后，接下来的元素的性质和锂的相似程度渐减，直至核中有 11 个质子的钠出现又变得相似起来。周期表在排列时，把这类相似的元素排成一列。锂所发生的反应，钠也会发生，虽然速率和能量不同；锂和钠只是相似而不是完全相同。

还有一条原理是，原子联结的方式将强烈地影响着化学物质的性质。当包含有共价连接（键）时特别明显。形成共价键时，两个原子靠它们之间公用的一对电子把它们联结在一起。例如，纤维素中联结碳原子、氧原子和氢原子的键就是**共价键**。大多数共价键是不容易断裂的，这就是为什么要把纤维素变成活性炭需要强热的原因。化学键的精细排列决定着化学性质。与此相反，像氯化钠一类的盐类则含有所谓的离子键。钠和氯不是直接联结在一起的，是靠带正电的钠离子和带负电的氯离子相吸引在一起的。当氯化钠溶于水时，钠离子和氯离子就各自分开了。

例如，乙醇（酒精饮料中的“兴奋物”）的化学式为 C_2H_6O 。亦即在乙醇分子中包含着两个碳原子，六个氢原子和一个氧原子。但是还有另一种叫做二甲醚的化合物具有相同的化学式，不过其中的原子的联结方式是不同的。因此，这两种化学物质具有完全不同的性质。化学家把这类化学式相同而原子排列不同的化合物，彼此都称做**同分异构物**。化学家对化学式为 C_2H_6O 的这两种同分异构物的符号画法见图 1.4。



至于原子在空间里的三维排列的化学结构之间，还要考虑更为精细的差别。两种化学物质间，即使存在着完全相同的原子键合，只要空间排列不同，这两种化学物质就可以区分开来。空间排列的差别可以有许多方面，但是最有趣的是手对称性，化学家称之为手性。当一个碳原子连接了四个不同的化学基团时，有两种可以排列的方式。例如在一种氨基酸叫做丙氨酸中，中心的碳原子外有四个不同的基团：即一个氢原子，一个氮原子和两个碳原子，差别在于和它们相邻的是什么。因而我们可以用两种不同的方式来排列它们，如图 1.5 所示。这两种排列之间的差别和左手与右手或左脚的鞋与右脚的鞋相似，亦即它们彼此互成**镜象**。其中之一记作 L-丙氨酸的通常是人体蛋白质中的一个部分，而它的镜象 D-丙氨酸却不是。天然蛋白质的手性，这意味着左手性的分子或右手性的分子的作用是不同的，就像右脚的鞋子只适合右脚而不适合另一只脚一样。很多药用化学物质可以以两种镜象形式存在，其中的一种药效较好，而另一种甚至可能是有害的，这经常是事实（参看第 2 章）。现代化学家常提到的挑战之一，就是找寻制造有预期手性的新分子的好方法（参看第 7 章）。



两种氨基酸-丙氨酸的同分异构体，这和右手与左手的不同类似，它们互成镜象。L-丙氨酸(左)是人体蛋白质的一个部分。D-丙氨酸是由微生物产生的，并结合在细胞膜上。有些抗生素利用了这种差别。和微生物中的D-丙氨酸结合，但不与人体细胞中的L-丙氨酸作用。

决定分子转变为其他分子的化学反应的原理有几条。一条原理是，如果反应的产物比起始物质更不稳定（具有更高的能量）时，这样的反应将不会发生。就像岩石会滚“下山”而不会滚“上山”一样，化学反应将自发地“滚下山”到达低能量的状态（能量低不是唯一的考虑，因为化学反应也会向着使混乱度变得最大的方向进行。化学家称后者为熵，一个简单的比喻是，洗一副新牌使其变得次序混乱。继续洗牌也不能使它重新变成有序）。

另一个原理是，即使反应是有利的，产物的能量比起始物质低，混乱度比起始物质大，反应也不一定必须进行得很快。这是一件好事情，生命物质和空气中的氧的燃烧反应从能量上看是一个有利反应，幸好是除非温度很高，例如在火焰中，否则不会立即发生。

最后的一个例子反映了另一条有关的原理：即使反应以低能量的产物为终止，仍需要一些额外的能量以便通过不稳定的过渡阶段。从 Denver 到 San Francisco 的一段旅程是一个很好的比方。从处于 5000ft（1ft=0.3048m）的 Denver 到处于海平面的 San Francisco 的总趋势是往下走，但是在爬越沿途的高山时却需要额外的能量。这种攀登沿途的山区时所需的额外能量，在化学中可由高温来提供，所以大多数化学反应在加热时都能加快。利用催化剂是加快有利反应的另一种办法（参看第 6 章）。

1.7 化学领域有多大？

事实上，人类的每项活动都用到一些由化学提供或加工的物质，同时许多活动中也包含着化学变化。这是本书其他部分的内容，在此只做简单的介绍。

1995 年，这一年中在世界范围内，化学家创造了 100 万种以上的新化合物。这个步伐还在加快。有些新分子正在考察作为新药物的可能性（参看第 2 章），另外一些则被用于制造新材料，如有用的塑料等（参看第 3 章）。新近发明的化学反应用于生产药用化合物和其他化学物质时常常使效率更高。

生物化学和分子生物学处于药学和生物学的边缘。现在科学家正在从事揭示生命与疾病的化学工作。利用这些信息，药物化学家可以设计新的药物（参看第 2 章）。

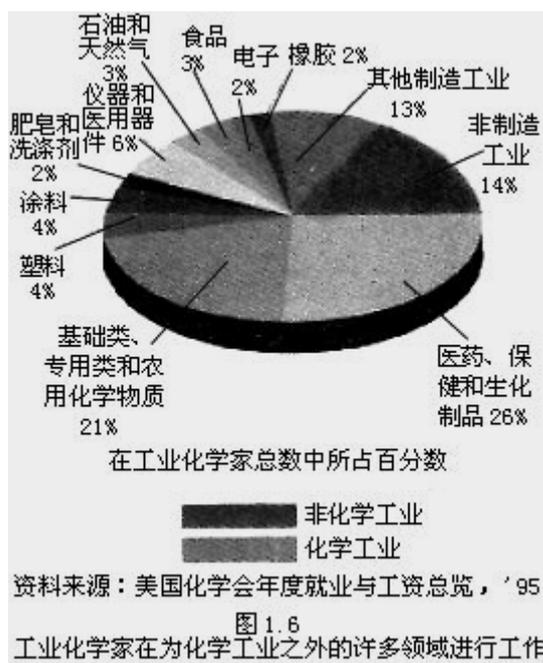
另外一些化学家在做环境方面的工作，研究正在发生些什么（例如，使臭氧产生空洞的化学反应）和探索如何使制造过程有利于环境（参看第 4 章）。开发这类过程是化学和制药工业的主要方向，他们曾发誓要使现代工业充分地考虑环境，而成为“绿色化学”的一部分。例如，在 Tennessee 有一个新的化学工厂，它放回河中的水竟比它取用时还洁净。

正如第 5 章的讨论所指出的，化学提供的特殊材料使得现代电子学成为可能，同时它也积极地使用着计算机。计算化学领域应用现代化学理论对以下方面进行预测：（1）未知化学物质的性质；（2）未知化学物质应有的几何形状；（3）在还没有研究清楚的分子之间将发生的反应；（4）这些未知反应的速率；（5）能够用来有效地制造复杂新分子的合成路线。

催化作用是生命化学的核心，也是现代化学工业的核心。化学的这个特别重要的部分将在第 6 章中介绍。很多化学家在从事新分子的创造性的合成工作。第 7 章将介绍这些工作是怎样做的。

一些化学家献身于测定新发现的或新合成的化学物质的详细结构。另一些实验化学家则运用最现代的技术来研究化学反应的极微细的细节，了解反应的精确几何学，使额外能量用于让反应迅速发生的途径，以及能量是如何留在产物中的等。将结果输入计算机模型，用以推断未知过程，帮助化学家发明新的反应。这两方面的工作将在第 8 章中介绍。

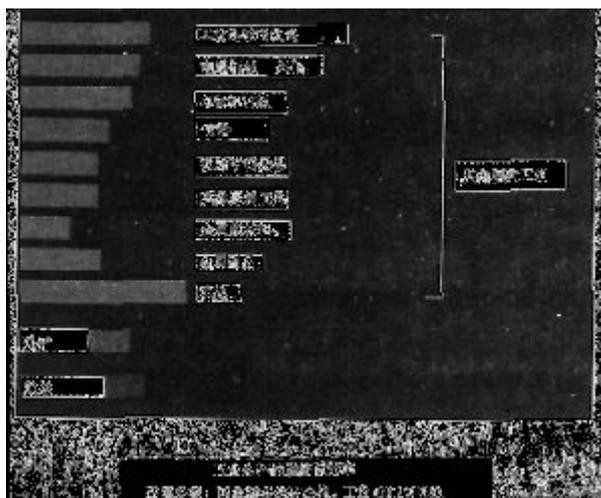
化学工程学使实验室化学转化为实际的生产方法有关。化学工程师帮助设计新的化学工厂和重新设计原有的化工厂以提高它的效率和环境安全性。



由所有这些活动创造的经济效益是非常巨大的。在化学工业本身和其密切相关的制药工业之外，我们必须把石油工业算进去，它通过改变某些化学结构的办法把原油变成汽油和其他产品；橡胶工业，造纸工业，玻璃和建材工业，钢铁工业，食品和饮料工业，纺织工业，皮革工业等，都要用到大量的化学，它们也雇用化学家；大约有 50% 的工业化学家是在这些相关工业中而不是在“化学”公司内任职的（图 1.6）。

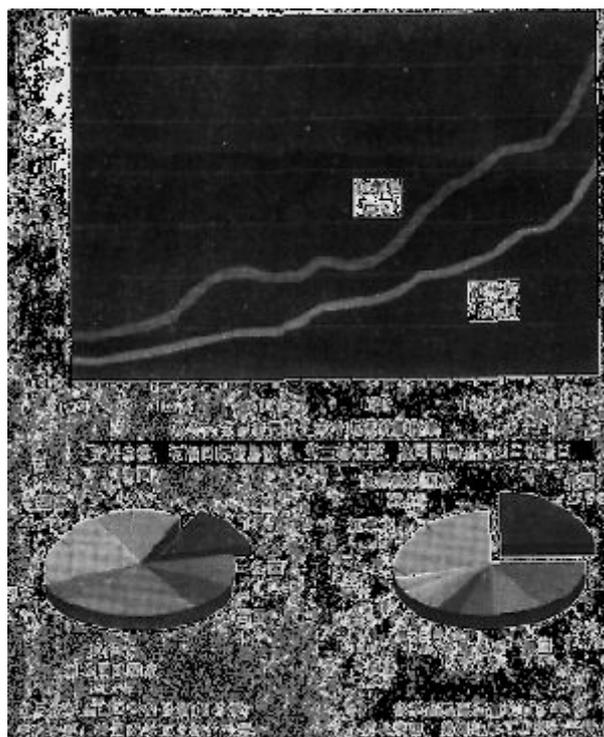
这些工业都称之为**化学过程工业**，它们利用化学反应和过程来制造产品。它们在美国的全部工业生产中按附加值计（亦即，除去起始物质的价值后，这些工业活动所赋予的经济价值）占30%以上。没有任何其他工业能有如此之大或者与之相近（图1.7）。

“化学品及相关产品和化学过程产品，如食品、纸张、橡胶、塑料、石材、粘土、玻璃、石英和皮革”



狭义的化学工业本身就雇用了100万人员，投入研究与开发的资金比任何工业都要多，占美国总出口的10%，同时是能够保持贸易达到平衡的少数工业之一。化学物质的国际贸易额每年为300亿美元，美国占有14%的市场（图1.8）。

化学的范围也反映在美国化学会的分会中，它集中地反映了这个组织中的150 000位会员的工作领域。这些分会经常开会，讨论所在领域内的进展和交流科研成果。



美国化学会的分会

小型化学企业	专业联谊会	氟化学
工业与工程化学	生物化学	药物化学
化学史	生物化学技术	高分子化学
化学教育	石油化学	高分子材料：科学与工程
化学文献	地质化学	胶体与表面化学
化学技术员	有机化学	核化学与技术
化学和法律	农业与食品化学	商业开发与管理
化学保健与安全	农药	碳水化合物化学
化学毒物学	纤维素，造纸与纺织品	燃料化学
分析化学	环境化学	橡胶
计算化学	肥料与土壤化学	
无机化学	物理化学	

关于未来 1

人们对新的化学的需要和过去一样大。我们需要并将创造新的药物以便战胜像癌症，艾滋病（AIDS），老年性痴呆（Alzheimer's disease），心脏病与中风等疾病，以延长我们的生命或者提高我们的生活质量。我们将发明产生和储存能量的新方法。从核反应堆分离和浓缩核产物的方法将使得核能为更多的人所接受。用新型电池储存能量的方法将使之用于电

动汽车，它优于现在的汽油型的机动车，而且更清洁。新的工业过程研究将使我们能够制造所需要的材料，而且又能够保护好我们的环境。

我们将把计算化学提高到专业的高度，可以预见到什么样的新分子含有所期望的性质，和如何去合成它。我们将从研究单个分子进步到能够充分地了解像细胞内有组织的化学体系的性质。我们将学会如何根据需要来制造在有效性和选择性方面与天然酶相近或更好的催化剂。这将使得在进行化学生产时，不必为了加快反应而消耗能量来提高温度，也不会因为反应的选择性不够高而生成那些并不需要的副产物。

在以下各章中，我会更详细地介绍有关化学未来的各个方面。化学的未来决定于今天的学生的参与，他们将是新一代的化学家，还有社会上其他方面的支持。有一个预见是我们可以有把握地做出的：有一些我们从来没有想到过的有趣的新鲜事物将会被发明或是被发现出来。科学包括化学总是给我们以种种惊讶，而且这将继续下去。正如物理学家 Leo Szilard 说的，“预言是困难的，特别是关于未来。”

第 2 章 健康和生命的化学

健康和智慧是生命的两大幸福。

——Menander of Greece, 公元前 300 年

化学和化学家的最重要贡献之中，有些是在人类和动物的健康方面。提高健康水平是医药工业的主要任务，有很多化学家被聘用来创造新药（图 2.1）。还有许多的化学工作也是为人类和动物的健康服务的。例如，化学家制造的杀虫剂能减少疟疾和其他虫源性疾病的困扰，这对于热带国家，更有重要的意义。用于防止皮肤癌和日晒灼伤的防晒霜。人造甜味剂对于不能吃糖的人们也是重要的。化学在疾病的**诊断**中起着核心的作用（图 2.2）。X 光照片是照相工业的一种特殊产品，化学家为此设计了新的胶片和新的照相过程。磁共振成像技术（MRI）的发明是核磁共振光谱应用于化学问题的研究结果。血液和尿的检查是体检项目中的常规项目，它就是由医药化学家所发明并经其他化学家在分析实验室中完成的。



图 2.1

现代化学研究人员每年设计和合成的新化学分子超过 100 万种，其中有很多被认为有可能成为药物。



图 2.2

利用人造放射性化合物核磁共振成像 (MRI) 技术由正电子射线断层成像 (PET) 法得到的猴脑影像。

在本章中，我们将集中讲座两个具有普遍意义的题目：创造新药的**药物化学**；发现与生命有关的化学物质及其化学变化的**生物化学**。

2.1 药物化学在过去对人类健康有哪些贡献？

1900 年在美国出生的一名男子的期望寿命只有 47 岁，但是今天出生在这个国家的一名男子的期望寿命大约是 75 岁。这个难以置信的进步可以主要归功于药物化学家的贡献。其中最重要的当数抗菌素的开发。

19 世纪 20 年代，细菌感染常导致死亡。后来化学家开始合成许多用于布料的染料，包括某些带有称做氨磺酰基官能团的化合物。德国科学家 Gerhard Domagk 对多种新得到的化合物进行试验，观察其中是否有可以杀死细菌的化合物。1932 年，他找到了一种叫做 Prontosil 的红棕色的染料。有效地治愈了受细菌致命感染的老鼠。于是他用此药对一位因患细菌性血中毒已处于无望状态的孩子进行了试验，使她得以康复。

在此启发下（Domagk 因此获得了 1939 年诺贝尔生理及医药奖），化学家制备了许多含有氨磺酰基的新型药物，即**磺氨基药物、磺胺**曾经广为使用，现在有时仍用于临床。某些药物可以杀死细菌而不伤害人畜的发现，开辟了一个主要的新研究领域，于是许许多多性能更好的抗菌化合物就此不断地被创造或发现出来。正如后面将介绍的那样，它们仍然是活跃的研究课题。

生物化学方面的研究已经弄清楚了磺胺能够杀菌同时对人无毒的原因：人和细菌的生物化学是不同的。细菌要制造**叶酸**的基础维生素，而磺胺能够阻碍细菌中制造叶酸的酶；没有叶酸，细菌基因不能存活。人体内没有这种酶，我们可从食物中获取叶酸。从某种意义上来看，因为人在生物化学方面的缺陷，反而使人得到安全。这种缺陷是，我们不能制造一种重要的维生素（但是我们可以从食物中得到它）。

发现磺胺药物的过程称做**随机筛选**过程。称之为随机，是因为不存在任何合乎逻辑的理由可以期望一种衣用染料会是一种选择性的杀菌剂。如今随机筛选方法的应用仍然非常普遍。但是，如果有了更多的生物化学信息，药物化学家也越来越多地用另一种称之为**合理药物设计**的方法，用以设计和制造具有所期望的生物效应的特殊分子。有时仍然会发现，有些为了特殊医疗问题作为合理药物而设计的化合物却失败了，而通过随机筛选后成为其他用途的“非合理设计的”药物。

磺胺药物的发现，开创了今天的**抗生素**领域，但是这还不是化学对健康的第一个贡献。用于表皮创伤的**消毒剂**，如碘或苯酚比它还要早些，此外还有**麻醉剂**。酒精是最早的麻醉剂之一；过去曾经用过让患者在疼痛的手术之前先使之酒醉的办法。后来发现乙醚更加有效，从而使无痛外科手术和牙科手术成为可能。自那以后，又发明了许多更好的麻醉剂，包括像普鲁卡因（Novocain）这样的局部麻醉剂在内。如果没有麻醉剂，现代的外科手术是不可能实现的。

目前，用来治疗人类各种疾病的药用化合物已基本齐全，虽然对于许多重要的疾病还不是完全有效。除去抗菌素外，我们现在还有抗病毒剂和抗真菌剂，以及用于寄生虫病的药物。不过，更好的抗病毒剂和抗霉菌剂仍有需要。我们已经有了处理中风和心绞痛的药物和用来处理溃疡病的药物。我们也已经有了止痛药和抗抑郁药，以及处理各种激素缺乏症的化合物。还有抗组胺剂，控制运动疾病的药物和降低胆固醇的药物。抗癌药和抗爱滋病的药也已经有了，但是这些病还未能完全控制。正如我们在本章的最后一部分将要看到的那样，有许多目前的工作是旨在征服它们的。

2.2 药物化学家是怎样设计或发现新药的？

主要的方法曾经是，现在仍然是**随机筛选法**。它仍在应用，但是包括了一种令人兴奋的新方法，称作**组合化学法**。用这种方法，可以一次就按排序制造出上千种带有表现其特性的化学“附加物”的新化学物质来。整个一组化合物可以根据某些生物靶（例如酶）来进行同步筛选，挑出其中的有效化合物加以鉴定。以这些有效化合物的化学结构作为起点，再合成新的相关化合物用于试验。在**随机筛选法**中，任意一种新化合物表现出生物活性的机会是很小的，但是具备同步制造和筛选的能力之后，找到一种有价值的药物的机会就大大增加了。

另一种办法是从自然界寻找有效的化学物质。植物、真菌、昆虫和微生物本身都能制造很多不寻常的化合物，以某种有用的性质来对它们进行筛选。在这种找寻中也存在着某些规律性。细菌也侵害动物、植物甚至于真菌，所以人类并不是唯一的受害者。很多有机体已经有一些保护它们自身的方法。有几种最有效的抗菌剂，就是微生物之间进行战斗的产物，在这场战斗中，以细菌为一方，霉菌和真菌为另一方。青霉素、链霉素和万古霉素就是霉菌产生的抵抗物质的例子。我们可以通过培养霉菌来继续制造它们。但是化学家经常利用合成化学提供一种更好的制备方法。

在现代医药公司中，大约有一半的科学研究人员是化学家，他们的主要工作是合成新的分子，或者为那些已经证明为有用的化合物设计出好的生产路线。更多的时候，他们由生物化学所提供的信息决定该如何去做。

例如我们已经知道，**血压**是由特殊的酶产生的激素所控制的。也已经研究过这些酶是怎样工作的（有关更详细的内容可参看第 6 章）。药物化学家用了两种方法来试图使这些酶被阻塞，从而使血压降低。

一种方法是考虑和酶结合的通常是些什么样的生物分子。然后他们合成和天然分子看起来很像，但可能结合能力更强的新分子。对血压起控制作用的重要酶之一是含有锌原子的那种酶，所以设计出来的新分子上都带有已知和锌结合能力很强的化学基团。这种方案非常有效，用这种思路设计的一些药物现在正用作处理高血压的药剂。

第二种方法是对酶本身设法了解得到更多一些。生物化学家对酶进行分离和提纯，并把它们做成晶体。然后化学家利用 X 射线测定酶的三维结构，并显示在计算机屏幕上。药物化学家用**计算机模拟**各种可能的药物，看看何者可以和计算机显示的酶结构相匹配（图 2.3）。有时他们可以计算出来这种可能的药物的结合能力会有多大（计算化学将在第 5 章中进一步讨论）。最后，药物化学家从中选出一种有待合成的药物品种。继而完成这种有希望的药物的化学合成（参看第 7 章），并对其生物活性进行测试。虽然介绍的这些方法是对酶来说的，类似的方法也可用于激素。亦即合成与人体能起作用的分子，而这部分人体是激素通常起作用的部分。一般情况下，对激素起作用的这个部分的化学结构信息不多，所以主要采取

的方法是模仿激素的化学结构。如果需要更强的这种效应，作为模拟物的化合物则具有和激素相同的效应，起着“帮手”的作用。如果使它起着防止激素到达靶位的作用，则成为一种使过高的激素效应降低时用的“对手”。

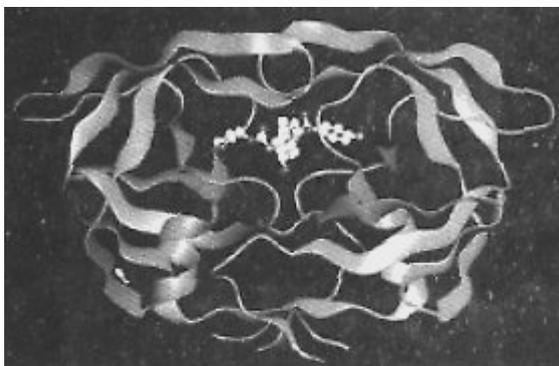


图 2.3

一种可能与 HIV 功能活化酶相结合的待试药物在计算机上的图象，HIV 是引起爱滋病的病毒，蛋白质显示为带状，它表示链是如何折叠的，但不能表明分子的化学细节。

2.3 药物化学家现在忙于什么问题？

优秀的科学家有能力确定，并且进而解决那些重要的问题。医药公司各自对于哪些是最重要的研究领域都有自己的看法。不过还是有一些问题是大家都关注的。

有些细菌对最有效的抗菌素的抗药性是一个日益增长的威胁。当常用的抗菌素杀死绝大多数能引起感染的细菌时，有少数细菌活了下来，因为它们的生物化学改变得使之对于当前使用的抗菌素产生免疫性。我们可以把这看成是一种“适者生存”。由于这些危险细菌的存活使我们的生存存在着疑问，我们不能忽视这个问题。为了更加安全，应当发明一些这些新菌株无法抗拒的新抗生素。

例如**青霉素**在杀菌方面是非常有效的，但是有些细菌已经有了能破坏青霉素的酶。开发具有青霉素化学结构的变种的工作正在进行之中，它们将不能被细菌的酶所破坏；另一方面的工作是寻找可以阻塞这类细菌酶的药物，使得青霉素仍可以起作用。

引起**爱滋病**（AIDS）的人体免疫缺陷病毒（HIV）是摆在我们面前的一大难题。这种病毒使细胞产生一种特殊的酶。它在病毒的生命循环中是关键性的一步。药物化学家正致力于设计能阻断这种酶的药物，从而使感染停止。以有关酶反应的知识为基础，用的是合理药物设计的方法。可是，这种病毒可以很快地改变它的生物化学，生成的新品种就再也不能用这些药物使之失活了。许多科研实验室和工厂实验室的药物化学家组成的大军

和这种危险的病毒之间的战斗正在进行着。我们能否战胜或者会是什么样，还是一个未知数。

HIV 不是人类唯一的病毒敌人。引起**流行性感**冒的病毒继续威胁着我们，对于病毒感染至今有效的处理方法屈指可数。找寻抗病毒药是很多医药公司的普遍课题。

几乎每家医药公司都有一项**抗癌药**的计划。有些方案看来是可行的。有一种方案是：化学家试着建议或发明新的能杀死癌细胞而不伤害正常细胞的化合物。这是一场艰苦的挑战，但是已经制出了一些有效的药物，而且会越来越多。另一种方案是，化学家致力于开发能改变癌细胞行为的药物，使它的活动趋于正常。已经有了不少好的苗头。但是如果缺少了化学家、生物化学家和生物学家的共同努力，这个问题是无法解决的。

另一个目前有较大兴趣的领域与**器官移植**有关，例如把一个健康的心脏移植到患者体中。存在的问题主要在于人体把这样一种移植的心脏认作一种异物而试图排斥它。为了使器官移植能够成功，关于能阻碍这种排异性的新药用化合物的研究非常活跃。

当药物化学使我们的生命过程延长时，我们可以尝试着来关心随着年老而带来的问题了，其中之一是**早老痴呆症** (Alzheimer's disease)，它破坏很多老年人的生活质量。医药公司和科学实验室正在试图开发出迎接这一挑战的药物。

药物释放属于药物化学的一个特别领域。现代塑料可以用来制造以可控方式释放所需药物或激素的器件或植入物。即使是吞食的含有药物或维生素的药片，如何在需要时释放其中的药物的设计也是从化学方面有过考虑的，例如在胃里而不要在口中。研究如何使药物直达指定的靶位，特别是正在生长着的肿瘤的问题，引起了很大的兴趣。达靶可以降低不希望出现药物在人体其他部分可能产生的副作用。

2.4 化学家对了解生命的本质有什么贡献？

与了解生命有关的化学分支叫做**生物化学**。还有一个领域叫做**分子生物学**。它是生物化学的一个部分，但偏重于运载和传递基因信息的分子，即 RNA 和 DNA。现代科学中一些最激动人心的发现就是在这个迅速变化的领域中做出来的。

我们所吃的食物转化为所有维持生命需要的化合物，如蛋白质、碳水化合物、脂肪和激素。也制造一些特殊的分子用来供给化学变化所需的能量，这也是生命的一个部分，如肌肉运动所需的功。在这个世纪里，生物化学家已经差不多发现了其中所包含的所有的几百个化学通道。

再有就是，所有这些生物化学变化都是由酶所催化的，酶是能使化学反应变得更快和更有选择性的蛋白质。生物化学家已经鉴定过其中大部分的酶，大约有 7000 种左右。并对它们是如何工作的做了大量的研究。更多的有关酶和催化作用的讨论放在第 6 章。

酶和所有其他的重要蛋白质都是在基因的指导下制造出来的，基因携带了能够辨别应该用哪些氨基酸来制造这种蛋白质以及它们在蛋白质中顺序的密码。然后氨基酸联结而成的链折叠成正确的形状以完成它们的功能，在第 5 章中还要讨论。生物化学家和分子生物学家利用新的化学方法来测定基因的分子结构，和利用其他的化学方法来改变这些结构以制造不同的基因。人们对这个领域在利用化学于健康问题方面的未来进展，给予了很高的期望。

有关不同动物在化学方面的差别的研究也已取得很大的进展。例如，知道了有些对细菌很重要而对人并不重要的生物化学之后，使我们在设计新的抗菌剂方面有了实质性的进展。植物也有一条特殊的生化途径——**光合作用**，通过它太阳能被用作化学合成的能量来源。我们现在对它已经有了比较详细的了解。

我们在第 1 章中曾经指出过，如果产物的稳定性比起始物质差得很多时，反应是不会发生的。这条规律有一个例外，即从某些途径能够为它提供额外的能量时，就像在光合作用中那样。这个额外的能量使得植物可以把二氧化碳和水转化为氧和糖，这是一个产物的稳定性比起始物质要低得多的过程。推动这个在其他条件下不易进行的反应所需的能量来自阳光。

光合作用化学简介

在早期的工作中，化学家研究了**叶绿素**的详细分子结构，它是光合作用的核心化合物。在近期的工作中，1988 年获得诺贝尔化学奖的 Harmut Michel, Johann Disenhofer, 和 Robert Huber 用了一种叫做 X 射线结晶学的技术建立起这个光合作用中心的化学结构，其中有序地排列着某些蛋白质和叶绿素分子。在这个结构中，射入的光被捕获并利用来制造某些高能分子。

光能进入叶绿素分子后使叶绿素的一个电子提升到高能级，因此这个电子可以转移到光合作用中心的另一个分子上去。在电子转移的过程中，有些无机磷酸盐分子结合成为一种称做 ATP 的高能分子，它是推动很多生化过程的化学能源。例如，ATP 是肌肉运动时的燃料。电子的传递止于一种由烟酸（见第 59 页图 7.2）衍生而成的辅酶之上，并用来完成其他的生物化学过程。失去电子的叶绿素分子最后从水中拿回电子，水则转化为氧 (O_2)。

有机化学家 Melvin Calvin 由于找到了二氧化碳通过光合作用转化为糖和其他重要的化合物如氨基酸等的变化序列，得到 1961 年的诺贝尔化

学奖。他设计的主要实验，和很多伟大科学家的研究思想一样，思想简单但光彩夺目。

已经知道，用放射性 C-14 “标记”的二氧化碳可用于光合作用，使产物中含有 C-14 并成为有放射性的化合物。Calvin 知道他如何利用已做成的生物化学产物来研究这个序列。他装置了一套仪器，让海藻在其中进行光合作用，用的是常见的二氧化碳，水和光，然后突然往仪器里倒进一些放射性二氧化碳。经过一段时间之后，他把全部混合物倒入沸腾的酒精中。因为关键性的酶在这种条件下变得不稳定，使得所有的生物化学过程都会停止。

如果加入 C-14 标记的二氧化碳后只等不太长的时间就用沸腾的酒精处理，从分离出来的产物中知道所有的放射性都存在于与最简单的糖有关的三碳化合物中，如果在用酒精猝灭这个反应之前等的时间长一些，在三碳化合物中仍然可以找到放射性，但是在与葡萄糖和果糖有关的化合物中也能找到放射性，葡萄糖和果糖都是六碳糖。如果在猝灭反应前等待的时间再长一些，其他的生物性化合物也成为有放射性的了。

首先被标记的化合物是和二氧化碳中的碳结合的第一个化合物，其后的化合物则是沿着某条路径进行的生化反应的产物。利用这个简单的实验，他测定了反应的序列。其余的工作则是确认对这些变化起催化作用的全部酶。

2.5 化学在分子生物学和生物技术中的作用是什么？

现代技术使得科学家能够分离和鉴定对制造特殊蛋白质有指令作用的基因，然后把这些基因结合到生物体如酵母菌中去。当这个酵母菌生长时，它将制造出所期望的蛋白质来。有时这种天然蛋白质本身是很重要的，例如**胰岛素**或**人体生长激素**。有些时候通过化学方法来改变基因以修饰其序列，从而生成具有更好的性质的新蛋白质。

化学家，包括生物化学家和分子生物学家为完成这些操作和分离及纯化最后得到的蛋白质提供了方法。这是一个迅猛发展的领域，对它的未来人们寄予了很大的希望。

近年来有一个特别受到关注的领域，即人体**基因组的序列化**。基因组指在细胞核中的遗传性 DNA 的全部物质，它携带着上千个单独的基因，每一个都包含有数百个或更多的 DNA 单元，起着密码信的作用。DNA 是一种用磷酸根联结起来的一个个单元所组成的大分子。每个单元含有一种糖即脱氧核糖，它携有符号为 A, G, C 和 T 的四种碱基中的一种。它们被复制成含有核苷酸的信使 RNA，RNA 和 DNA 很相似，但 RNA 中核糖的密码符号为 A, G, C 和 U，而 DNA 中的密码符号为 A, G, C 和 T，即 DNA 中的 T 在 RNA 中变为一种化学上相关的 U，而这个 RNA 指导了特殊蛋白质的合成。

据估算，人体基因组中有数以亿计的这种单元。其中约有 10% 是用于蛋白质组成的氨基酸的密码信。其余的基因组不携有蛋白质用的密码，这些其他的 DNA 的作用还没有完全了解。

在这个有历史意义的计划中，要找出人体的基因组序列，并对每种基因中的化学序列进行测定，一次一个密码信。希望能使我们基本上了解每种基因的功能，也许会找到以我们不曾知道的基因组片段作为密码的新蛋白质。

一个新的领域正在开拓之中，还没有人能够确切地知道将会有怎样的结果。可是基因组中的化学序列决定了我们将会知道些什么，而且要对这方面的知识能解决什么的秘密做出判断，也必须先知道它们。考虑到化学在了解生命中的重要性和药物化学对健康的重要性，在医务人员的正规教育中包括不少化学课程一事就不足为奇了。在医疗预科学习阶段，在美国通常要求他们至少选修两年的大学化学课程，有时还会要求再选一门生物化学课程。然后在医学院以他们的化学背景为基础学习生物化学和药理学方面的课程。和本世纪初医生的教育相比，已经发生了巨大的变化，因为当时懂得的生物化学和可用的药物是如此之少。今天的医生需要为化学在人类健康中起着更大作用的明天做好准备。

关于未来 2

药物化学家同意我们发展对人类最致命的疾病的有效处理方法的计划。治疗癌症的非常可信的方法正在研究之中。至少对于这种病的某几种形式可望取得最终的胜利，主要的问题是何时可以达到这个目标。与高胆固醇有关的脑中风和心脏病将得到控制，部分取决于更为健康的生活方式，部分和新的药剂有关。针对爱滋病的战斗已有进展，可望取得更大的进展。

生活的质量也是重要的，很多非致命的疾病是目前的研究对象。一旦对于早老痴呆症的生物学和化学有了更多的了解时，可望发明有效的药剂。随着年龄的增长，某些激素的水平下降，防止激素水平下降或者取代这种激素可以使老年生活更加丰富多彩。因缺少钙质而导致的骨质疏松是引起老年人特别是妇女病痛的原因，是目前药理研究的课题之一。医治肥胖病的药物将能延年益寿，改善生活质量。帮助脑中风愈后神经康复的药物，治疗精神分裂症的药物，治疗关节炎的更有效的方法等，都将在不久的将来可能实现。

生物化学的进展激励出新药学领域的研究热情。例如，最近发现由一个氮原子和一个氧原子结合而成的简单分子 NO，居然是一种重要的信使分子。它在氨基酸（精氨酸）的一个生物化学反应中生成，可激发人体产生许多生物响应。它有助于控制血压。药物化学家现在正在研究如何通过控制产生 NO 的酶的活性来控制人体内 NO 的水平。

最令人感兴趣的新领域之一是基因疗法。有些人体疾病和我们自身的基因缺陷有关，并不是由某种微生物的侵害而引起的。药物化学家正在尝试着发展一种用向细胞释放 DNA 片段的方法，使其通过结合以替代有缺损的部分。这是一个充满竞争的领域，但还有待于发展。未来的基因疗法将有助于处理许多目前尚不能解决的与健康有关的问题。

糖尿病患者不能控制体内血液中的葡萄糖水平，通常在血糖水平高时胰腺将分泌胰岛素，但是有一种糖尿病，是因这种控制机制有缺陷而引起的。一种有趣的治疗方法称为“人造胰腺”的方法，它能检测葡萄糖的水平，然后往血液中释放正确数量的胰岛素以保持葡萄糖处于健康者的水平。葡萄糖水平可以在有对葡萄糖专一的酶的存在下用电化学方法进行测定；将葡萄糖传感器结合在一个配有释放胰岛素的微型泵的器件里的可能性将是非常具有吸引力的。

有大量的研究正致力于改进**诊断疾病**用的方法。目前有关细菌感染时本质，已经通过培养病菌使其达到能够用显微镜或化学检验以进行鉴定的方法建立了起来。用于培养菌株所需的时间会延误有效的治疗，乃至产生严重的后果。化学家现已提供很多更灵敏的方法，使得鉴定可以在几小时或更短的时间内完成，因而可以立即对症下药。用于测定血液中重要激素含量或治疗时所用药量的灵敏方法也在发展之中。这些新技术正在使得医疗化学领域面貌一新。

合成化学在药学中起着特殊的作用，它能制造出可用于解剖学的材料。骨骼的化学已经了解，能够代替骨骼和牙齿并被人体所接受的新材料将会制造出来（有些已经用于临床）。还有可以在车祸后需要用的暂时代替皮肤的材料。替代静脉或动脉血管甚至人体器官的材料，要求与人体生物学具有相容性，这样才不会引起过敏性反应。例如生物相容性对于隐形眼镜也是非常重要的（图 2.4），这是化学今后将能做出更大贡献的一个领域。材料需要具有满足其功能的物理性质，但是它们也需要人体感到具有“生物性”的特殊表面层。



图 2.4
隐形眼镜。用现代合成材料制造
这类医用器件已成为可能。

在了解生命的持续努力中，对大脑是如何工作的研究已经有了激动人心的进展。关于在大脑和人体的其他部分都存在的神经信号在早些时候就已经有报了解，它们是由从一根神经传给另一根神经的特殊化学物质所传递的。事实上这个知识已被药物化学家用来发明治疗中央神经系统疾病，如忧郁症和精神变态等的新药。目前在了解记忆的本质方面已取得进展。

已经知道，记忆包含着特殊蛋白质分子的合成，以及脑细胞中的物理变化，但是还有很多需要研究的地方。将来我们希望对脑功能有更多的了解，包括近期和远期记忆，就像我们现在了解神经是如何传输信号那样。有了这个知识我们有可能使人类的智慧提高，真是一个令人神往的前景啊。

现在有一个叫做**生命前化学**（prebiotic chemistry）的领域，它研究生命是怎样能够在地球上产生的，是否真的是由原始化学自发进化成为生命化学的。一旦了解了这个过程是怎样才可能发生的以后，将有助于我们了解在其他星球上发生生命所需的条件。

在这个领域中，有一些问题已经解决。例如，已经证明，构筑现代生命的化学建筑板块，如氨基酸、糖和 DNA 与 RNA 的组分，可以由原始地球上已有的化合物自动生成。推动化学反应所需要的来自太阳的紫外线，闪电时的放电和其他条件在这个星球上都应该早已具备。

这个领域中有一个特殊的问题最近已获得解决。当前的生物利用酶来完成 RNA 的生物化学合成，同时 RNA 又指导酶的合成，酶是蛋白质。如果每一种组成都是制造另一种时所需要的，那么这样的一种循环是如何能够自发地开始的呢？Thomas Cech 和 Sydney Altman 找到了答案，他们的发现得到了 1989 年的诺贝尔化学奖。因为有些 RNA 分子可以像酶一样催化反应，虽然不如酶的效率高。这个发现意味着，在最古老的生命体内的 RNA，应当能同时起信使分子（今天的 RNA 所起的作用）作用和将信息转化为制造新分子的催化剂作用。

根据这个思想，最早的生命曾经是一个 RNA 的世界。后来被现在的世界所代替，现在已由 RNA，DNA 和蛋白质共同来完成这些一度由 RNA 独自完成的作用了。

生物活体的化学过程当然是在细胞中进行的。化学家仍然需要知道如何用人造体系来仿效活细胞的性质，还要了解为什么细胞能够自动地形成。

在发展能够仿效生命起源所需化学的体系方面可望继续取得进展。这类体系将不用于证明在地球上生命发生的途径，但是可以表明它在地球上或者在宇宙的其他地方存在着这种可能性。

这些有真知灼见的化学家们对某些方面未来进展的展望。这些都是激动人心而且仍然充满着竞争的课题。年轻的未来的化学家们应当考虑为完

成健康和生命的化学中这些和其他的重要目标贡献自己的力量。在这个重要的领域中，为新思想留有充分发挥的余地，有着大量新化学家们感兴趣的问题。

(宋心琦 译)

第3章 再谈化学是一门实用的科学

不，一千个不；不会存在一类科学，它可以冠以应用科学之名。确有科学与科学的应用，它俩结合在一起犹如树与它结出的果实一样。

——Louis Pasteur, 1871

法国化学家，Louis Pasteur 发明了低温灭菌法和免疫法。用他的引语来说，由化学这棵树上长出的果子确实是丰富的。可以毫不夸张地说，现代生活之所以不同于早先时期的，是由于我们学会了如何取用天然物质并加以改变，使之更好地服务于我们。

在这一章中，我们将考察一下化学在我们的每日经历中所起的作用。从早晨开始，我们在用化学产品建造的住宅和公寓中醒来。家具是部分地用化学工业生产的现代材料制作的。我们用化学家们设计的肥皂和牙膏和穿上合成纤维和合成染料制成的衣着。即使天然的纤维（如羊毛或棉花）也是经化学品处理过的和上色来改进它们的性质。

为了保护起见，我们的食品被包装起来和冷藏起来，并用肥料，除草剂，和农药使之成长。家畜用兽医药来防病。维生素类可以加到食品中或制成片剂后口服。甚至我们购买的天然食品，诸如牛奶，必须要经化学检验来保证纯度。



图 3.1

制造一种有用的化学药品的生产车间。
精心设计时要认真地关心和对待环境。

我们的交通工具——汽车、火车、飞机——在很大程度上是要依靠化学加工业的产品。晨报是印刷在经化学方法制成的纸上，所用的油墨是由

化学家们制造的，用于说明事物的照片要用化学家们制造的卷片。在我们生活中的所有金属制品都是用矿石经过以化学为基础的冶炼转化变成金属或再将金属转变成合金。化学油漆还能保护它们。

化妆品是由化学家制造和检验过的。执法用的和国防上用的武器要依靠化学。事实上，在我们日常生活中用的产品中很难找出有那一种不是依靠化学和在化学家们的帮助下制造出来的（图 3.1）。

3.1 化学在住房和家庭陈设品方面起什么作用？

只有木材、沙和石子是天然的建筑材料，但它们需要用合成的化学物质粘连起来和加以保护（图 3.2）。水泥是一种化学产品，正如用在层压板中的胶粘剂和用在钉子中的金属都是化学产品一样。玻璃是化学家制出来的，经改进后的产物如耐热玻璃（商品名叫 Pyrex 玻璃）变得更坚韧。油漆是化学家设计和创造的，很多现代化的固体材料也是如此。塑料是人工合成的，它们用于厨房和浴室用具上，也用在商品名称叫 Formica 的胶木板及其有关材料、饮料瓶、餐具和器皿上（图 3.3）。瓷器是由化学家制造的，并用于厨房和浴室的洗涤池和其它固定装置上。金属是从矿石经化学变化制成的。铝金属曾一度是实验室的奇品，但利用一种电化学方法，现在它可以容易地从氧化铝制得。

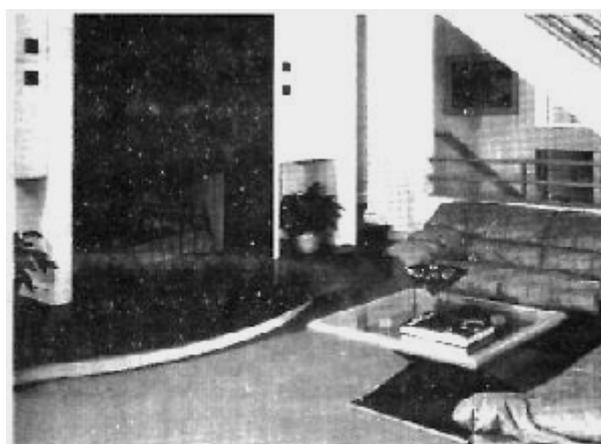


图 3.2
化学加工业的产品在住房建筑和家庭陈设品方面起了势不可挡的作用。

至少有一部分的地毯和装饰用的褶皱织物要用合成纤维和用合成的染料来着色（图 3.4）。冰櫃和空调器用特种化学品作为冷却剂；燃气炉和煤气灶可用合成气或天然气，其燃烧过程发生的仍是化学变化。我们的居室用燃气或用石油工业生产的燃油来取暖，这种燃油是从自然界的粗油经精炼和化学改进后得到的。我们用合成的化学产品和用化学加工工业制成的材料，如灰泥或墙板，外壁板和屋顶板以及地砖和地毯来使我们的建筑隔热。炉灶本身和分配热能的管道是由化学产品——金属，绝热材料和陶瓷所制成。



图 3.3
塑料用于制造每天使用的很多重要物品。

电流通过外包绝缘体的铜线进入我们的家庭，两者都属化学加工工业的产品。电源插座要用塑料和金属，照明用的白炽灯和荧光灯完全是由化学产物制成。

甚至进入住宅的水也是经化学净化的，以除去污染物和致病的细菌。在使用涉及化学检验和化学净化的现代卫生设施以前，已被污染的用水是引起人类各种疾病的主要原因。

3.2 化学在穿着方面起什么作用？

鞋革是兽皮经化学处理后制成的，而合成的塑料材料正在取而代之。鞋子的橡胶底来自于橡胶树汁液制成的橡胶产品，但越来越多地采用了橡胶代用品，如合成的同类物，氯丁橡胶，它们更为耐用和有好处。

在我们的穿着上用的是合成纤维和合成的染料，而维护它们的是合成的洗涤剂 and 干洗液。当然，如羊毛，亚麻和棉花等天然的纤维有其优点。然而，它们通常也是经化学处理和总是经化学染色的。

3.3 化学和运输的关系怎样？

一辆机动车中的每件东西都是化学加工业的一种产品。金属和油漆是显而易见的，但在一辆现代的汽车中，塑料的用量是非常大的。特种塑料被选用，因为它们质强和量轻。较轻的车辆耗油也少。

制造轮胎用的橡胶经过一种被称为硫化作用的方法处理而变得坚韧。硫化作用是将橡胶分子化学地连结起来，使材料变得更坚韧和更为实用。



图 3.4
染料和纤维是由合成化学制造的。

引擎舱内的“橡皮”软管根本不是橡胶的，而是更耐油和耐热的，类似于橡胶的合成材料。防冻液是一种合成的化学药品；蓄电池是化学的一种产品（要详细知道蓄电池，请看第 4 章）；车厢的内装潢通常用合成品或者是经化学鞣化的皮革制成品，车座里充填合成的泡沫塑料。车窗用有塑料为夹层的安全玻璃以防破碎。燃油和润滑油是加有化学添加剂的石油化学产品，以便产生更佳的抗爆行为和使润滑具有更为良好的全天候性能。

有时，将原始石油加以蒸馏就能得到燃油或润滑油，但也有用化学方法，利用催化剂将石油中的天然大分子“裂化”成较小的分子，作为汽油之用。

在石油炼制厂中见到一些巨大和高耸的塔是作蒸馏用的；另外的一些塔是供化学加工生产更有用的化学品。润滑油中加入各种化学药品使它们有更佳的抗磨性并使它们在一定温度范围内较好地发挥其作用。

化学的一项现代应用是在车辆排气系统中装入催化转化器来降低污染。它们用铂、铑和其它物质将氧化氮、一氧化碳和未燃尽的碳氢化合物转化成较低毒害的化学品。

在机动车工业中，大量的化学家参与研究和开发。事实上，在美国三大汽车制造商的研究室内，化学家是科学家中的最大群体。他们正在研制更优良的催化转化器和设法使燃油燃烧得更彻底而减少污染（点燃本身就是一个化学过程，它的本质现在已经搞清）。化学家们正在试图改变车辆的上漆方法，以便免用有机溶剂，他们也在设法用现代的塑料和陶瓷来替代汽车上较多的金属，同时他们正在设法改进蓄电池，使电动汽车变得更具吸引力（机动车工业的环境化学情况将在第 4 章中深入讨论）。

飞机有特殊的要求（图 3.5）。没有质轻量轻的铝就不可能有飞机。它需要用特种塑料和特种燃油。太空飞行需要甚至更为专用的化学品，包括能产生推动力非常大的火箭燃料和由合成材料制成的特种衣着。下一次当你乘坐一辆汽车或一架飞机时或者可能乘坐一架太空穿梭机时，请试找一下有什么东西是不属于现代化学的产物。你不会成功的，除非你发现了一木片或可能是一些棉花或羊毛之类，但即使如此，它们也是经过化学处理和化学涂渍的。



图 3.5
在一架飞机或一辆汽车上几乎每件物品都是由化学加工工业制造的。

3.4 化学是如何改进食物供应的？

有些人为某些目的而乐意采用合成的化学制品，但他们却不欢迎在食品中使用合成化学品的主张。这完全是可以理解的：没有人愿意吃一种未经试验的新东西，因为它可能是有害的。然而，这种合理的思虑可能会走向一种极端。

例如，我们曾听到过一些建议：人们不要食用任何一种对它的化学名字都读不出来的东西。按照这样一种规则没有一个人能存活。甘油三酯是存在于天然食物中的脂肪的一个组分的最简单的化学名词。葡糖基果糖还不是普通食糖的完整化学名词，还有我们都需要摄取以求生存的维生素类，对于某些没有学过一点点化学的人来说是完全不可能读出这些名词的。

我则提出一种不同的观点：人们要了解饮食的化学本性就必须学些化学。这样，他们不仅能读出复杂的化学名词而且还能了解哪些化学品应归入有益健康的饮食。

化学的作用始于食物供应之初的农业。化学肥料为植物的生长提供了氮和其他化学元素。如果没有这种肥料，我们就不能为众多的人口提供足够的食物。除草剂能使作物茂盛而杀虫剂则能保护作物。

杀虫剂的使用是最有争议的一项化学活动。杀死害虫是非常好的，但杀虫剂是否会杀死鸟类，动物和益虫呢？它们会不会带进食物和当我们吃了它们后会不会有损于人体呢？这个题目将在第4章中进一步讨论。这里只能简单地说，现在已对研究工作投入大量的物力，旨在开发更好的虫害控制方法。此外，化学家们开发了灵敏的方法来检测食物中的污染物。这种关注是重要的，工作正在进行之中。

已知的最毒的化学物质是在自然界产生的而不是在化学家的实验室内。微生物，如细菌能制造出一些非常危险的化学品。食物的细菌性污染所造成的一种威胁总是要比农业化学品所带来的厉害得多。因此，化学的另一贡献是开发安全的食品防腐剂和符合卫生的包装方法来防止细菌的污染。食品冷藏法是建立在合成冷冻剂的基础上的，它是另一种防御食品腐败和细菌性污染的方法。

化学还保护了我们的水供应。不洁净的水能携带危险的病菌。在世界上的不发达地区，由于未净化水而引起了常发性流行病。化学家们已开发了利用氯或臭氧的水处理法。正如发明现代的药品一样，水处理法为人类的健康作出了同样多的贡献。

药物化学家们开发了兽用药来保护家畜不生疾病。化学家们也开发了一些试验方法来确定牛奶之类产品是否符合我们的纯度和安全度标准以及它的营养价值。

我们所消耗的很多食品，已不是它们的原始状态，而是经过转化了的。谷物被加工成早餐用的麦片，蛋糕和甜饼，以及借助于一种合成的化学产品（发酵粉）制成的面包。制造工艺是跟随着由食品化学家所设计的各种检验来进行商业性生产。制造啤酒，威士忌酒和葡萄酒所用的发酵法也要由化学试验来监测生产过程。

我们不可能从食物中除去“化学品”——世界上的每一种物质都是由化学品构成的。为了达到保护和扩大食品供应的目的，我们必须保证所用的化学品，不论是天然的或是合成的，都是安全的和有效的。

3.5 化学和国防的关系怎样？

几乎任何人都不会认为战争是一种有价值的人类活动，但是一旦爆发战争，人人都希望取得胜利。因此，政府总是号召科学家们制造出更有效的武器或更好的防御物。化学在武器和防御物两方面发挥重要的作用。

由古代中国化学家所发明的黑色火药彻底地改变了交战状况；现代的弹药采用了这种炸药的更新样式。它们是化学药品或其混合物，经过化学反应释放出大量热能。反应的产物是气体，如氮气或二氧化碳。热气体便急剧膨胀这就是爆炸的化学解释。

核武器的爆炸不能这样解释。核爆炸本身虽然也是气体急剧变热的后果。但在这一情况中，能量来自于原子发生本质变化的一类核反应，而不是产生于化学反应。普通化学反应中，原子只重排了其组合方式。核武器中的热气体仅是热空气而已。但爆炸中伴随的辐射作用则是原子核变化过程而不是化学过程的结果。

从钢质枪炮中发射出的铅或钢质子弹是用冶金化学生产的金属，子弹是用化学炸药推动的，——可以确实地认为是“化学武器”，但它不是通常所指的词意。化学武器所指的是用了化学毒物的。

细菌利用化学武器来毒杀其他的生物体（如对人类），在有些情况下是极为有效的。而人类却不能如此效用。其充分的理由是：在近期的战事中，毒气没有发挥多大作用，因为它们同时能杀死敌与友。细菌制造出的毒物能杀死其他的物种而不毒害它们自己，但愚蠢的人类却想要杀死与我们具有同样生物本能的同类。同时，化学家们还发明了抵抗毒气的好的防卫方法，开发了能与毒气起反应和中和作用的防毒面具及供士兵用的防护塑料服。



图 3.6
用在一些网球拍和高尔夫球棍上并与“石墨”有联系的复合材料，已用在 B-2 军用飞机上。大量地依靠现代化学的高新技术是美国最主要的军事优势。

近代化学在军事上发挥了很大的作用，每位自美国西点军校毕业的士官必须学习化学。由于这个原因，美国军队的所有部门都有规划，要支持有关领域中的化学研究工作。在美国，海军研究署是第一个政府机构，它为了支持重点大学的研究活动而设立了这些规划。美国的主要军事优势是我们的高新技术，包括那些以化学为基础的（图 3.6）。

3.6 化学和执法方面的关系怎样？

不幸的是，合成化学的有些方面已引起麻烦。深藏在密林中的原始化学工厂用来从植物中分离出鸦片初制品并加工成海洛因。可卡因是从植物中提取出来，和它的盐酸盐被化学转化为裂片，可卡因的游离碱。有些合成的化学品也变成了违禁药。

守法的化学家们从两个途径来着手解决这个问题。一个途径是发明新的和灵敏的化验方法来检测环境中的与药品使用者手中的违法药。在另一途径中，药物化学家们正在开发新的化合物，它们能阻断上瘾药物的作用；一个好的例子是用于治疗海洛因毒瘾的美舍东（methadone）。

化学试验法在执法的其他领域中正在发挥其与日俱增的作用。这些试验法是由工作在法医学领域的化学家们所开发的。可能最为惊人的是 DNA 鉴定法，它用来证明犯罪现场发现的组织或体液确实是属于被指控的罪犯的一种手段。这个化学试验需要现代的方法使 DNA 在特种酶催化剂的作用下复制成百或成千次，从而使一点从犯罪现场找到的样品能被放大和鉴定。然后采用其他的酶将 DNA 在特定的位置上切断得到一幅对一个人来说是具有特征性的图象。这个证据可以使一名清白无辜的人获得自由或指出另一人很可能是有罪的。

非凡的现代塑料被用来为警察们制造坚实与量轻的防弹背心。有些化学武器也是有用的。为了逮捕一名犯罪者，警察们现在可以选用能使人失去战斗力的，类似催泪性毒气的化学喷雾剂。催泪性的化学品也可用来使一名罪犯从一躲藏处驱赶出来。正确地使用这些武器不会使其受永久性的伤害，而且明显地优于可能致命的子弹。

有些罪行是由于精神错乱才犯下的。药物化学家们已发明镇静药与有效治疗精神病患者的药物。这些药物能使那些狂暴的和无理性的人安静下来，这对社会能起到有利作用。

3.7 化学对生活的质量作出了哪些贡献？

“一个人不能单靠面包生活着”。随着农业的改进，我们不需要将醒着的每一时刻都花费在找寻食物和庇护所方面，而是要使我们的生活变得更丰富多采。

书籍，包括这本书在内，是用化学家们所发明的油墨和由化学方法生产的纸张印制而成的。木材中的纤维被一种称为**木质素**的黑色物质包裹着，它必须在造纸时加以除去。应用特别的化学步骤将木质素溶解掉，留下洁白的纤维素。

乐器是通过化学生产的现代材料制成的。即使古代的乐器，如由 Sfradivarius 手工制造的小提琴的异常音乐特性也应归功于早先化学所发明的特殊清漆。唱片，录像带和光盘是用现代塑料制成。电视屏幕用了特殊的化学品，当它们被电子束轰击时就发出了不同颜色的光。

摄影胶片是涂有化学品的一种塑料片，它们能被光所敏化，所以在曝光后和在接触到显影药品时，它们就会发生特别的反应。彩色摄影的化学是非常讲究的，在瞬时拍摄的宝丽照片上涉及的化学也同样如此。这些摄影术是建立在十分先进的基础化学上才得以开发的。

游泳池，美式足球的头盔、跑步鞋，直接插入溜冰鞋，滑雪橇，船艇，钓鱼杆和高尔夫球棍都要采用现代的塑料，现代的陶瓷和合金以及现代油漆和涂料（图 3.7）。甚至当我们偶然回到大自然中，离开一下文明并享受一下简朴的生活时，最好带上救生设备和野营用的生活补给品。这些东西都要靠现代化学和化学加工工业的产品才能制成。



图 3.7
溜冰鞋和运动服装大多用合成的材料制成。

关于未来 3

就本章中提及的广泛话题而论，我们不可能对所有领域中有可能的发展都包括在内。然而，有些进步会有宽广的影响。

现代的结构材料

化学的很多应用要涉及经改性的、全新的固体材料。尤其是所谓的**复合材料**更是应用广泛。它们是多种材料的结合体，其中的各个成分相互配合。例如“**石墨**”被用于制造现代的网球拍，高尔夫球棍和滑雪橇时。用一种合成聚合物经高温加热制成的一捆石墨纤维，然后将它包埋在合成材料（如环氧树脂）中。这种树脂将纤维粘结在一起使它们不断裂，而纤维则赋予复合材料以强度。这是树脂独自所不具备的。

复合材料是很古老的东西。在很早期的文明中，人们学会了在制砖时用稻草作为纤维，而粘土则作为另一个组分。这种泥砖比单由粘土制成的更强韧得多。最近发明的玻璃纤维是用一种合成树脂（聚酯）将玻璃丝粘结在一起。很细的玻璃丝不像厚的玻璃那样，它是很柔软的。

近代的复合材料有很好的性能，但还不理想。它们很强劲而重量轻，所以广泛地被用于飞机和汽车上。然而，它们不耐高温，有些还硬得不能机加工。道理是清楚的，将来要大大地改进复合材料的性能和降低其成本。我们预期能看到车辆中的金属会不断地被这些材料所替代。此外，它们可能会作为结构材料在桥梁上找到应用，例如在需用坚强和质轻的材料时（图 3.8）。



图 3.8
在苏格兰的一座步行桥是用玻璃纤维复合材料，而不是用金属建筑的。

复合材料所取得的进步不是靠随意的实验来引导的。现代技术使化学家们详细地了解到复合材料内部的分子结构。并知道如何使它们得到优化。

陶瓷如我们从杯和碟上所见到的，具有很多好的性能，但它们容易破碎。将石墨或聚合物纤维包埋在陶瓷中，就可以制成复合材料，因此，它们不太会碎裂了。陶瓷类复合材料甚至还可以在极高的温度下使用，例如，用在航天飞机的火箭发动机上。

对很多材料来说，暴露在外的表面是特别重要的。因此一种已具有实用的整体性能的材料——不论是一种简单的固体材料或是一种复合材料——还可以赋予特别需要的表面性能，只要用另一材料作为表面涂层。表面涂层的早期的例子是油漆和钢的表面镀铬。现代的材料化学家们正在开发作为**表面涂层**的其他特殊材料。因为表面层往往是十分薄的，假如一种昂贵的材料的性能符合要求，选用该种材料还是值得的。一个有趣的例子是将一薄层的金钢钻涂在金属上，使它变得非常坚韧和耐擦刮，作为一个特别的例子，可以想起一个重要的总目标——一种破坏不了的油漆，它能保护金属部件达数十年之久。

化学这个领域正在愈来愈关注有组织的混合物质的性质，而不只是纯的物质，如尼龙和电木粉。这种注意力的转变可以看作是有规则智力转移。起先，化学家们着眼于复杂物质，如树中的木质部分，并将它们分离成它们的组分。他们鉴定纤维素的化学本性和木头中的木质素，当木头转化为纸张时要除去木质素。现在大家对互相有联系的组分的化学问题愈来愈感兴趣，而不只是纯的物质。在生物化学领域中，新的着重点也是如此。在该领域中，化学家们首先要识别生命的所有分子和它们的性质。现在的兴趣则是细胞内的这些分子间的化学相互作用。

很多的发明物已含有不同化学品的复杂布置方式。摄影胶片从某一方面看只是让氯化银嵌在合成塑料中，但现代的彩色摄影胶片含有多层不同

的染料化学品。现代计算机所用的集成电路片是在纯的硅晶片上复合了多层起专门功能的物质而制成的。假如人们精通化学，可以预想到有更好的器件会用在未来的计算机上。此外，在另一个领域上取得的进步，将彻底改革我们的电力应用。

超导体

通常的导体，如铜线在某种程度上会限制电的流通，并将一部分的电力转变为热。很多年来，人们已知有少数导体在非常低的温度会变成**超导体**。超导体中是没有电阻的，因此，电力以最高的效率被传输。假如我们的动力线是用超导体制成，就不再会浪费电力了。

超导体在磁铁中和在电子部件中有潜在的应用。事实上，有些科学上用的磁铁早已用目前的超导体制成。在它们成为超导之前，必须将它们冷却到接近最低的温度——称为绝对零度（ -273°C ， -459°F ）——用液氮作为冷却剂。

需用极低的温度是一个问题。将横贯大陆的动力线用液氮来冷却是不现实的。我们需要的是一种在较高温度就能操作的超导体。理想的一种是室温超导体，但即使是一种能在液氮（ -196°C ）温度操作的也会有用的。空气含 80% 的氮，经压缩后将它变为液体也不是太贵的。

材料化学上的最新突破表明，在这种温度下操作的实用超导体是可能做得到的。有趣的是目前最好的特种陶瓷，它是像瓷器一样的材料，但含有非常特殊的额外的化学特性。值得注意的事是，在容易达到的温度使它们变为超导体，但是高于这些温度时，它们实质上是绝缘体。它们甚至不是导体，除非当它们被冷却到超导状态。假如这些材料能加以改良，它们能迎来一个时代，动力可以在一个方便的地方生产，然后有效地传遍全国各地。我们期待会有很大进展的另一个领域是有关我们的食物。

食物供应

在食品生产方面，化学发挥了作用，满足了我们的消费，我们采用了现代农业技术，动物的健康产品和食品的加工。化学为我们提供了更多有关食品中含什么，有益于健康的饮食应含什么等方面的知识。

使用改良后的农业化学制品，我们应该能够增加农田的生产量（图 3.9）。使用有选择性的和对环境友好的新型杀虫剂就能实现控制虫害。有些杀虫剂是我们根据虫类本身提供的化学信息而发明的（将在第 4 章中进一步探讨这个题目）。肥料将更好地满足粮食作物的需求。控制野草的漫生，就能保证作物获得必不可缺的太阳光，肥料和水（图 3.10）。



图 3.9

化学在食物生产中有其重要作用，如农业用的化学肥料，还有用于食品保护和贮藏方面化学产品。



图 3.10

为了控制野草，一架飞机正在棉田上喷洒除草剂。

我们现在对食物的污染问题更为敏感。化学家们将继续对食物进行检验和帮助他们抗御腐败与细菌和污染。改良的包装方法使很多食品可以保鲜而不需冷藏，而且这个技术在将来会有进一步的扩展。对有意和无意地使用食品添加剂所造成的效果也将给予明智的关注。

要开发新的农业化学品来替换那些已经有问题的老产品。例如，家畜要经常地喂些抗菌素以减少疾病，但我们不希望这些抗菌素会最终进入我们的食品中。由于这个缘故，有些很见效的抗菌素已被禁止用于食用动物，而且它们将用改良后的医药品来替代。

食物的腐败可以用抗氧化剂来防止，但只有那些对人类健康带来益处的才可使用，有些确能做到。食品的着色增加了某些食品的吸引力，但如对消费者起可疑的效果，就不能着色。

我们需要开发没有副作用的新型供农业用和食物用的化学品。这种要求现在是完全明确的，为了开发未来的产品，这方面的研究工作是很活跃的。只是在最近我们大家才对这些事情变得敏感了，它们为现代化学和未来的化学家们提出了巨大的挑战 and 机会。

(张德和 译)

第 4 章 化学与环境

不可危害地球，也不可危害海洋或树木。

——圣经：新约《启示录》

随着人类人口的不断增长和先进文明所带来的后果。我们的环境遭受重压（图 4.1）。化学作为这种进展的中坚，它对这个令人困惑的事当然要作贡献，同时，它也掌握着解决这个问题的关键。在本章中我们将谈一个基本问题。



图 4.1

正因为人类活动和技术进步会改进我们的生命期和我们生活质量，所以我们必须不让它们破坏我们这个十分特别的行星上的环境。

4.1 我们能否有一个建立在先进技术上的现代社会，而这些技术不会无休止地污染地球？

答案是能够的，只要我们注意一些限度。举个例子来说，我们能承担得起使人口聚居在地球上，但我们承担不起人口过剩。这是一个人类行为的问题，但即使在这点上化学家们也能给予帮助。

药物化学家们正在积极地开发新的避孕药剂，但理想的还没有掌握。我们需要廉价的、方便的、安全的和有效的避孕方法，并能符合不同群体在宗教上的和教养上的要求。有一个时期，它曾是一个活跃的研究领域，但是它引起了十足的争议，目前只有少数几个制药公司在继续进行。有讽

刺意义的是，人口问题在一定程度上由化学造成的。人类死亡率曾经是如此的高，因此不存在人口过剩。大的疾病灾祸席卷世界，诸如鼠疫（瘟疫）或流行性感冒的传播。药物化学大大地提高了我们的生存率，为此，现在我们有了人口问题。当然我们宁可以出于自择的办法来控制人口，而不依靠大规模死亡的办法。

有关我们活动的第二个限度是必须充分估计它们的环境效应。决不要设想我们不管把什么样的废弃物扔入海洋或空气或土壤中它们都能承受得住。

环境化学是一门快速成长的科学领域。它涉及到认识各种物质，当它们被扔入土壤，水或空气中时会发生些什么。随着认识的日益深入就带来了更好的方法和产品。例如，现在正在制造能在环境中容易降解的塑料以供包装之用。另一个重要的课题，化学家们正在研究如何将塑料，金属和橡胶进行再循环，使它们在制造时所投入的能量和材料不会损失掉，并使它们不会构成一个如何处置的问题。已发明了冷藏法中和在空调法中使用的新化学品，它们对臭氧层不会构成威胁，臭氧层能保护我们不受阳光中的高能紫外线的伤害。

我们必须使用对环境是安全的材料来包装好食品，以保持其卫生和新鲜。我们需要用冷藏法来保护食品供应和用空调法来将炎热地区开拓成住宅区，但是不能用会使我们面临阳光中的致癌性辐射的致冷剂。我们还需要制造不会引起破坏环境的其他产品。

4.2 工业能否干净地制造化学产品？

在美国和在其他一些发达国家里，化学加工业是制造业中最大的一个行业。物质经化学变化而转化为有用的产品，但一般也产生了废物。对它们采取什么样的处置办法是做到干净生产的关键。

有一时期，废弃物只是简单地倾倒入河流中或埋在地下或排放到空气中。我们设想，或希望或假装相信这个办法是不会产生问题的。有时我们称之为“化学废弃物”，但由于每一物质都包含多种化学品，因此这不是一种真正的区分。现在美国正在对有毒废物堆放处展开一项规模庞大的清理工作，这些地方大自然是不会照顾到的，我们必须自己来解决问题。



图 4.2
化学制造商协会的“负责与
关心”标志

属于化学制造商协会的化学制造商们在美国制造了 90% 的化学产品。他们通过了一个称为**负责与关心**的纲领，在此纲领中他们立誓只制造不破坏环境的商品（图 4.2）。取得的结果往往是令人吃惊的。

举一个例子，在美国田纳西州的一家化工厂从环境观点出发，利用它的负责关心纲领来指导操作。它建造了这个国家最革新的废水处理设施。这个设施高出地面 7ft（英尺）（1ft=0.3048m），使地下水的保护更容易些。从它的燃煤锅炉所排放出的煤灰不像过去那样被填埋起来，而是用来制造混凝土砖块。这是防止污染的一个成功例子。这个工厂还有国家唯一的商业化设施，将煤转化为各种化学产品，并最后用在摄影胶卷和合成纤维上。利用当地能取得的高硫煤，这个厂每年省用了约 150 万桶原油。此外，这个设施回收了煤中所含有硫的 99.7%。这个从煤制取化学品的设施是如此的富有创新精神，以致被称为 1995 年国家有历史意义的化学里程碑。



图 4.3

Eastman 化学公司下属的一家工厂，它以具有唯一的从煤制成各种化学产品的商业性而自豪。该厂将煤转化成各种化学品，它们能用在汽车和纤维等各个方面。厂里所采用的工艺，每年可节省 150 万桶原油。

另一个污染问题是与溶解各种各样化学品的溶剂有关。当有机溶剂挥发时，它们污染了空气。越来越多的制造商们正在学会在加工工艺上如何用水作为溶剂。正如在刚才介绍的田纳西化学工厂中一样，水能容易地被净化并回归到自然环境中。水基油漆，包括那用于汽车上的在内，正在取代含有有机溶剂的油漆。

这些对环境方面的关注反映了制造商们的情感——他们像其他的人一样，在同一世界上与他们的家庭生活在一起并养育他们的孩子们——但是他们还要受到环境条例的约束。不顾后果的生产当然会廉价些。因此，一些有责任感的公司领导们赞同合理的环境法规，因为他们相对于那些无责任感的竞争者来说，不会在经济上处于不利的地位。

4.3 在解决从核能发电厂排放出放射性废弃物的问题上，化学家们能作什么贡献？

不是所有的废弃物都能变为有用的产品。化学品的毒性可以通过化学来解决，但放射性的物质只能靠时间使其变得安全。利用现有的技术似乎还无法避免核能发电厂产生放射性废料。然而，我们很清楚地看到核能是我们未来的能源。在有些国家，它早已是主要的能源。那么对这些废物如何处理呢？

从核电厂产生的放射性物质的物理量实际上是不太大的，但它被嵌在许多其他物质中。目前是将其整体贮放，但这个量是如此之大，以致引起了麻烦。化学家们正在着手解决这个问题。

我们一般知道如何将一种化学物质从另一种中分离出来，只要借助于它们的不同性质。化学家们正试图将放射性物质分离出来并加以浓缩。它还必须要储放很长的时间，假如不需要将无害的物质同样储放，问题就小多了。当它们被分离出来后，我们可能最终会知道如何使放射性物质变成有用的东西。

4.4 人类日常生活（如驾驶汽车）会造成什么样的污染？

汽油燃烧时会释放出一些有毒性的一氧化碳，同时空气中的一部分氮气被转化为氧化氮，未燃尽的汽油产物也同时散放出来。它们本身的气味就难闻，但在太阳光下它们结合起来形成刺鼻的化学品，而成为烟雾的一部分。每一个大城市都有烟雾的问题，同时在少数几个城市它对健康已构成真正的威胁。化学家们能帮助做些什么呢？

第一步只是知道了引起烟雾的化学含义。利用这些信息就发明了对策。对燃烧作用的化学过程进行研究，并将发动机加以改进以降低所产生的污染物的量。为了处理其剩余的污染气体就需要在发动机的排气管中安装上催化转化器。这些固体催化剂能将污染物转化为危害较少的物质。然而这还不是最后的答案。

用一组蓄电池驱动的一辆电动车辆才是真正无污染的。此外，用水力发电也不存在污染问题。那么为何我们尚未见到以电动汽车和电动公共汽车为主的车队呢（图 4.4）？



图 4.4
一辆电动汽车的原型，要使这种汽车变得普通地实用，还需更好的蓄电池。

问题是电池。**蓄电池**是一种以化学方法贮存电能的装置。当电池中发生一种化学变化时，电流就产生了。当产生电流的化学用品用完后，电池就耗完，但它可以重新加以充电。电流被再次通入电池后，逆转了化学变化并使化学物质得以再生，所以它们能重新产生电流。要描述一下使电动车辆成为现实所需用的电池是容易的，但它至今还不存在。

我们需要有一种电池，它能容纳足够的电量使汽车行驶 300mile（英里）（1mile=1609.344m）或更长一些。然后能在一“加油站”将电池在 15min 或更短的时间内充电，这样我们就可以继续上路了。根据电池的成本，它必须能持续使用一年以上。此外，这种电池不能太重致使汽车的重量增加了许多。这些要求不是不可能做到，只是有困难。至今还没有能达到。

另外一种可能的解决途径涉及到一种所谓的**燃料电池**。那些通常用在手电筒里的电池，在产生电流时要消耗掉一些物质，因此这种电池不能再充电；被消耗的物质一般是金属锌或锂，当它们被转化为一种新的化合物后就停止产生电流。也可从在反应中以消耗其他物质作为燃料来产生电流。例如，已知燃料电池是利用一种碳氢化合物与空气起反应时产生电流，类似于汽油和空气起反应一样，但这个反应过程可以认为是冷的燃烧：与一般的燃烧一样，产生了相同的产物，但碳氢化合物类燃料电池在低温时燃烧，生成少数几种污染物。

以空气和氢气来运作的一种燃料电池更有意义。产物只是水，它化为蒸气后能回归到空气中。这里存在的问题是氢气是非常危险的气体，与空气在一起时会形成爆炸性的混合物。有一个时期，它曾用在气球上，包括可驾驶的飞船在内，但由于危险而代之以氦（氦气是化学惰性的；在任何情况下，它不会与氧气起反应）。为了安全起见，假如我们将氢气用在汽车的燃料电池中，它必须以不同于压缩气体那样的贮存方式。例如，有些金属，如镍能吸收大量的氢气并在需用时让它释放出来。

这个问题至今还没有完全解决，但是当我们把它解决时，我们会转入到一个有时被人称为**氢经济**上。利用发电厂的电将水中的氢元素以氢气的形式释放出来，并以一种安全的方式（还有待于发现）来运输。我们将在汽车上用它来发电并驱动电动机，而氢气则转回成水。最后的结果是将一座有效的发电厂发出的电以氢气的形式传送到我们的车辆中，随着进一步的化学研究，我们会达到这个目的。

4.5 我们能否控制虫害而不危害有用的动物呢？

我们需要控制那些带来疾病与破坏我们食物的某些虫类。白蚁和蛀木蚁甚至能毁坏我们的房子。然而，没有蜜蜂的话，很多植物就不能繁殖。我们如何有选择地控制害虫而不致毒害我们自己或其他无害的动物呢？

在公众意识中，DDT 引起了很多这类问题。它是一种非常有效的合成杀虫剂并用它来控制蚊子，使流行在热带国家的疟疾得以大大地减少，在那里这种疾病是一个非常严重的健康问题。DDT 的效果是如此的重要，它的发明者 Paul Muller 荣获了 1948 年诺贝尔生理学 and 医学奖。然而，DDT 现在已很少使用了。它在美国和许多国家已被禁用。

DDT 是有选择地毒杀虫类，但不会杀死其他动物。然而，它确实聚积在有些鸟体中，导致蛋壳变弱，使胚胎不能存活。这个副作用是当然无法接受的，同时它也解释了禁用 DDT 的原因。随着 DDT 在全球范围内减少了使用，疟疾在热带国家内又见增多。

这是我们唯一的选择吗：杀死鸟类或接受一种毁灭人类的疾病？工作在这一领域的化学家们同声地说，不。他们正在开发有选择性的农药，它们将能控制虫害而不引起不良的副作用。甚至正在找寻一种更有前途的方法，即利用虫类本身所具有的特别的化学性能。虫类为了交配和诱捕虫饵，它们用化学物质在相互间发送信号。一只雌性虫会发出一个化学信号来引诱同类的雄虫，但其他的虫类则不被引诱。这是因为每种虫类有它自己的化学密码。化学家们正在了解各种不同虫类的密码并用它来控制虫类。例如，可以设下带有蚊虫化学密码的罗网来吸引和捕捉雄蚊。有时，只要放出化学密码本身就足够了，因为雄蚊被搞糊涂，不能找到雌虫来交配。

当我们从化学和生物化学方面认识了虫类与其他动物的不同以及一种虫类与其他虫类的不同之后，可以期望在我们的努力下，使那些对人类构成威胁的虫类得以控制。我们不希望扰乱大自然的平衡，同时也不想同意居留在一个有些虫类引起人类蒙受苦难或害病的世界上。利用现代的手段，我们应该能够达成一个恰如其分地和解。

4.6 我们怎样能保证新合成的化学制品不会破坏环境，或没有不良的生物效应？

因为农药和除草剂是为了要有实用的生物效应而设计的。它们要经过认真地审查以保证其不会产生非故意的伤害。对新的药品也是一样对待的，它们必须通过严格的试验以保证不存在不良的副作用。在过去几年中，化学家们和其他人员对新品种的出人意料的不良副作用已经变得敏感起来。

CFCs 和臭氧层

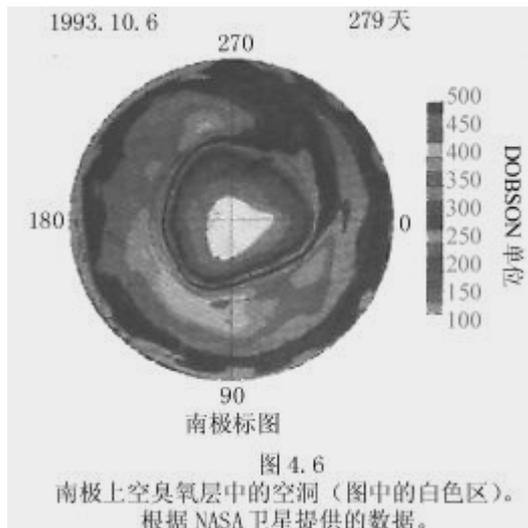
一种不良副作用的最惊人的例子可能是与冰箱和空调器有关。这些装置里需要用一种气体，它容易被压缩成液体。随着这种压缩过程物质散热——热从冰箱冷冻室散发出去或从空调器散发到外面空气中去。当液体膨胀成气体时，热则被吸收到冰箱的冷却圈上或热被吸收到一台空调器的冷却面上。那么应该用那种气体呢？

有一个时期，冰箱是用氨或二氧化硫作致冷剂来运转的，假如吸入大量这种气体是危险的。当这些早期的冰箱泄漏时，曾造成一些人的死亡。因此化学家们着手发明一种含有恰当性能的新型化学品。当它从液态膨胀成气态时，它必须能吸收大量的热，但它也必须不产生有害的生物效应。为了达到这个目标，经过大量的研究后，发明了似乎是理想的 CFCs——**氯氟烃**（chlorofluorocarbons）。

从生物学上看，它们确实达到了真正无害的程度，并在其他方面也被广泛采用。当在液体面上的压力减小后，由液体变成气体时的膨胀性质对于生产供绝缘用的泡沫塑料是很理想的，同时在油漆、剃须霜，甚至像搅拌奶油等食品的喷雾罐中也可以使用它。

第一次提醒有麻烦的证据来自于对臭氧分子的基础研究，**臭氧分子**是由三个氧原子连在一起的一种气体。F. Sherwood Rowland 和 Mario Molina——他俩共享 1995 年诺贝尔化学奖——发现氯原子在高空层中是分解臭氧的一种强有力的催化剂。在此分解过程中，一个臭氧分子 (O_3) 与一个氧原子 (O) 被转化为两个普通的氧分子 (O_2)。

如图 4.5 所示，氯原子从臭氧上取走第三个氧原子，生成一个 O_2 分子和一个反应性极活泼的氧化氯 ($Cl-O$)，从而催化了这个分解反应。然后这个 $Cl-O$ 将它的氧原子转移给一个自由氧原子并成为另一个 O_2 分子。经过此转移过程后，氯原子能重新进行这个顺序，因此少数几个氯原子就能破坏一大群臭氧分子——多达 1000 个（最后，氯原子与其他分子结合而终止了这个顺序）。这个效应不仅破坏了臭氧分子；而且两个反应的每一个顺序也阻止了另外臭氧的形成。当高能量的紫外线照射到一个 O_2 分子上所产生的自由氧原子通常会加到 O_2 上生成一个 O_3 分子，但 $Cl-O$ 捕捉到了氧原子并制止了它与 O_2 的反应。



不是所有的不良化学效应都是致命的？

我们学到的另一个教训是有些化学品即使它们不属于致命的毒物，也能对人类或其他生物带来不良的效应。一个好的例子就是 DDT，它的不良效应是妨碍一些鸟类的生殖能力。新的医药品当然要经过试验，观察它们对人类是否会致命的，但还要对它们的其他非致命性的效应进行筛选，诸如，增加人类先天性缺陷的可能性。任何一种副作用将注定某种有希望的药物遭受失败的恶运。

现在担心的是在我们环境中的有些其他的化学品可能也有不良的效应。特别值得关心的是，有些化学品可能与雌性荷尔蒙（激素）相仿，会干扰男人的生殖系统。在撰写这本书的时候，科学状况是模糊的，还不清楚是否确实会改变人类的生殖能力或者是否合成的化学品本身出了毛病。这是清楚的，大剂量的某些合成化学品对动物的生殖系统产生损坏性的效果，但是现在进行深入的研究，考察使用小剂量的这种化学品对人类是否有问题。要弄清全部真相还需数年。然而，即使证明这个问题被夸大了，这个忧虑还必须认真对待。任何新的化合物，不论它被引进到环境中或和人类接触，必须要做过审慎试验，了解它可能具有的副作用。

对某一种建议中的药物进行试验，发现有小时，药物化学家就能制造出没有副作用的更新的化合物，工业化学家们也是如此。例如，对他们自己的颇有潜力的产品经试验发现有些问题后，他们就要设法避免这些问题，并能制出新的农业用化学品或新的包装材料。我们的经验不断丰富，使我们越来越了解一种新的物质在它起用前，还必须通过哪类试验。

在过去，曾有过一种倾向，即假设任何一种新的化学品只要不是一种毒物或不会致癌就不成问题了。现代科学知道得更多，而现代化学则能满足我们新学识的要求。

粗心大意的日子是过去了。不仅在化学制造业方面，而且还在可能会损害我们这个地球的一切人类活动方面，都要以负责关注作为我们未来的行动纲领。然而，没有一位有理智的人会提倡回到洞穴人的或甚至前几个世纪我们祖先所过的生活方式。相反的，我们需要利用业已学到的科学知识，并且要继续进行研究，为人类的幸福不断作出贡献。我们需要更有效的药物，更安全和更丰富的食物以及化学赐与我们的所用其他的恩惠。不管怎样，我们还必须了解和解决任何有关的问题。

现在是参加到环境化学这一领域的绝好时期。这个领域需要科学家进行工作，并有“好好做，就能取得成绩”的极好机会。他们将设计出有益的替代物来换下那些对环境不利的产品。他们将设计出更可靠的方法来检测水、空气、土壤和食品中存在的不合适物质。他们会设计出更好的方法来制造有用的化合物。第7章将更强调要学会如何在化学反应中避免生成有害的副产物。

最巨大的挑战之一是关于所谓的**有限的稳定性**。我们需要的是在正常使用情况下不会崩溃的化学产品，但我们不要那些在环境中是如此地稳定以致永远存留的化学品。CFCs 所具有的突出的化学稳定性曾被认为是它们的优点之一，但现在我们了解到这种稳定性使它们不受破坏地升到上层空间，在那里它们会引起破坏作用。有些 CFCs 替代物具有在升到臭氧层造成麻烦之前，就在较低的大气层中被破坏掉。增加恰如其分的环境稳定性是一个挑战，这一点化学是能够做到的。

现在正面临的一种挑战涉及到所谓的**温室效应**。某些气体，如二氧化碳和甲烷能像温室上的玻璃一样——让太阳光透过，但挡住了辐照热返回空间去。这是指这些气体释放到大气后会导致全球性变暖。

这件事比 CFCs 与臭氧间的关系更为复杂，而其中所涉及的科学问题还不太清楚。未来的工作将确定是否确有这样一个问题，假如确有，将如何来对付它。难处在于二氧化碳是烧煤或石油或木材的产物。假如它对我们的气候是真正的威胁，我们对产生能量的途径作出大幅度的改变。这将是一种讽刺，已经造成如此恐惧的核能应比燃烧化石类燃料对我们的未来将变得更为安全些。我们需要更多的科学证据，方能评估出造成温室效应有多大，构成的威胁有多大以及需要对付这种威胁所采取的改变的本质和程度要多大。

似乎已经清楚，在下一个世纪，化学将对我们的生活作出比过去更大的贡献。然而，要充分了解和全面关心我们将作出的各种改进不应该破坏自然界，化学才能有所贡献。如同在本章一开始所建议的引语那样。

(张德和

译)

第5章 计算机与化学——电子学的革命

宇宙始终在人类的视野之内，但人类必需首先掌握一种语言，并能阐明其所用的字符，否则我们不能理解宇宙。它是用数学语言写成的。

——Galileo, *Il Saggiatore* (1623)

化学对电子学革命曾作出巨大贡献，尤其是对电子计算机的发展。当然计算机也为化学增添了新的活力。计算化学正在迅速发展成为一个重要的领域。本章主要介绍这个领域的概况和前景。

5.1 现代的电子学革命诞生了计算机，化学对此有何贡献？

现代电子学离不开各种材料。其实，电子技术发展初期，材料就曾起过重要作用。例如，Thomas Edison 是实用电灯泡的发明者，他却拥有一个私人的化学实验室，并对灯丝材料做了许多试验。他最先用的是涂炭粒的棉质灯丝，而现代的白炽灯泡用的则是钨丝。钨这种元素具有重要而有价值的物理化学性能，适于做灯丝材料，它能导电，但电阻较大，致使发热发光。制造电灯泡还需要一些其他化学制品，如涂料和能产生荧光的气体等等。

真空管电子计算机不仅速度慢而且能耗高，难于推广应用。50年代的一台计算机要占一间很大的房子，而它的计算能力和今日学生用的简单科学计算器也差不多。这种变革来自于**晶体管**的发明，晶体管取代真空管来放大电流，它是诸多电路中的关键元件。

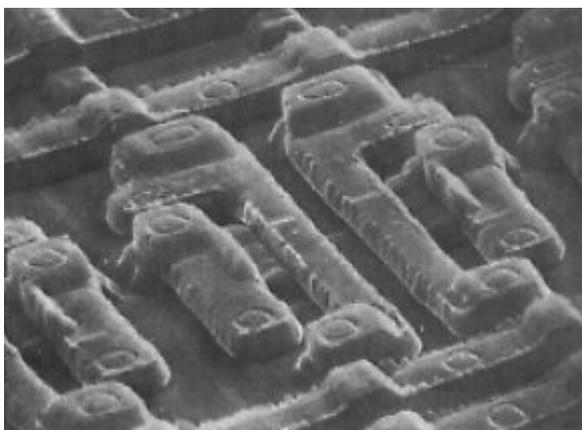


图 5.1
计算机用的硅芯片上的部分逻辑电路。放大 23000 倍。

晶体管是利用了硅 (Si) 的特殊性能。硅的导电能力不强，但加入微量的其他元素之后，其电学性能就会发生变化。如将磷 (P) 掺入硅，体系就有了富余的电子，而掺入硼 (B) 则有了缺电子的空穴。掺杂的硅在不同程度上都变成了较好的导体。在硅片上，电子由富电子处流向空穴而形成电流。纯硅经适当处理便可制成能放大电流的晶体管。

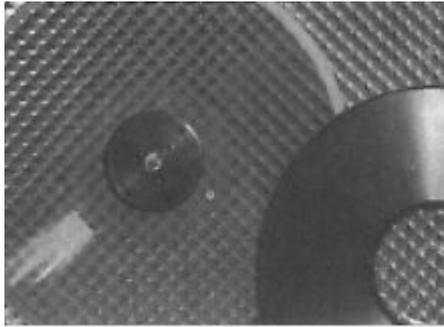


图 5.2
现代化学材料制成的光盘，既可用于计算机的信息存储，也可录制音乐。



图 5.3
位于 North Carolina 州 Triangle 研究所的半导体研究室，并非所有的化学研究都在试管烧瓶中做的。

很多晶体管和其他电路元件（如电阻、电容等）能组合在一个很小的硅芯片上成为集成电路（见图 5.1）。在复杂电路里这些元件非常紧密地排布着，彼此间的信号传输非常迅速，与真空管相比，其能耗也很低。以硅为基础而制成的晶体管是现代计算机革命的心脏。因此，现代电子工业和计算机发展基地，理所当然地被称之为硅谷。

其他各具特殊电学性能的化学材料也很重要。常见的有导体和绝缘体，还有一种超导体，它能导电而无能量损耗（一般导体都因有电阻而耗费能量），超导体具有现实用途和潜在意义。化学家还研制成特殊磁性材料，用于制作计算机的信息存储器，有的材料则可用于制作光盘（CD），它在计算机及其他领域都有用处（图 5.2）。

这个化学领域是**材料科学**的一个组成部分。电气工程师和固体物理学家、化学家共同参与材料科学的研究，设计和研制电子学需要的各种材料（图 5.3）。

计算机对化学影响之大，正如化学对计算机的影响一样。化学家所用的测量仪器均由计算机进行控制，所得的实验结果又都输入计算机进行数学分析。目前正在兴起一个新领域，用计算机做“实验”。化学结构的计算以及未知化合物性能的预测均可由计算机独立进行。这个领域就是计算化学。

5.2 什么是计算化学？

在本世纪初形成了一个惊人的新理论：**量子力学**。按此理论，所有化学可以从头进行计算而毋须进行任何实验。任何未知化合物的性质都能被正确预示，任何未知化学反应的速率及其产物也能被预知。这些都有赖于求解一个不可貌相的简单方程式，即 Schrödinger 方程式：

$$H\psi = E\psi$$

这个方程式看起来很简单，但要理解 H, E 和 ψ 的意义，则涉及数学、物理和化学的深奥知识，非本书所能介绍。可惜，到目前为止，这个方程式只能处理最简单的分子。

即使如此，已有若干方法能求得该方程式的近似解，足以引起人们的实际兴趣。最好的近似方法也需要花费计算机大量的时间，但是用速率快的、存储量大的计算机和计算化学家编制的新程序，计算速率就可以快得多。越来越能用计算方法重复实验数据，从而做出有用的预测。

另一个重要的计算技术是**分子力学**。计算分子性质的方法在考虑**分子模型**时是很有用的，借此可以预示柔韧性分子最佳的三维几何形状。这种方法已广泛用于现代药物化学界进行新药的设计，也用于预示蛋白质折叠的几何图形。

5.3 计算化学怎样帮助我们测定蛋白质的形状？

某基因的序列一旦被测定，那末按这个基因编码的蛋白质中的氨基酸序列就知道了。例如，基因中一个 GGG 三字母组就代表最简单的氨基酸——甘氨酸——的密码。可是像酶这类蛋白质的性质还要视它们的三维几何形状而定。在一个酶分子中几个与催化有关的基团必须处于相邻近位置，才能起协同作用，但这些基团在氨基酸序列中相距可能比较远。例如在核糖核酸酶中经过折叠，有两个重要的氨基酸处于相邻位置，而两者在链上实际相隔着 100 多个氨基酸。如果不对这些氨基酸序列的三维几何图形进行研究，只凭其排列次序是不能充分了解的（图 5.4）。分子力学借助于量子力学巧妙地处理这个问题，指出可以从两个方面去解决。



图 5.4

蛋白质的带状图形，只代表一般形状而不含化学详情。这个带子标明蛋白质柔性链折叠的行径。这个图象是根据 X 射线法直接测定蛋白质结构而得到的，用算法预示某种蛋白质折叠的精细三维结构的希望与日俱增。

首先考虑最简单的问题是蛋白质的氨基酸链要折叠成最稳定的三维结构形状，这就要求我们找出哪种结构是最稳定的，对于含有上万个原子的分子来说，这是很大的难题，但与其他分子相比，这还算是比较容易的。其次还要考虑的是蛋白质必需处于稳定的几何形状，不一定是最佳的，但是这种布局比较容易做到。可以用山和谷做类比。

当你从山上走下坡时，来到一个谷地休息时，它的周围还有群山环抱，你会决定就在这里休息，觉得这个谷地已够低了。尽管别的山头那边还有更低的山谷，由于容易到达这个谷地，而决定不再继续前进。分子也会这样做，它们可以处于一种能量低的稳定的几何形状，而未必能有趋于能量更低的途径。经过计算可以剔除那些难于达到的能量最低的几何图形。在研究这个问题时，计算化学家不仅计算各种稳定状态的能量，还要计算蛋白质进行折叠的途径。

问题还不止于此，现已证明，有些蛋白质的折叠是借助于**陪送蛋白质**进行的，它与未折叠的蛋白质相结合，沿着选定的折叠路线护送到终端，然后就脱离（这和长者护送少女相似），所以它们是一类折叠催化剂。在折叠路线的计算中要把这种陪送者包括在内一起进行计算。

计算化学面临的挑战是艰巨的，但也正在取得很大的进展。年轻科学家若对计算机有兴趣的话，那末计算化学是具有令人兴奋前景的研究领域。

关于未来 5

电子材料

各种电学、磁学、和光学性能不断改进的新材料将继续推动电子学的发展。化学家、物理学家和电子工程师的合作研究，在材料科学领域里将取得有潜力的惊人进展。

新的化学研究使硅芯片的速度更快、尺寸更小。新磁性材的开发，使计算机存储器可以在更小的空间储存更多的信息。还发现有些化学制品可以在某种光线照射下变色，而在另一种光照下变回来，这种材料有可能作计算机储存信息的一种新方法而引起人们的关注。它们可能是另一类“电子管”，其中光代替了电，因而称之为**光学计算机**。光速比电子流动快得多。化学家正在设计和改进激光器，使它能作为这种新型计算机的光源。

单个分子即使是由许多原子所组成，也还是非常小的物体。但是现代技术让化学家在某种场合下“看见”了单个分子，甚至还能判定它的颜色。是否能用光子或电子来改变这种单分子，而作为一种储存信息的方法？是否能有办法读出这些信息？当然，目前还仅是梦想，但果真如此，我们就可以将大量信息储存在一个很小的空间中。

研制越来越小的电子器件和计算机是**纳米化学**领域的组成部分。在这个领域工作的化学家正在试制真正很小的电学、光学和机械元件。如多种细菌具有微小“马达”而能浮游，我们是否能制造这种小“马达”呢？

还有一个重要的相关领域是**分子电子学**。化学家希望元件经过**自组装**在一个很小的区域里形成有用的电子线路。在化学现象中一般分子间的相碰和结合是自发的，而不是靠外力的。我们能否利用这种自发性，让电子元件按指定的形式进行组装？我们能否制造高聚物导体，用以取代金属电子线路？我们能否用光来促发某些化学反应，用于组装电路？如果可行的话，那末光束聚焦到很小的图象上，便能产生所需的电路。

聚焦光源早已用于制造电路。即利用光促发化学反应产生聚合物，它在硅晶片表面形成保护层，然后按设计要求对晶片进行化学刻蚀而成电路。我们希望的是：利用光化学直接制造电路来取代上述间接法。

液晶已广泛用于手表和便携式计算机的显示。它们是由一类在电场中呈现取向性的分子所组成，其光学性能又依赖于这类取向性，所以它们能将电信号转化为可见图象。这个领域可期望得到不断的发展。

另一个令人惊奇的前景是：某些分子当和其他化合物结合时，会产生电学或光学性质的变化。这种分子可用于制作**化学传感器**，用它可以检测毒物或监视激素水平和其他生物化合物的水平。在某种意义上说，它们是电鼻子或电味觉器，一旦有化学结合发生，即有信号响应。

计算化学

当今很多年轻人有志于从事能利用他们在计算机方面的经验和兴趣的职业。计算化学就是其中最好的去向之一。

实验化学家日益了解到：有很多问题只有靠计算才能解决。我们必须开发更好、更快的方法，以满足大量计算的需求。看来，用计算机方法进行预测，而实验化学家要进行核实，若计算机所得结果每次都对，我们就相信其预测的正确性。

那么用计算化学阐述而尚未完全成功的问题有哪些呢？

1.当分子中联结原子的化学键具有柔韧性时，则该分子可具有不同的形状（如一条蚯蚓可扭曲和卷曲）。该分子最稳定的形状是什么样的？这个问题对蛋白质和核酸这类大分子的研究是十分重要的，即使对像糖这样的小分子，如果要理解它的性质，也需要对它的形状进行可靠的计算。

2.即使我们知道了某种分子最稳定的形状，但那些比较不稳定的形状在化学或生物学方面也可能起一定作用的。当药物和蛋白质相结合时，它们会发生变形以镶嵌合适。改变形状时需要多少能量？对药物而言，这种变形对进入正确结合部位的能力，有什么影响？

3.分子溶于水后，其形状有何变化？这涉及到溶剂的影响，常见的溶剂是水。因为生物化学反应是在水溶液里，所以我们必须了解它的影响。

4.某种未知分子会具有什么样的化学性质？例如把它作为燃料，那么放出的燃烧热是多少？又如作为未知的化学反应，其化学反应速率有多快？在这方面已有很快的进展，并且用算法预示实验结果的可能性也越来越大。

5.化学反应是如何发生的？我们想要看到原子分子怎样相碰撞，想观察成键和断键的速率，想了解能量怎样随生成物释放等等。除少数简单情况外，至今我们还不知道如何直接观察化学反应，因为化学反应是在很小的区间内极快地进行着。可是，对此类问题可以进行计算，关注的是计算结果是否正确？诸如化学反应速率以及温度对反应速率的影响等问题的计算预测结果，正在用实验法考核其准确性。这个领域的研究确有进展，但离目标尚远。

6.当两种物质起反应，其生成物最可能是什么？例如，含碳氢键的分子中的氢原子能被氯原子取代，但哪个氢原子容易被取代？能否指定哪个氢原子起反应，还是只能得到混合物？

这些问题都是计算化学家希望去解决的。这并非仅是学术方面的兴趣，例如我们能预言某些化合物的性质，或预示某些反应可能生成的产物，那就可以少做许多无效的实验。经典的“振荡和焙烧”（shake and bake），

试验和误差修正 (trial and error) 的时代将被可信的合理化计划所取代。有志于计算机的青年化学家将是创造新世纪的主力军。

第 6 章 在生物体和工业中的催化作用

两人相见类似于两物相遇，若能起反应，两者都有变化。

——Carl Jung 《现代人寻找的精神》

Jung 的论点对人际交往可能是正确的，但两种化学物质之一若是催化剂，上述说法就不对了。**催化剂**能促使某些物质发生化学反应，而它本身却没有变化。本章将举例介绍催化剂是怎样工作的。

没有一类物质能像催化剂那样广泛渗透在现代化学之中。化学制品和药物的工业生产需要用催化剂来促进化学反应的进行。与生命有关的生物化学反应都是由酶进行催化，这些酶是颇具盛名的高效催化剂。DNA 和 RNA 的主要功能之一是产生密码，指挥细胞制造酶，并将密码转入特定的酶催化作用。汽车用的**催化转化装置**能使汽车尾气中有毒的氮氧化物和一氧化碳转化为无害物质。

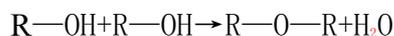
6.1 催化剂能扮演什么样的角色？

一般而言，催化剂能加快反应的进行，而本身却保持不变，所以它可以不断地起催化作用。少量催化剂可以对大量物质起催化作用，直到某些原因使它失效（化学家称之为“中毒”，酶是人体内的催化剂，真正的毒物就是使酶失效）。许多化学反应进行慢的原因是反应分子往往要经过一种能量较高的难于达到的中间状态，而生成物的能量却往往低于反应物。

再以具有隧道的山脉作个比喻，例如由丹佛至旧金山，走陆路是下坡路，由海拔 5000ft（英尺）（1ft=0.3048m）下降到海平面。但两地之间有许多高山，要越过这些障碍，需要消耗能量，进程当然就慢了。我们若用挖掘山洞开隧道的办法处理这个地理问题，那末就不需要消耗那么多能量了。催化剂就是为化学反应开辟新路径，避开了难于跨越的高能状态，犹如开通了隧道。化学家现在就是这样认识催化作用的。

一个实例

乙醇（就是存在于啤酒、果酒和烈性酒中的酒精）可以转化为乙醚，它是外科手术中常用的麻醉剂。乙醇转化为乙醚时需要用酸（如硫酸）作催化剂，化学反应式如下：



式中 R 代表乙基，O 代表氧原子，H 代表氢原子。上式表示 2 个乙醇分子 (R—OH) 起反应生成 1 个乙醚分子 (R—O—R) 和 1 个水分子。尽管这个反应是能够进行的，但没有催化剂存在，就不可有效地进行。一瓶伏特加酒长期存放不必担心有乙醚的产生。

硫酸作为催化剂，能将 1 个氢原子传递给乙醇分子中的氧原子，这个氢原子其实是 1 个质子，就是失去电子的氢原子，写作 H⁺。乙醇分子中的 OH 基要形成 H₂O 分子，还需要 1 个氢原子，从硫酸得到 H 原子，比从另一个 R—OH 分子容易得多。再看乙醚分子的形成，第 2 个 R—OH 要失去 1 个 H 原子，即可和第 1 个 R 基结合形成 R—O—R，失去的那个 H 原子就形成了另一个具有催化性能的 H⁺，尽管它并不是原来的那个氢原子。

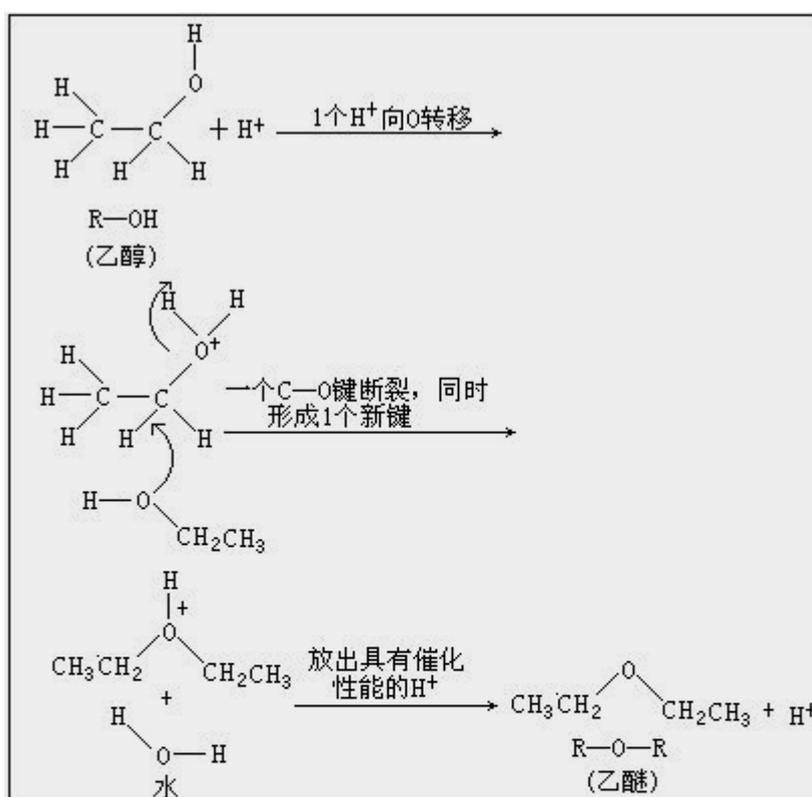


图 6.1

酸质子催化法使乙醇转化为乙醚，图中有两种箭头，由左向右的直箭头，表示由反应物经过中间态转变为产物的进程；弯箭头则表示反应过程中化学键的形成和破坏。在第 2 步中，H₂O 分子自乙基碳的原子上脱离(上面的弯箭头表示 C—O 键的断裂)，同时另外一个乙醇分子和该碳原子形成新键(下面的弯箭头表示)。水分子脱离时带走了 C—O 键上的电子，而成为不带正电的中性分子。第 2 个乙醇分子形成新键时，氧提供了电子，因而呈正电性，在下一步失去 H⁺ 后，便形成中性的乙醚。

图中乙基有两种表示方法，一种方法是标明每个碳原子所连接的各氢原子，便可清楚看到碳原子和氧原子的连接以及第 2 个乙醇分子和该碳原子的作用。可是在另一种场合，用 CH₃CH₂ 或 CH₂CH₃ 代表乙基时，就不需标明碳氢连接的细节了。

化学家认为上述化学反应的机理如图 6.1 所示，化学研究已证实其正确性。该反应中 C—O 键断裂而生成 H₂O 分子是需要很高能量的，但当氧原子上带 H 时，C—O 键就很容易断裂，这个 H 就来自催化剂。两个乙醇分子的连结形成乙醚属于取代反应，第 2 个乙醇分子的氧先取代了 H₂O 与

C 的结合，然后失去 1 个 H^+ ，即成乙醚，该 H^+ 又将附着于另外一个乙醇分子，继续发生反应。

非催化反应的能垒是如此之高，反应几乎不能进行，当加入催化剂之后，另辟新途径（如隧道），催化剂的功能在于引入了新的反应渠道。

6.2 作为生命催化剂的酶是何物？

人体生命细胞中虽然没有强酸性催化剂，但酶的催化机理和上述情况却很相似，当然也有其某些特殊性。

酶属于蛋白质类化合物，它们由数百个氨基酸相连而成。当发生催化反应时，起反应的分子叫做底物，它先和酶结合，即底物进入酶表面的空穴位置，酶就将 1 个质子 (H^+) 传递给底物的氧原子（和图 6.1 中乙醇转化为乙醚的过程相似），这个 H^+ 来源于酶的化学基团，它是由氨基酸衍生的，随后酶又可获得另外一个质子而再生，当产物脱离酶之后，它又可和另外一个底物分子相结合，继续反应。

对酶催化作用的了解虽然不断深入细致，但还未能像对简单反应那样详尽。化学家利用 X 射线结晶学方法能获得酶以及酶和底物结合状态的化学结构图像。化学家能改变酶及底物的化学结构，这种改变既能由化学反应来实现，也能靠改变酶的基因密码来进行，这就叫**转基因过程**。研究这些结构变化对反应速率的影响，有助于我们了解反应的过程。当然最为理想的是用快速影片或录像带来观察反应的进程，但实际上这是不现实的，所以只好用上述那些间接方法。在第 8 章还将讨论化学家是怎样认识化学反应和生化反应的细节。

6.3 酶催化生物反应时，能加速多少？又如何进行选择？

酶对化学反应加速 1×10^{10} 倍是常见的。用 5s 能说完的一句話，若无酶的催化作用，那就需要用 100 亿倍的时间（即 1500 年）才能完成。这种巨大效应使生命过程得以存在。酶催化的另外一个特点就是它的选择性。

像硫酸这类简单的化学催化剂可以加速多种反应而缺少选择性，这对化学家来说并不是问题，因为催化体系中只含有某种反应所需的反应物。但酶所要催化的体系是生命细胞，其中含有数百种具有充足能量的反应物，而酶能选择某些特定的反应进行催化。

这种选择性是由于在催化作用发生之前，酶需要先和某种底物相结合，酶和底物结合的部位有特定的相匹配的形状，而其他物质却不能相适应。例如一种酶能和某种氨基酸结合，却不能和该氨基酸的镜面对映体（即手性对映体，见第 1 章）相结合。而且酶所含的其他基团还能使它和底物

相结合的部位是特定的,所以底物即使能进入酶的口袋,若结合部位不对,仍然不能形成酶和底物的结合体。总之,酶中能起催化作用的基团各有特定的位置,若有不恰当的底物与之结合,酶的催化基团就不能到达关键原子的位置。

选择性一方面是指某种酶只催化那些特定的底物,另一方面,若某底物能发生几种反应时,而酶只选择催化某种反应而获得特定的产物。

在蛋白质中联结氨基酸的一种化学键叫肽键,有些酶能选择催化肽键的断裂,而形成另一种酶。例如消化我们所吃的肉类的酶,它是由一种非活性酶的肽键断裂而形成的活性消化酶。有一种酶专门催化肽键的断裂。假如断错了肽键,消化酶便遭破坏。底物几何形状精确嵌入断裂酶的口袋,使得只有一个处于正确位置的肽键可以断裂。

生成物的手性也是靠酶来实现的,例如天然氨基酸是由许多简单分子所组成,它们没有镜面对映体间的区别——即没有手性区别——但酶催化反应只能得到对映体之一(见第7章),这种选择性再次反映了酶和底物复合体的几何关系。

6.4 维生素能起生物催化作用吗?

只靠蛋白质中那些简单的化学结构,并不能有效地催化所有的化学反应,有些酶需要靠另外一种催化剂来帮忙,它们就叫**辅酶**,辅酶是典型的维生素的衍生物。

例如维生素 B₁(也叫硫胺素)是使糖类转化为其他生化物质并释放能量的命根子。但人体细胞不能产生维生素 B₁,我们只能从食物或维生素补剂中摄取。化学家已成功地合成了硫胺素,它和天然维生素 B₁完全相同。维生素片和添加 B₁的食品就选用这种人工合成的硫胺素。

我们吃进去的硫胺素,在体内靠某种酶的催化添加2个磷酸根而成为硫胺素磷酸盐,它是一种辅酶。硫胺素的化学结构见图6.2。外加的磷酸根帮助硫胺素进入某种酶的口袋,该酶需要硫胺素焦磷酸盐协助进行催化作用。要起反应的底物和硫胺素焦磷酸根结合,然后酶就帮助硫胺素衍生物催化底物发生反应,当产物脱离酶之后,那么顺着硫胺素衍生物的辅助,反应继续进行。

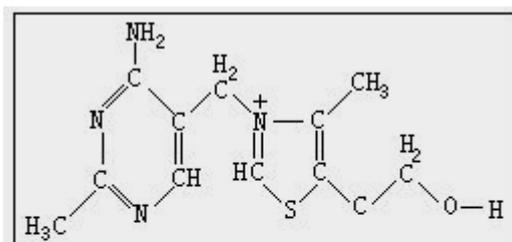


图 6.2

硫胺素的化学结构式，硫胺素也叫维生素B₁，在生命体系中两个磷酸根(焦磷酸根)附于右边的OH处，这就形成了辅酶——硫胺素焦磷酸盐，它能协助多种酶催化生物反应。

各种维生素 B 都是这样起作用的，即转化为辅酶后协助酶进行催化作用。例如啤酒、果子酒中所含乙醇是由发酵产生的，其中含两步酶催化作用，先是修饰的硫胺素（维生素 B₁）酶催化，随后是修饰的烟酸（维生素 B₃）酶催化。

6.5 酶的作用知多少？

用 X 射线法已测定了许多种酶的三维空间结构详情，为了了解确切的结合部位，常用口袋中已装有底物的样品作为测试对象（见图 6.3）。多种状况下的催化基团也已被确证，但我们的认识仍有分歧。

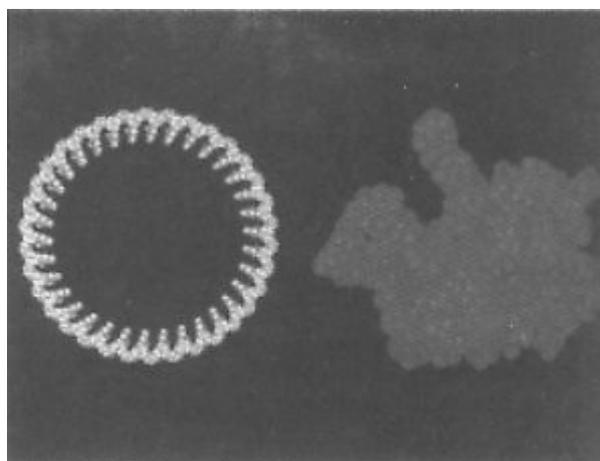


图 6.3

一个 DNA 环位于对它起作用的酶。该酶的结构已由 X 射线结晶学方法测定。

我们还不能对酶催化作用进行定量的表述，也不能阐明酶具有加速 1×10^{10} 倍的能力是出于什么样的特性。还有我们尚未能利用天然酶所含的化学基团制造人工合成酶，并使它具有天然酶的催化功能。化学研究正热衷于这些问题，现在有一个研究领域称为仿生化学，它的研究焦点是模拟天然酶化学，目的在于制造出优良催化剂的同时能更好地认识催化作用。现已获得一些有趣的成果，如酶的柔韧性就是其中之一。

前面曾提到“底物进入酶的口袋”，意思是指口袋已有特定的形状，底物恰好适合，这种看法不完全对。现在认为许多酶的口袋原呈开口状，让底物容易进去，然后环绕着底物收口，致使完全适合。

过去人们常用锁和钥匙的关系来描述底物和酶的匹配，但现在看来用维纳斯苍蝇捕获器的模型可能更合适些，合拢是当苍蝇出现时才触发的，正如酶的口袋合拢是由底物出现而启动。当催化反应完成后，酶口袋又打开，让产物离去，并准备接受另一个底物。

另外一个深入了解的实例是：酶能使几步反应卷拢在一起进行。当底物和酶结合时，其实有几个酶的基团处于周围附近，共同促进催化反应的进行。这已用氘（重氢、氢的同位素）试剂证明几步反应可以同时进行。在同一个反应体系中氘比氢运动得慢一些，仔细研究氘的速率效应说明，两步反应的氘可以同时运动。

例如本章开始提到乙醇转化为乙醚的反应过程中有两步质子转移反应，首先有 1 个质子传递给乙醇分子的氧原子，在取代反应之后，又从另一个乙醇分子的氧原子上移去 1 个质子。若有一种酶能催化这个反应（可是现在尚未找到这种酶），两个乙醇分子被一起装进酶的口袋，一个催化基递给质子，另一个催化基移去质子，两步同时进行。

这对于同步过程反应速率的加快极为有利，看来使几步反应合并进行的能力是酶催化奥秘之一。化学家已制得若干模拟生物催化剂，十分有效地模拟了这种特性。

6.6 对酶的认识是否有助于新药的设计？

许多药物的作用在于阻止某些酶的作用。药物的设计要使它和正常底物相似，但略有不同。和底物相比，药物缺少一个正常的化学反应基团，所以酶就不能催化药物进行任何反应。此外，药物的设计要使它和酶的结合力大于正常底物，这就保持药物能占有酶而防止正常底物和酶结合。这样就延迟或完全阻止了某些不希望发生的生化反应的进行。

有一种合理的方法来设计强结合力的底物类似物，这就是借鉴于已知的化学反应进程。正如我前面已提到过：普通化学反应之所以慢是因为它们必须经过一种高能量的中间状态（山顶），而催化剂开辟一条能量较低的途径（隧道），在途中这种中间体因与催化剂强结合而变得稳定。所以有一种方法就是制造具有强结合力的底物类似物，作为药物就像是化学反应进程中高能量结构中间体。按此诀窍设计的新药，其结合力可以比底物强几千倍。

6.7 汽车用的固态金属催化剂是怎样起作用的？

这类催化作用的基本原理也是引入一条新的反应途径，沿着这个新途径原来不稳定的中间体变得稳定，这种稳定性来自某些金属的特性。

以催化加氢为例，在加氢过程中，氢分子加到不饱和的有机分子上使它成饱和状态，所谓不饱和就是指碳与碳之间有双键（见图 6.4）。例如经过“部分氢化”的花生酱中，某些脂肪的双键随加氢而除去。用同样的方法可以把不饱和的油类转化为麦琪林（即固态的植物黄油——译者注），肥皂中的不饱和成分用加氢的办法除去后，就不会变哈喇。按说这类反应是很容易发生的，因为生成物的能量低于反应物的，但若没有催化剂，其反应速率几乎为零。

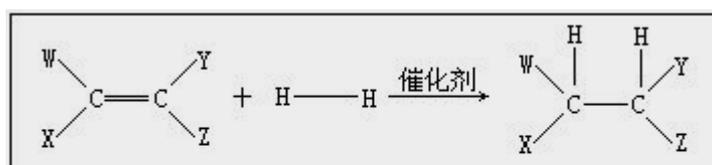


图 6.4

碳—碳双键的加氢，其中W, X, Y, Z可以具有不同的结构。

问题在于氢气中的两个氢原子间的结合力很强。而生成物中这个键已不复存在，这两个氢原子要分别加给两个不同的碳原子，也就是说，必须断开这个强的氢—氢键，反应才能发生，催化剂能解决这个问题。

氢分子可以和金属镍（Ni）起作用，形成一种特殊的镍—氢键，此时两个氢原子就不再互相结合了，然后它们就可以分别加到双键的两端。因此，金属镍是常用的加氢催化剂。

正如我们在第一章就提到的那样，周期表是按元素的一些普遍性质而排列的，性质相似的元素位于上下同一列。在周期表中位于镍下方的金属钯（Pd）和铂（Pt）无疑也是加氢催化剂。

像铂那样有特殊性能的金属，它们不仅能和氢成键，也能和其他化学基团成键，因此它们是多种化学反应的有效催化剂。铂在石油工业中有广泛应用，其他金属在各种工业化学中也各有用途，不同的金属具有不同的性质，催化着不同的化学反应。例如金属铑（Rh）能有效地除去汽车尾气中氮氧化物，而用于汽车尾气催化装置以减少其对空气的污染。当前有兴趣的课题是研制新催化剂，它能像铑那样有效，而且价廉适用。

6.8 为什么工业界常用的固体催化剂并不具有金属特性？

如在石油化工产品的制造工业界常需要一类酸性催化剂。它和前述乙醇转化为乙醚的例子相似，即催化剂能传递一个质子给反应物并顺捷径得到生成物。如选用不溶于反应体系的固体酸性催化剂，就不必考虑催化剂与生成物的分离，无论如何这是受欢迎的。最典型的例子是将固体酸性催

化剂装在管子里，气态的或液态的反应物经过管道时即起反应，管子往往是可以加热的。生成的产品在管子末端流出，而固体催化剂在管中原处不动。你去炼油厂时，所见到的高大反应塔里就发生着上述这类催化反应。

有些固体催化剂还有另外一个优点——它具有空腔结构，根据形状有选择地催化某些反应。这类催化剂叫**沸石** (Zeolites)，它们是由铝、硅、氧等元素组成的化合物。化学家已研制成多种沸石催化剂，各具不同的内部结构，能容纳某些分子，而不能容纳其他分子。例如有的沸石催化剂可以抓住苗条的分子，却不能容纳肥胖的分子，因为这种沸石的空间无法收容太胖的分子（见图 6.5）。

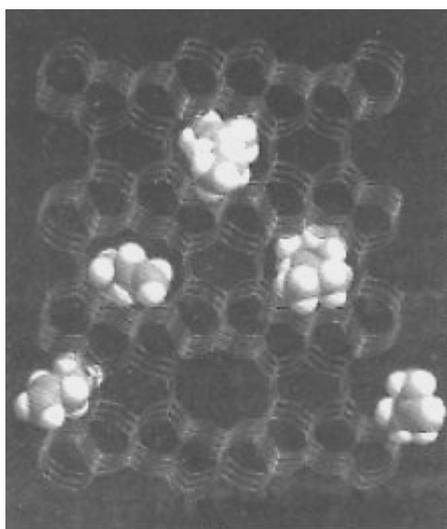


图 6.5
沸石催化剂的一种计算机模型，其空间适合一个烃分子进去。空间形状促进由石油获得 4 碳分子

这类催化剂只选择那些能容纳在它们空间范围内的反应分子和生成分子。就此而言，它们和前面提到的酶很相似，尽管这两类物质的化学组成完全不同。石油化学工业利用某些催化剂在形状方面的选择性，引导化学反应沿着我们所需要的途径进行（图 6.6）。



图 6.6
石油化工厂一瞥，在厂内将石油转化为有用的各种化工产品，反应塔内装有能使原油裂解为小分子的催化剂，这些较小的分子可用于制造塑料、防冻剂以及其他有用的材料。

关于未来 6

将来催化剂显得更为重要。所有的生化反应都有赖于天然催化剂(酶)而进行。酶不仅大大地加快了反应速率，并且使反应能在温和条件下进行（在体温下和水溶液中进行），否则反应条件将是很苛刻的，需要强热。此外酶具有很强的选择性，这就有利于提高需要产物的产率，而不生成那些没用的废物。酶反应的这些特性开辟了化学催化研究的两个新方向。

一是将更多地利用酶来进行某些有需要的化学反应。它们能催化某些不同于常规生化功能的化学反应，有些酶经过修饰，其潜力得到了延伸。例如在酶表面发生化学反应时，可能引入另外一个新的催化基团。此外也可进行**基因工程**的研究，这是指改变基因密码产生新的修饰酶。

二是将酶作为模型，酶告诉我们有哪些可能性，对酶催化的详细化学研究，我们还知道酶是如何工作的。然后化学家就将进行新的分子设计，使它能和酶一样地起作用，但并不完全像酶那样属于蛋白质。

例如酶对结合分子的形状是有选择的，而化学家研制的沸石催化剂虽是一种矿物类的材料，但它也能结合分子，并且也要选择恰当的形状。酶所用比较简单的催化基团，在氨基酸和有些辅酶中也存在。但化学家所发明的高效催化剂有些是基于某种金属（如铂），而并未见诸于酶。

仿生学面临一个特殊的挑战，这可能为人类取得很重要的成果。空气中的氮气很不活泼，但十分有用。如它能和氢气作用生成氨（ NH_3 ），便可用于制造肥料及其他含氮化工产品（见图 6.7）。氮气和氢气的这个化学反应现在是在高温高压和使用金属催化剂的条件下进行的。但有些植物却能在室温常压的条件下使空气中的氮气转化为氨，这种生物转化就是有

名的**固定氮**，这是靠酶实现的，它比工业催化剂好得多。我们能否知道酶是怎样工作的？更重要的还要知道我们如何去实现？这个挑战仍等待未来的化学研究去解决。

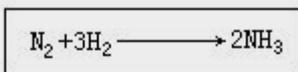


图6.7

氮是一种极其重要的化学产品，用以制造肥料和多种重要的其他化工产品，氮可由空气中的氮转化而成。商业催化剂的反应条件是高温和高压，但植物根部的微生物却能在常温、常压下将氮转化为氨。挑战之一是研制能在常温、常压下供合成氨用的商业催化剂，节省能耗。

另外一个挑战是模拟光合作用。我们能否找到一种催化剂，利用太阳能使水分解为氧气和氢气？能否利用太阳能催化制造其他分子？能否像植物的光合作用那样借催化剂使空气中的二氧化碳转化为其他有用化学制品？

还有一个与天然催化剂的模拟无关的问题。我们想知道如何使甲烷（ CH_4 ）转化为汽油中所含的那些较大的分子？我们需要研制一类新催化剂，它们能具有强选择性，能按特定的反应生成特定性能的高分子。我们需要研制具有自催化功能的催化剂，例如**自复制分子**，它是生物体繁殖能力的模拟。

我们日益盼望化学家成功地设计具有酶那样加速能力和选择能力的新催化剂，使用这些催化剂就能越来越高效地进行化学合成和化学制造。成本降低了，能耗节省了，环境污染也减少了。这是未来化学中最令人兴奋的研究领域之一，这将指引我们进一步了解生物化学，进一步了解化学，并且使我们有能力大大改进现用的化工生产流程。

（华彤文 译）

第7章 化学家怎样创造新分子

关心自己和自己的命运的人总是对为技术献身感兴趣……我们的思维创造将是造福于人类而不是祸害。

——阿伯特·爱因斯坦，1931

当代化学家设计和创造新物质之多令人惊异。大多数新物质是在实验室里造出来的，其量很少，只够测定性质。本章将要讨论化学家为什么以及如何创造新物质。

在讨论前，我们不妨先看一看，在“创造”这个概念上，化学与其他科学相比有何不同。哪里有什么合成天文学——造一个新的恒星或行星来跟天然星体作性质对比？哪里有什么合成地质学——造一个新的地球来跟我们居住的地球比个高低优劣？生物学倒是有创造的东西，动植物都有杂交而得的新食用植物或新家畜品系。但化学关心的远非自然界已有的，而是创造自然界没有的，正是在这方面，化学遥遥领先于其他学科。

7.1 化学家如何决定应该研制什么新分子？

我们必须区分工作的不同目的以及为不同目的而选择不同分子。目的之一是制造的新物质可能有用。有的时候，正像本章开头的爱因斯坦的话那样，化学家制造新分子是因为它们也许是有效的药物，或者是因为它们或许会有第3章描述过的那些多种多样的用途。

另一目的是扩大我们对化学科学的认识。化学是与认识物质的性质及其变化有关的科学。我们感兴趣的是一切受自然定律制约的化学的所有可能性，而不仅仅是恰好在世界上已有的化学。当然，我们还要使自然的化学顺理成章。

例如，天然的DNA具有一种特别的化学结构。不过，究竟结构里的哪一部分具有它的功能却不明显。化学家已经用糖类造出了不同于天然DNA的类似物，以便对天然结构特异之处的认识更透彻。他们发现这种经修饰的DNA类似物在生物功能方面与天然DNA不尽相同。

化学家常常创造已知化合物的类似物。另一个例子是，有一种合成橡胶是天然橡胶的类似物，所不同的仅仅是，天然橡胶里的甲基(H_3C)被氯原子取代了(图7.1)。合成橡胶的性质就某些用途而言比天然橡胶好。

有一类存在于自然界的特别分子，只有合成了以后才能进行研究。它们存在于太空，而不存于地球上。在太空中存在某些不常见分子的巨大云团，它们塌陷便形成黑体，人们根据其所释放的光波进行了检出。化学家们根据它们的光学性质推测太空的化学结构。为了证实这种推测，就要在实验室里合成并研究它们。

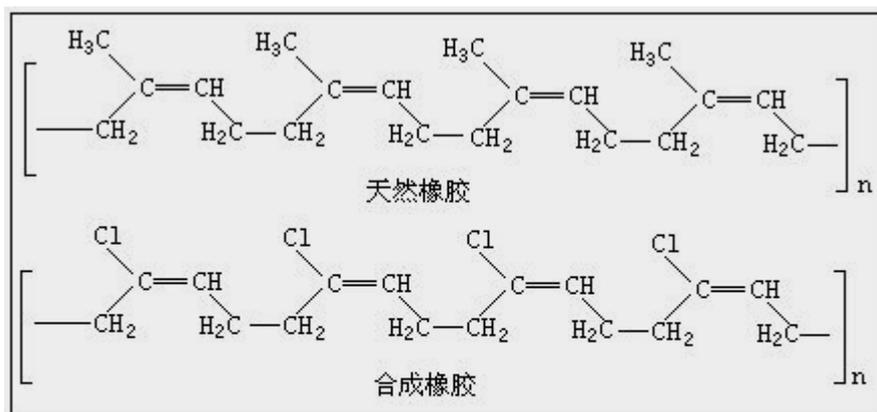


图 7.1

上图：天然橡胶高分子的一段，它是由许许多多5碳单元相互连接而成的高分子，这里只给出了4个单元，而实际存在于天然橡胶里的单元成千上万。
 下图：合成橡胶高分子的一段，它是一种合成高分子，天然橡胶的H₃C基团被氯原子取代了。

确定了目的，化学家还要决定制造什么。正像第二章讨论过的那样，类比是制造可能药物的强有力的原则。我们制造跟酶的底物相像的分子，或者甚至于更有效地合成跟某些酶促反应的不稳定的中间产物相像的分子。为了懂得如何使它们更有效，我们就要测定那些具有令人感兴趣的生物功能的天然化合物的化学结构。

类比曾经推动了新的有用材料——例如塑料和合成纤维——的设计。它们是合成**高分子**。高分子是由许多小分子用链连接起来的分子。有时链间也相连。棉花是由成千上万个糖单元连接而成的高分子。蛋白质，包括蚕丝或蜘蛛丝，是由氨基酸单元连接而成的高分子。化学家们用其他小分子作单元连接，造出新的高分子。

美国杜邦公司的 Wallace Carothers 在 1939 年发明了**尼龙**，推动了这一领域的发展。当他得知蚕丝是由氨基酸通过一种称为“酰胺键”的化学键连接起来形成的高分子后，他就决定创造用酰胺键连接的高分子。但是他没有用天然氨基酸，而是采用了更简单易得的高分子单元。他懂得如何把它们连接起来后，便发明了由成千上万个单元连接起来的尼龙，这是一种许多性质可以跟蚕丝匹敌甚至于超过蚕丝的高分子材料。

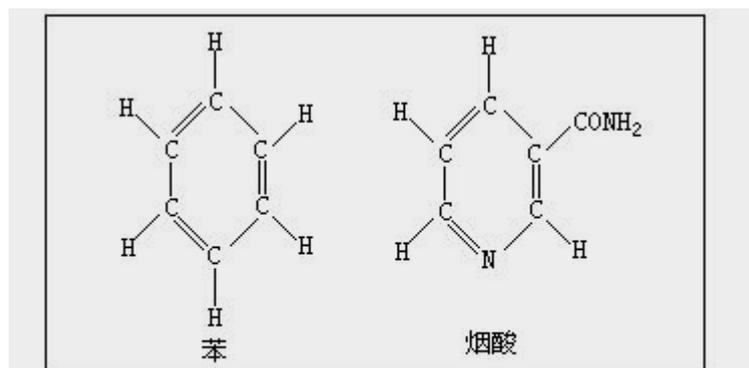


图7.2

苯分子的化学结构式(左)和一种叫做烟酸的维生素的化学结构式(右)。两者分子里的环内电子会分散开来，导致异乎寻常的稳定。

有的新分子，合成的目的是为了扩充并验证化学理论。例如许多天然化合物含有被称为苯环的结构，这是一种由6个碳原子用单键和双键相间连接而成的环（图7.2）。例如，苯环是苯丙氨酸和酪氨酸等氨基酸的一部分，这两种氨基酸几乎分布在所有蛋白质中。在许多维生素和DNA，RNA的结构里也有相近的环状结构。这些环异乎寻常地稳定。量子力学的化学理论对它们为什么稳定作出了解释。基本道理是，在苯环中某些电子分布于整个环，从而抵消了其他电子对它们的排斥。

然而，这种理论预言，还有许多其他的环状结构也同样稳定，可是在自然界里却找不到那些被预言的环状结构。创造这些环状结构的分子来验证理论的欲望驱使化学家们合成了新的由3，4，5，7，…个碳原子组成的环体系。结果，某些新环的确很稳定，但并非全如此（图7·3）。这一发现是苯环简单理论没有料想到的，但可用更高深的理论进行解释。

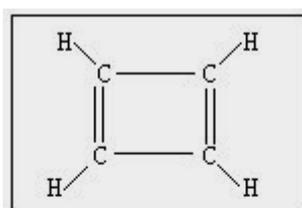


图7.3

一种叫做环丁二烯的分子，尽管电子在环内也是像电子在苯环内一样是分散开来的，可是这个环却并不像苯环那样异乎寻常地稳定，正相反，它极不稳定，起先这个发现使化学家们感到诧异，但现代化学理论能够解释，为什么6碳环稳定，而4碳环不稳定。

合成计划证实了某些化学理论，导致对另一些化学理论的修正。它还制造出两种从未有过的环，相应地也造出了某些有用的化合物。

化学家先想象后合成的新型化学结构的例子是很多的。例如，有一类化合物的结构里有一个金属原子夹在两个五碳环之间，有点像夹肉的三明治。甚至还有像单片三明治那样的一个金属原子下面有一个五碳环的很是特别的化合物。这些化合物已证实是用来合成高分子的有用的催化剂。这些化合物的合成大大扩展了我们的思想，由于它们在自然界里并不存在，这就促使我们去想像，化学世界里究竟还有多少尚未被探索的事情。

7.2 化学家如何计划未知分子的成功合成？

类比和想象是工具。化学有记录着过去的实验文献浩如牛毛，所有的化学家都不得不查阅它们，以便获知，什么是已经做过的。

一个好的化学图书馆要有杂志，像美国化学会会志或者英国的、德国的化学会的会志，用它们可以追溯 100 年甚至更早。还有一种特别的杂志，叫做化学文摘，是美国化学会出版的，用它可以检索到世界上所有的化学杂志里的文章的摘要。单单 1987—1991 五年化学文摘索引就超过 100 个大厚本，要占据图书馆的 26ft（英尺）（1ft=0.3048m）书架的空间。这还仅仅是索引，其中的每一篇文章的摘要就更厚了。好在现在有了电脑，它来得恰逢其时，使得我们可通过电子获取所有的信息了。

化学家要制造未知的分子时，首先要查一查，相关的化合物曾经是如何造出来的。然后他们就思考能否用相近的路子来合成新的预期可以合成的化合物，靠的是化学理论作出的预言。这就是类比的策略。

有时没有好的类比可找，特别是对那些全新类型的目标分子。于是化学家们就靠想象，靠的仍然是化学理论。这多多少少有点像一个优秀棋手下棋时的所作所为。

化学家先思考“结局”。他们思考：得到目标产物的最后几步是从哪个比较简单易得的反应物开始的？对于这些具体的合成反应，理论预言还起不起作用？或者，是否可以根据理论提出一个新的能够发生的反应？随后化学家们思考“中盘”：为得到这一反应物该以哪一种更简单的化合物为起始物？最后才是“开局”：合成上述起始物的原料（应该是买得到的化学试剂）是什么？当然，实验实际上是倒过来从头做起的。

对于一个复杂的目标产物，需要计划的步骤多达 30 步。这个计划和弈 30 步棋的不同点在于我们没有弈棋的对手，我们没法预期每一步的后果。如果我们的理论不那么牢靠，反应的后果有可能完全出乎预料，计划可能无法实现。假如确实如此，就不得不另制订一个新的计划，正是：吃一堑长一智。像下棋那样，也许在第 15 步我们想出一个变招，这取决于第 14 步的结果是否出乎预料。图 7.4 描绘了一种维生素的工业生产步骤，图 7.5 则给出了化学家曾经用很简单的起始物合成的最复杂的分子之一。

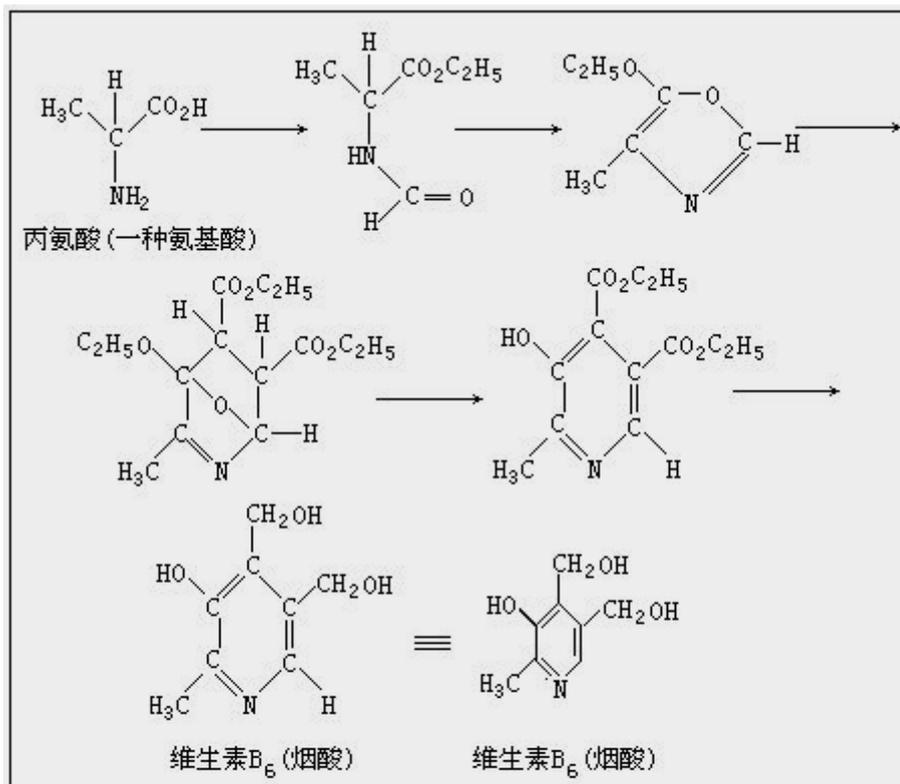


图 7.4

维生素B₆的合成。这里没有给出每一步化学反应的细节，因为那样做会超出本书假定的读者的化学知识水平。读者可以看到，最后的产物跟起始物看起来是如何地不同。起始物是一种易得的氨基酸。创造性的情景是在最终的目标产物里的六元环是通过3步反应先形成五元环然后制造出来的。最后产物的维生素的结构用了两个不同的结构式来表达。左边的那个画出了所有的原子，右边的则作了简化，像化学家们通常所做的那样，环内的碳原子和连在环上的氢原子没有画出来。

7.3 在哪里进行合成实验？

许多实验是在大学实验室里由硕士生和博士生们，还有已经获得博士学位的博士后们帮着做的。有的实验则是在国家实验室，例如国立卫生实验室里做的。还有相当多的实验是在许许多多工业界的实验室里做的。制药业的药物化学家特别热心于合成新物质。获得一种能够通过所有的药检的、实用的、可以投产的药物常常要合成多达1万种新化学物质。

药物化学家用最先进的化学基础知识创造出新化合物去做生物试验，或者，当发现它们具有令人感兴趣的生物活性时，设计一条高效生产流程来生产（图 7.6）。同样，化工企业的研究人员也以类比与想象相结合的思想创造出新塑料、新染料、新涂料和新的杀虫剂。那些博士学位追求者们受到高水平的训练是值得的，即便其中只有三分之二进入化工企业从事研究。先进的训练使他们在高度竞争的世界里出类拔萃。



图 7.6
合成新化学物质涉及到实验与电脑设计相结合

7.4 新化学物质一旦被创造出来，还要做些什么？

化学物质欲用于实际首先要回答两个问题：它具有人们期望的性质吗？它有无有害的副作用？

如果测试得出的结果正如人们期望的那样，合成的新化合物也许会用专利予以保护。专利给发明人数年的时间开发实际用途，出售产品，使那些没有通过艰苦劳动导致发明的人不能从中渔利。

某些国家试验过不许新药获得专利，其理论是病人应当从价格最便宜的新药得益，遗憾的是，结果在这些国家里没人愿意去做药物化学研究，因为没有专利保护，发明人就无法收回发明的成本。在大多数国家里，没有专利保护的药物业已减少。

受到专利保护的或者不能被保护的研究结果都要在化学杂志上发表。化学杂志还发表那些纯理论性的学术研究。合成本身也许有足够令人感兴趣的地方值得发表，或者它可能具有某种新的性质而值得深入探讨。

新分子有用的性质并不总是立即被发明者察觉的。例如，金属夹心化合物起先纯粹是出于科学上的好奇心而合成的，这种好奇心使 Geoffrey Wilkinson 和 Ernst Fischer 于 1973 年获得了诺贝尔化学奖金。后来由其他的人发现，这类化合物是合成高分子的有用的催化剂。

关于未来 7

合成的目标只潜伏在化学家的想象之中。然而，我们仍然可以描述一下如今和将来大家感兴趣的某些领域。

合成化学家正在尝试着设计可行的方法合成某些重要的稀有的化学物质。我们以从紫杉树里提取的一种药用物质为例。这种药物具有重要的抗癌性。但是它极其稀少。因而化学家们很想合成它。然而，它的化学结构对现有的合成方法是一个挑战。在实验室里人们已经合成了它。可是却无法投入生产，因为人们还没有找到一种用简单易得的原料来合成它的生产流程。

复杂的糖（碳水化合物）也是一种合成目标。它们在生物体内有重要的功效，好比是细胞表面的标签。例如，它们是区别 A 型血和 B 型血的标记。它们可以区分正常的人体细胞和入侵的细菌细胞。还有证据表明，细菌结合人体细胞表面的糖类而导致感染。因而，如果有游离的糖，就可以结合细菌而使人体细胞免受细菌感染。复杂的糖类在药物化学中很有用武之地，但是还需要寻找简便合成的好方法。

合成法也用来达到前几章提到过的追求目标。我们需要用新的化学物质来处理核电站产生的放射性废弃物。我们需要新的催化剂，使化学反应能像生物化学反应那样具有选择性。靠自然界人们无法达到这种目标，如前述那种用于细胞表面的糖。化学家们必须设计并创造出令人相信是有用的或者具有令人感兴趣的特殊性能的新物质。选择正确的目标和设计合成的方案，这是对化学家们的挑战。

更基础的领域是，人们正在持续不断地努力研制不同于天然物质现有结构的新化合物，以便弄清楚这种新的结构会呈现什么新的性质。

开发新的，具有普遍意义的，可以广泛地用于合成各种不同的目标分子（靶分子）的**合成方法**自然也是大家感兴趣的。特别是设计只会生成一种产物而不生成需要处置的副产物的反应。特别重要的是设计一种好的方法，用以制造想得到的具有手性的产物，尤其是作为新药的化合物。例如，人们时常发现左手性的化合物是有用的药物，而右手性的异构体却没有人们期望的药效。而大多数化学反应得到的产物是左手性分子和右手性分子的等量混合物，则必须加以分离。模拟自然界只生成一种异构体的新合成方法仍在开发之中。

为了避免溶剂对环境可能造成的危害，只要有可能，人们宁愿在水中实现化学反应。人们力求高效合成。反应步骤应该尽可能地少。每一步都应当是产率高、副产物少，而且耗能少、节省原材料。

将来更感兴趣的发展将特别是用计算机帮我们设计合成计划。人们想教会计算机按照优秀化学家的思考方式去思考：人们想让计算机去评估浩如烟海的已知反应，得知哪一个反应最适合得到某种预期的目标化合物；人们想开发一种**计算机——受控机器人系统**在实验室里实施合成反应。

最后，人们对所谓**仿生方法**也很感兴趣。自然界高效地制造着大量的复杂化合物。化学家正在模拟那些起催化生化反应的酶。模拟酶的选择性催化剂在化学合成中的作用极其可能会呈现日新月异的局面。

第 8 章 认识分子结构和化学变化

科学所能成就的一切只是完美的知识与完美的理解……

——H. Helmholtz 的学术讲演

当我们从自然界里分离出一种新化学物质时,或者在实验室里制造出一种新化合物时,必须测定这种新化合物的详尽结构。当一个化学反应在实验室里或者在一个活细胞里发生时,我们就应了解发生了什么以及怎样发生的。本章将描述这些领域里的化学问题,并介绍现今用来回答这些问题的方法。

8.1 化学家怎样测定新分子的结构?

首先要弄清的是新物质是否纯净。常见的鉴定方法是看看从中能否分离出其他物质。现代分离手段强而有力,可以分离几乎所有的混合物。然后再测定化学组成,例如测定一个分子里含有多少个碳原子、氧原子或者铁原子等等。

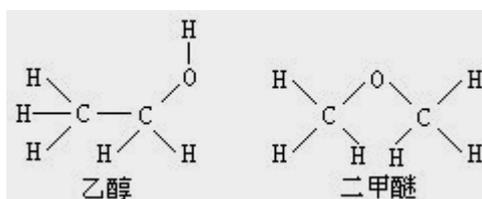
若分子不很大,它的组成可以用**质谱仪**来测定。质谱仪可以测定一个分子的质量(图 8.1)。有了分子量就可以确定化学组成。甚至于可以区分是一个氧原子(相对原子质量=16),还是一个碳原子(相对原子质量=12)加上四个氢原子(相对原子质量=1)。因为精确地讲它们就有差异。例如,通常定义碳的相对原子质量为 12.000000,以此为基础测得的氧的相对原子质量为 15.995915,氢的相对原子质量为 1.007825。因此,一个 CH_4 分子的相对质量为 16.0313,不等于氧原子的 15.995915。现代仪器完全可以测出这样小的差别,因而可以确定分子式。



图 8.1
一架用来确定新分子的组成的现代质谱仪。

知道一个分子里有哪些原子是一回事，知道原子在分子里是如何结合的是另一回事。在质谱仪里分子会被分解成碎片。测定分子碎片的精确质量来确定分子碎片的组成可以在很大程度上得知分子里的原子是如何连接的。此外还有其他强有力的测定原子连接方式的手段。

让我们再思考一次我们在第 1 章里描述的那两个具有相同分子式—— C_2H_6O 的异构体。可以用**核磁共振**（NMR）来区分它们。



核磁共振谱可以揭示分子里的氢原子有几种不同的结合方式。二甲醚里的 6 个氢原子是等同的，它们全都连在同一种类型的碳原子上，因而二甲醚的核磁共振谱里只有一个有关它的氢原子的信号；而在乙醇里，3 个氢原子连在端位碳上，另 2 个氢原子连在拉着氧原子的另一类型的碳原子上，最后还有一个氢原子是连在氧原子上的，它的核磁共振谱上就会显示一个 OH 上的氢原子的峰，一个 2 倍大的 CH_2 上的氢原子的峰以及一个 3 倍大小的 CH_3 上的氢原子的峰。

这个核磁共振谱还带给我们有关氢原子的化学环境的更详尽的信息。由于氧原子吸引电子的性质不同而使图谱里呈现不同的峰，而且出现在不同的位置。从每个峰的精细结构会告诉我们临近的原子上有几个氢原子。例如，乙醇的核磁共振谱上的 CH_3 基团的峰具有的形状会指示出临近的碳原子上有 2 个氢原子。

NMR 还可以用来测定分子里所含的碳原子的类型。二甲醚里的碳原子只有一种类型，因而它的核磁共振的碳谱里只有一个信号。乙醇的核磁共振的碳谱里就会显示两种不同信号。另外，碳 NMR 谱还揭示了每种类型

的碳原子上有几个氢原子，甚至于有几个临近的氢原子。充分发挥 NMR 谱的作用可以推导出简单分子里的原子排列方式，甚至可以确定含上百个原子的小蛋白质分子的三维结构。

X 射线结晶学是另一种强有力的测定结构的技术（图 8.2）。顾名思义，这种技术是把 X 射线穿过一种未知化合物的晶体。X 射线会在晶体里分散开来。这可以用水穿过喷头分散开来打比喻。计算机可以把 X 射线在一种晶体结构里喷射开来得到的花样翻译成晶体的结构。例如，第 7 章里谈到的 Dorothy Hodgkin 就是用 X 射线结晶学测定了维生素 B₁₂ 的结构的。她因而在 1964 年荣获诺贝尔化学奖。

还有其他仪器为测定分子结构做出了贡献。例如，红外光谱和紫外或可见光谱可以检出分子里某些特殊的化学排列的存在。还有一种仪器可以确定分子的手性。现代仪器极大地简化了测定化学物质结构的问题。

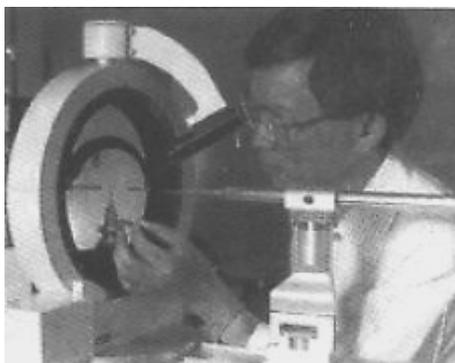
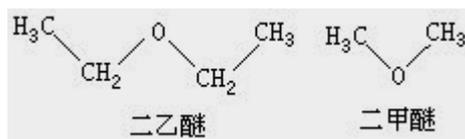


图 8.2
一个小晶体放在 X 射线中，以测定其结构。

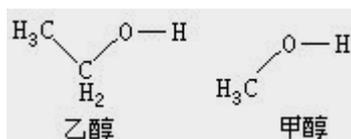
8.2 分子的精细结构与它们的性质之间存在什么关系？

这是化学的中心问题之一，而且并不总是能够得到很好地回答的。例如，人类的基因顺序问题（见第 2 章）会导致获得与这些基因相关的密码有关的蛋白质里的氨基酸的顺序的信息。计算机技术就可以预言蛋白质的三维结构，也就是说蛋白质在三维空间里是如何蜷曲的（见第 5 章）。但是，我们从结构就能得知蛋白质基于化学性质的生物功能吗？也许能，但是这仅仅在我们学习了某些更基本的化学之后才行。

好在同一类化学物质具有相似的性质。例如，第 1 章和第 6 章分别提到的二甲醚和二乙醚。二甲醚中的氧原子连接着两个一碳基团，二乙醚的氧上连接的是两个二碳基团。作为一级近似而言，两种醚的化学性质是相似的，其他的醚，氧上连着其他碳原子基团，性质也会相似。

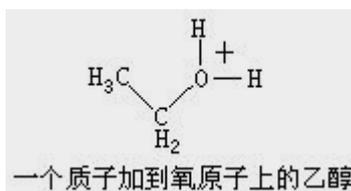


下面给出的是乙醇和甲醇的结构式。它们有相似的却不同于醚的性质。在醇类分子中，有一个连接一个氢原子、一个碳原子的氧原子。



对于同一类化学物质，既有相似性，又有差异性。经验告诉我们在化学上乙基和甲基是不同的。用现代化的反应历程计算机模拟，人们有时可以依据分子的几何形状的细节说明这种类型的差异性。

电子是另一种引起同族化合物之间的差异的原因。例如，在第6章将乙醇转化为二乙醚的描述中，曾给出了其中的一个反应步骤是，一个质子加到了氧原子上，从而使乙醇分子带一个正电荷。



如若碳的基团连的不是氢原子而是其他原子（例如氟原子），将使临近的正电荷不稳定，使得在OH基上加一个质子困难得多。这种带有一个氟原子的醇起反应变成醚的速度就要慢得多。

为了使这种应效的意义明确，对获知化学反应的历程就具有决定性意义了。例如，为了理解为什么氟原子会使反应变得更难进行（更慢），我们就应该知道正电荷是加在氧原子上的。这就引出了下面一个问题。

8.3 化学家如何测定化学反应的历程？

研究的方法取决于反应的物种有多大，有多复杂。最简单的例子是一个氢原子在空间飞行，碰上一个氯分子。氯分子里两个氯原子是连接在一起的。碰撞的结果是生成了氯化氢分子，其中氢原子和氯原子之间形成了一个化学键，同时，另一个氯原子从原来的分子中飞离出去（图8.3）。

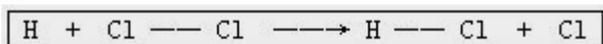


图8.3

一个氢原子和一个氯分子发生碰撞，生成一个氯化氢分子和一个氯原子，氢原子从哪一个方向接近氯分子最好呢？反应后哪里能量最高呢？

在这个反应里，有如下几个问题需要解决：（1）为发生反应，氢原子是否必须跟氯分子直接碰撞？（2）如果是，从哪个方向碰撞最好？是否只与一个氯原子碰撞，朝氯分子的尾部撞过去，或者为将 Cl-Cl 键撞断，倒不如朝氯分子的中心撞过去？（3）为发生反应，需要多激烈的碰撞（多高能量）？（4）反应的产物具有一定的额外能量。如何得知它的能量？是否可以从撞出去的氯原子的飞行速度估算产物的能量？或者可以从新形成的 H-Cl 的振动得知？

用于研究这类问题的方法十分接近物理学。物理化学家在一个抽真空的巨室中用原子或者分子的射流对准原子或分子，也许还用激光作为光源。这个方法的前驱者是 1986 年获得诺贝尔化学奖的 Dudley Herschbach, 李远哲和 John Polanyi。在进行这些研究时，原子或分子碰撞的角度得以控制，测定了产物飞离的角度和能量。因而可以得到回答上述问题的直接证据。

化学家们在更大的尺度上研究了 Cl₂ 和甲烷 (CH₄) 的反应。反应生成 H-Cl 分子和氯代甲烷分子，后者有新形成的 C-Cl 键 (图 8.4)。这种实验中起决定性的是所谓受控试验，即化学家每次改变一个反应条件重复地进行实验，借以发现哪一次试验是重要的。例如图 8.4 的反应是有利的，产物比起始物更稳定 (起始物是在黑暗中简单混合的氯气和甲烷气体。当可见光照射到混合物上时，发生了形成 H-Cl 和氯代甲烷的快速反应。这是怎么一回事？

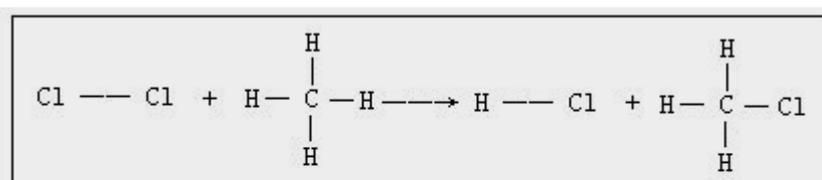


图8.4

一个氯分子和一个甲烷分子起反应形成氯化氢和氯代甲烷。当光照射到混合物上时才发生反应。这张图给出了发生反应的情景。

Cl₂ 是黄绿色气体，甲烷是无色的气体。这意味着光只会被 Cl₂ 吸收，因为可见光穿透无色物质不会有任何效应，而可见光被吸收就会显现颜色。在另一则实验中发现最有效的光的颜色正是被 Cl₂ 吸收最多的光。当氯分子获得光能就断裂成两个 Cl 原子。于是其中一个 Cl 原子取代了甲烷分子中的一个氢原子，生成 H-Cl。甲烷失去氢原子生成 CH₃- (甲基)，于是这种物种取得来自氯分子的一个氯原子得到氯代甲烷。剩下的 Cl 随后又攻击另一个甲烷分子，重复发生上述过程。

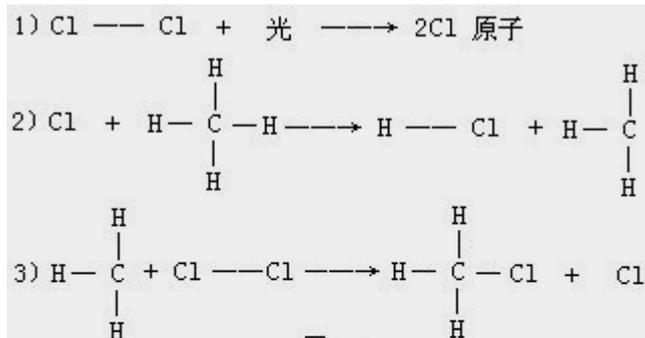


图8.5

Cl₂分子和甲烷起反应生成H—Cl和氯代甲烷的历程。
 第一步, Cl₂吸收光能并分解成2个氯原子。
 第二步, 氯原子取走甲烷分子中的一个氢原子形成H—Cl和甲基CH₃—。
 第三步, CH₃—和Cl₂反应生成氯代甲烷和新的氯原子。
 这个氯原子然后进入第二步反应, 因而第二步和第三步将一遍又一遍地重复发生, 称为链反应, 链反应的起始的第一步所需的光, 只要很少一点点。

这种反应历程叫做链反应(图8.5)。在这个反应中, 光的作用只是使反应开始, 而反应的每一步都生成一个反应物种——氯原子(Cl)或甲基(CH₃)。它们分别可以和甲烷或氯分子反应。这一反应历程的证据是, 如果没有光照, 反应就不会发生; 而为使反应发生只需要有1个光子(光的单位)就能引发成千步的链反应, 直到这个链被副反应所终止。这表明并不是每一步反应都需要光能, 而仅仅是反应开始时需要光能。

这类研究确定的反应历程具有很高的可信度, 但却不能像我们起先描述的那个简单反应那样得知其详。对于那些较大分子的反应, 证据的来源更加受到条件的影响, 更加间接。研究反应速率受浓度和反应条件的影响是研究反应历程的通用工具。然而, 这是一种间接的办法。有时得到的图象是模糊不清的。

例如, 有一种**核糖水解酶**(ribonuclease A)由124个氨基酸连接起来蜷曲成一个螺链。它和核糖核酸(RNA)结合, 并催化RNA链的断裂。虽做了大量工作, 这一反应的历程仍有争议。

一个重要的证据来自: 随RNA浓度增加时, 断链反应速率变化的研究。对于那些没有酶参与的简单反应, 反应速率随反应物浓度的增加而增加。这是因为在给定的体积中, 相互碰撞的分子越多, 反应也就越快, 然而, 对核糖水解酶参与的RNA断链反应(事实上在所有的有酶参与的反应中, 酶是催化剂), 当反应物的浓度增加时, 反应速率增加到某一个限度便不再增加了。

没有核糖水解酶参与时, 反应的速率随RNA浓度的增加而增加。而当有核糖水解酶参与时, 随着反应物浓度增大, 反应速率的增加会渐渐趋于平缓。这是因为RNA和酶的结合是反应的必要条件, 反应速率就取决于这种结合。当RNA的浓度大到把所有的酶全都结合了, 再增加RNA的浓度就不会再使反应速率增加。这时, 我们就说, 酶被RNA饱和了。这是酶与被

催化的分子结合的最早证据。近来人们分离了这种结合物，并用 X 射线技术测定了它的结构，从而证明了这一点。

另一个证据是 RNA 反应速率达到极大值时溶液不是酸性的，也不是碱性的，而是中性的。根据速率与溶液酸碱性的依赖关系，很清楚，酶以一种特别的方式使用了它的两个氨基酸。当溶液含酸时，组氨酸会从它的碱型转变成酸型。这个酶有两个组氨酸，一个是这条 124 个氨基酸的螺链上的第 12 个氨基酸，另一个是第 119 个，它们几乎处于链的两端相互对应的位置上，正是由于酶蜷曲成螺链才使它们相互靠近。溶液的中性表明，只有当这两个组氨酸中的一个呈酸型另一个呈碱型时，酶才有活性。用其他的方法，特别是 X 射线测定的酶与 RNA 的结合物的结构证实，酶的催化作用正是这两个组氨酸起的作用：一个用它的酸性基团对准 RNA 要断开的键的一侧，而另一个组氨酸用碱性基团对准这个键的另一侧，从而使 RNA 的一个键断开。因而核糖水解酶催化核糖水解机理的要点是：RNA 与酶结合，在酶的两个组氨酸的协同作用下，RNA 的一个键被断开，这两个组氨酸一个呈酸型，另一个呈碱型。

关于两个组氨酸协同使 RNA 断链的催化反应的详尽历程仍然存在不同的看法，在一般化经验和酶的证明不矛盾的情况下，至少有两种可能的反应历程。因此，这个反应历程仍然是当前一个十分重要的研究热点。我们需要知道，酶如何催化反应，进而了解生命体的化学为何如此有效。还有，如果我们了解了如此高效的反应，就有可能模拟它们，设计新的催化剂，用于制造新药。这自然是令人感兴趣的。

以上的讨论告诉我们，研究反应历程需要用多种方法配合，而研究历程的方法仍在不断发展之中

8.4 在哪里进行分子结构与性质及反应历程的研究？

大量的研究工作是在大学里完成的。研究队伍是由大学教职工和研究生组成的。通常一个大学教授领导一个研究小组，其中包括几个本科生，几个硕士生或博士生。也许还有博士后，后者是已经获得博士学位继续做研究工作的。

通常教授设计实验，并提出做什么的建议，而实际工作则是由学生们做的。教授就好比是设计师和包工头，学生是建造房子的工人。学生们一边干活一边学会如何做前沿课题的研究。后来他们自己成为教授，或者多数就业于化学工业或制药工业，用他们当学生时学到的本领来工作。

用酶做的反应历程传统上是在生物化学系进行的，但是，它也是大学化学系研究项目中与日俱增的部分。医药化学家在设计药物时充分利用了酶如何起作用的信息。

关于未来 8

在化学的这个领域里，取得进展需要创造更好的工具和更先进的理论。

结构测定

X 射线测定结构是目前最好的方法，可是在技术上是有限制的——这种方法只能用于晶体，然而并非所有物质都具有像盐或糖那样漂亮的晶体，即便固体亦然。还有，X 射线方法测定的结构细节是分子在晶体里的结构，而当分子进入溶液就可能具有完全不同的结构。一个简单的例子是，在食盐晶体里，钠离子和氯离子是互相紧挨着的，但是在水中，它们是分散着的。更叫人伤脑筋的是，蛋白质时常是灵活多变的，在晶体里它们有一定的空间结构，可是到了溶液里，它们就松散开来。因此，人们对用核磁共振（NMR）法研究溶液里的蛋白质结构并与用 X 射线法测定的晶体里的结构相互对照是十分感兴趣的。NMR 还可用于测定不能形成晶体的分子。

另一个挑战是测定那些只能得到很少量的天然产物的结构。它们的量太少了，形成的晶体太小了，无法用 x 射线法测定结构，某些天然产物的生物活性具有十分重要的意义。测定它们的结构是对未来的挑战，不过，一般而言，现有的方法对大多数结构问题是够用的。还有，某些新型显微镜正在发展之中，用它们有望直接看到单个的分子及其结构。所以这个领域的未来包括一系列与生物方面有关的、重要的新物质的发现并用先进的方法测定它们的结构。

反应历程

这个领域里比较成问题的事情仍然是工具。多数研究历程的化学家们公认，计算机终将是一种重要的工具。在将来，我们将会有一种能够精确描述任何化学反应是如何进行的理论和计算方法。计算机程序终将能够生成一种动画，像放电影一样地演示给大家看，反应过程中原子究竟如何移动，不同反应步骤的速率究竟有多大，与之相关的能量究竟有多少，等等。

眼下人们也能这样做，但尚不足信。现有的理论为了能在速度很高的计算机里运算，在可行的时间内完成测试，就不得不作简化处理，简化就难免错误。

甚至对于小分子反应，为确立反应历程的关键点也是需要做实验的。例如，产物里的氧原子是来自水分子呢？还是来自空气中的氧气分子？用氧的同位素做实验可以回答这个问题。人们用一种叫做氧—18 的特殊的氧原子来代替存在于通常水分子或者氧气分子里的氧—16。然后考察产物里的氧原子是哪一种。氧—18 是氧的同位素。它的原子核内和氧—16 一样含有相同的质子数，但却有 10 个中子，比氧—16 多 2 个。用质谱仪可

以把它们区分开来。然而，单做一个实验是不可能确认反应的全部详情的。得出反应历程的细节仍然需要加进人们的想象力和洞察力。

如果反应涉及的原子更多，进行可靠的计算机计算就变得更难了。若反应在水中或者在生物膜内发生，计算机计算还必须把酶和反应物分子的周围的原子考虑进去。因而关于 X 射线法究竟可以对探索反应机理有多大贡献的问题变得激动人心。X 射线法只是在对分子“拍照”。为什么不用 X 射线对分子“拍电影”呢？X 射线法至今仍然不够“快”，它对分子“拍一张照”要用几个小时，而化学反应在瞬息就进行完了。还有，X 射线法只能用于晶体的研究。

在晶体里也能发生化学反应吗？确有许多反应是在晶体里发生的，特别是许多酶，它们不仅在溶液里，甚至在晶态仍然保持着催化活性。现在有的酶的晶体被低温冷冻，以使反应减慢，然后用 X 射线检测反应历程中出现的中间物的状态。但是这离开“拍电影”还相差老远老远。不过，它对未来的发展还是提供了前景。

现在已经有一些很快速的物理方法能够用来考察在极短时间里发生的化学反应。造出一架仪器来对分子“拍电影”的梦想看来终将成为现实。现代激光技术用激光脉冲来触发一个化学反应，然后在一个飞秒 (fs) 左右的时间内 ($1\text{fs}=1\times 10^{-15}\text{s}$) 再发出一束激光来得到反应中间物的谱图 (图 8.6)。用这种技术可以“看见”简单的反应过程。将来，我们可能把这种技术应用到更复杂的反应上，包括酶的催化反应。



图 8.6
图中的火焰是化学反应造成的。图中有两束激光，可用于测定火焰内存在什么分子，由此可知反应的细节。这类研究已经用于发问煤油内燃机，使之产生较少的黑烟。

(吴国庆

译)

跋

我试图通过这本书向读者介绍化学的广阔领域及其重要性。和其他科学家一样，化学家探索自然界并试图了解它。可是化学家还要扩大这个世界，这就是要创造新的化学物质和发现新的化学反应。

现在有许多重要问题正在等待回答，有许多实用的目标允许化学家对人类幸福作出更多贡献。有志于化学生涯的学生们可以选择：研制新药，或对人类健康的其他贡献，设计有重要用途的新材料，帮助改善环境，协助推进计算机革命，协助阐明生命的基本化学，或对化学本身基本理论的认识。

现正面临挑战。我希望有些读者能被激起参与挑战的热情，为这个中心的、实用的、创造性的科学作出自己的贡献。