

## 十六、无机化学学科发展趋势

50年代以来,由于有机化学、物理化学、生物化学等化学分支学科对无机化学的渗透,大大地拓宽了无机化学的研究内容。新型化合物如夹心化合物、笼状、簇状、穴状化合物等层出不穷,为很多无机化学边缘学科的产生和发展提供了很好的基础。根据国际上最新的进展和我国的具体情况,当前无机化学的五个主要学科分支是:元素无机化学、固体无机化学、配位化学、生物无机化学、物理无机化学。

### (一) 元素无机化学

各种元素及其化合物的化学合成,反应,性质及其应用的研究是无机化学最基础的工作。各国在元素无机化学研究方面,一般根据本国的天然资源,经济实力,工农业生产的必需和尖端科技的要求等具体情况有所选择和侧重。我国在元素无机化学研究中的重点自应放在我国资源丰富的钨、钼、铌、钽、锶、钡、镉、汞等元素和储量名列世界前茅的稀土元素和分散元素及盐湖资源化学等方面。

前过渡元素的多酸化学是丰产元素化学传统的研究领域。近年来由于杂多酸在催化,生物,离子交换及其他新材料方面的应用,已旧貌换新颜,成为当前热门领域之一。钨、钼、钒和硫等元素的配位化学与固氮酶活性中心模型和催化利用密切相关。主族元素金属有机化合物花样繁多,它们作为材料前体物正处于发展阶段。稀土元素固体化学主攻方向是研究在激光、发光、高密度存储、永磁、能源和传感等有广泛应用前景的领域。分散元素化学的发展较慢,主要集中在具有特异性的合金及无机盐、金属有机等化合物的合成、性质、状态、结构及应用工作上。在我国丰产元素自然资源中,伴生矿和低品位矿的选矿和冶炼都比较困难,因而开展矿物冶炼,萃取、分离和综合利用的理论和应用研究仍是我国科技工作者应特别重视的工作。丰产元素的多核配合物和金属有机化合物仍然是该领域中长盛不衰的研究方向。盐湖化学应加强盐湖溶液化学的基础研究,同时运用太阳能和其他高新技术进行盐湖的综合利用。应开展盐类分离、提纯、加工和高产值化过程中的化学问题研究。

### (二) 固体无机化学

固体无机化学是无机合成化学和固体物理及其技术相结合的一个新兴领域。80年代以来,高温陶瓷、半导体、超导体、快离子导体、低维光电材料、磁性材料和发光材料等有实用意义的合成固体材料几乎都是“无机的”,令人目不暇接。1985年美国发表的《化学中的机会》一书将“新的固体”放在一个十分突出的位置。固体无机化学当前的发展趋势主要表现在两个方面:

首先是新型固体化合物的设计和合成。化学家的贡献有其自身的特点,因为化学家掌握精湛的化学反应技巧以及对于物质结构和成键复杂性的深刻理解,在寻找和开发新的材料方面,可以进行分子设计和剪裁。由此无机化学家可以根据材料的分子工程学原理,提供更多新的具有预期形态或指定结构和功能的前体物、材料或器件。研究各类固态化合物,特别是具有非正常

价态离子，非正常键合方式，非化学整比的新化合物以及新的智能材料，并研究其空间结构和物理化学性质。开展无机固体材料的价键理论研究，能带结构，晶体和非晶体结构，缺陷，固相反应动力学和机理以及固体材料中原子、电子和声子运动规律等方面的工作，对深入的研究更具有重要的指导作用。

其次是新的化学和物理制备方法。可以运用新的化学反应步骤，在特殊条件下（超高温、超低温、超高压、强超声、辐射、等离子体、强激光、超高真空及厌氧无水等），或者在非常缓和的条件下（如通过溶胶—凝胶过程制备高温陶瓷），合成出新的化合物，并发展成为功能材料和器件。由此制备一系列具有特定形态，特殊结构以及特殊要求的块材和复合材料。

### （三）配位化学

自从 1892 年维尔纳 (A. Werner) 创立配位化学以来，配位化学始终处于无机化学研究的主流。据统计，新近无机化学杂志中有 70% 的论文与配位化学有关。配体和金属之间以配位化学键形式相联结为特点的金属配位化学以其花样繁多的价键形式和空间结构在化学键理论的发展中起着重要作用。又以其特殊性能而使其在生产实践和新技术发展中获得重要应用。它和物理化学、有机化学、生物化学、固体物理和环境科学相互渗透，成为众多学科的交叉点，引起化学家的深切关注。

零价和低价金属有机化学中含主族元素的 MOCVD 源及制备具有特殊结构和性能的茂基和羰基化合物的合成与性质研究等都非常引人注目；原子簇化学的发展则集中在催化和生物模拟等方面。近期发展迅速的功能性簇合物、碳簇合物等课题是国际上最活跃的前沿课题。功能配合物化学已经成为无机化学的一个新方向。目前主要沿着光、电、磁等功能配合物的合成及应用开展研究。骨架上含有 O, N, P, S, As 等配位原子的大环配合物（包括各种冠醚、穴醚、球醚和卟啉类），主客体复合物与分子识别等仍是当前十分活跃的研究领域。通过分子组装技术，LB 膜技术和其他近代技术进行分子有序体系组装，合成新型电荷转移配合物，在分子水平上实现模拟生物过程制造电子器件，配位光化学和电化学中激发态和表面态电子传递，能量转移和微多相体系光化学研究也非常活跃。与上述领域密切相关的超分子化学被认为是今后配位化学中最激动人心的研究领域。

### （四）生物无机化学

生物无机化学是从 60 年代逐渐兴起的无机化学和生物学交界的领域。研究金属离子和生物分子结合和反应的性质及机理不仅加速了对生命现象的了解，而且对于生物技术的发展有着重要作用。

在电子传递、金属离子与蛋白质或 DNA 的相互作用和生物矿化等方面显示了对基本的生物无机反应进行共性研究的重要性。研究这些基本反应时的指导思想应该着重大分子配体与小分子配体的差异、生物反应介质与化学反应介质的差异。生命过程的核心问题之一是能量转换（如呼吸和光合作用），而能量转换的中心过程是电子传递，从而生物电子传递成为近年来生物无机化学研究的热门课题。金属离子及配合物与细胞的相互作用是金属的摄入、

转运、分布以及它们表现的生物效应的化学基础。研究金属离子与细胞的相互作用显然是解释这些生物效应的分子机理所必需的。但过去只注意到研究金属离子分离出的某种特定细胞组分之间的反应，忽视生物体系是一复杂体系。金属蛋白（包括金属酶）是生物无机化学的主要研究对象。人体必需的金属元素绝大多数与金属蛋白有关。金属离子使它们具有各种生物活性，推动、调节、控制各种生命过程。在生物无机化学中应继续采取模拟物或天然酶和金属蛋白方法进行研究。

微量元素与疾病发生、植物生长等密切相关。应该根据实际情况，首先研究与国民经济和人民健康关系最大的一些微量元素。硒的生物无机化学的发展是建立在发现硒是一种有抗氧化功能的必需元素的基础之上的。对稀土农用增产的机理和对顺铂类抗癌配合物的作用机理的研究都成为生物无机的研究热点，并推动了生物无机化学的发展。

### （五）物理无机化学

无机化学进入现代化的一个重要标志是广泛应用物理的理论和方法指导无机化学合成，并对合成物的结构、性能和反应等进行表征。这就形成了物理无机化学这一新的重要领域。

电子传递（转移）过程，分子之间原子（基团）转移或交换过程，分子内原子或基团的变动方式以及催化作用，光化学反应等的动力学和机理研究目前最受重视。结构研究在无机化学中日趋重要，其中包括研究各种类型稳态分子的几何结构、电子结构及其性能与其结构的联系。分子瞬态、动态、激发态的研究则通常是与某种过程的机理研究紧密结合的。具有特殊结构的配合物，固体无机功能材料等的结构与性能的研究是当前十分活跃的领域。

70年代以来，计算能力的迅速提高，使得人们能够用量子力学方法定量研究比较复杂的模型体系中的微观粒子运动问题。簇合物分子的稳定性，含重元素化合物中相对论效应对化学成键的作用。f轨道是否参与成键，结构“异常”或有张力的分子的电子结构和成键等问题是人们感兴趣的研究课题。除了极简单的反应过程以外，直接用仪器观察反应过程或途径仍然是非常困难的。而量子化学理论和计算方法的发展，使得有可能提供反应途径的信息。这类研究，近年有持续发展的趋势。谱学方法、模式识别方法用于新材料的合成、预报等也受到极大的重视。