

* 科学家 *

化学图论领域中的中国学派

——记理论化学家江元生*

姚天扬 王国雄

(南京大学化学系 南京 210008)

关键词 化学, 图论, 中国学派

1 雏鹰展翅

1948年,年方17岁的江元生考入了广州中山大学。由于父母早逝,又逢连年战乱,艰辛的生活磨炼了他日后坚韧不拔的毅力。对社会上种种腐朽落后现象的憎恶激励着他发奋图强,立志献身于祖国的教育和科学事业。为了使将来的事业有坚实的基础,他毅然重新考入了武汉大学化学系。1953年以优异的成绩毕业,被推荐到东北人民大学(现吉林大学)在理论化学家唐敖庆教授指导下当研究生。在这一时期,他如饥似渴地学习,扎实地掌握了广博的科学知识,增强了独立进行科研的能力。他心中铭记着一句话:“时间是个常数”,以此来勉励自己全部身心投入到学习中去。1956年江元生研究生毕业并留校任教。

江元生在步入科研工作的最初岁月里,主要是为导师指定的课题进行大量的数学计算。在不断的科研实践中,他逐渐认识到理论研究是一种复杂的综合性劳动,包括事先查阅和分析文献,然后提出方案,再推理计算和总结评论等众多的环节,而要成为一个真正能独立工作的研究人员,就必须具备做好上述各个环节的工作能力,而不应满足于只是某个环节的分担者。倔强而自信的他经过努力奋斗终于走上了独立完成科研工作的道路。

2 渐露头角

江元生的研究思想日趋成熟,他根据工作需要踏入了高分子化学的领域,利用高能辐射使高聚物交联改性的工作是当时的热门课题。为了解释辐照剂量与高聚物的性能变化的关系,有必要对交联过程进行表征。当时国外虽然已提出了一个近似的公式,但理论推导过于粗糙,而国内同类研究工作尽管有着严格的数学推导,但其理论基础和结论隐含着疑点。江元生在广泛查阅文献的基础上,看到了要选定一条基础牢固的科研思路来进行工作,必须逾越一道让许多人望而却步的数学难关。但江元生认识到只有克服了困难,才能获得超出前人的成果来。于是经过两年日夜不停的苦心钻研,终于推导出一个严格的数学公式,为表征交联程度提供了可靠的理论依据。论文发表后获得了专家的好评。在相近的时间里,国外另一学者用不同的方法也得出了同一研究结果。江元生这项成果的创造性价值得到了国内外同行的认可,成为开辟和

* 收稿日期:1995年10月9日

推动国内同类研究的先驱。1978年,这项工作获得了全国科学大会奖。

首项科研成就使江元生信心倍增,独立完成研究任务的喜悦使他更想在事业上自立,科研上更能有所建树。3年困难时期后的恢复阶段,教育部在吉林大学举办“物质结构讨论班”,共有8个学员的讨论班上江元生担任了副班长。为了使讨论班办得好,他主动承担了许多杂务。讨论班学员中大多已是副教授,而他只是一名讲师,但他仍然凭着自己雄厚的业务实力信心百倍地去迎接种种挑战。讨论班进入第2年,开始撰写《配位场理论方法》一书。江元生在解决初稿中出现的疑难问题时,发现了问题的症结所在,他经过仔细推导,寻找出配位场理论中所需要的点群耦合系数。这一成果为撰写该书提供了丰富的原始材料,构成了第3章内容的基础。在这本专著出版之前,他和另一位学员担负起了改写补充和整理的工作,并进行了许多计算和核对,为长达20多万字的专著的顺利出版奠定了基础。这项成果获1980年国家自然科学奖一等奖。

3 日臻成熟

“文化大革命”中断了江元生的科研工作达七八年之久。形势稍有好转,他便迅速投入到他所热爱的基础理论研究之中。历经劫难之后,他更加珍惜分分秒秒。其时,他正处于盛年时期,精力充沛,思想敏锐,经常夜以继日地工作。经过在量子化学学科领域内的长期实践,他深刻地感觉到在简单分子轨道理论的计算过程中,似乎存在着某种必然的“看图识字”的规则。于是,经历了两年探索的江元生和同事们,终于实现了用图形推理将简单分子轨道的基础内容概括成3条定理的形式,该定理意义直观,应用简便。论文的发表对当时的国内科教界影响较大,国外文献也曾多次引用和评论。通过这项工作,江元生意识到了科学研究的期限性和长期性,只有通过长期的积累和不断的思索,才能获得新的科研成果。

1978年以后社会的稳定为他提供了良好的条件来实现他的抱负和理想。在以后的岁月里,他始终坚持亲自查文献、提方案、做计算、并指导研究生工作,将分子轨道图形理论进一步发展到更高的阶段。他借助于代数图论揭示了化学中分子图谱之间的内在联系,从而提供了寻找同谱分子的一套完整的系统的新方法。他对同谱树的研究新结果,突破了仅有两个这类实例的文献记载,大大丰富和扩大了人们的视野,促使国外同行联合起来,设计出了计算机程序,从而找全了含16个原子以下的这类同谱分子。他的部分同谱分子论文受到国外著名学者的高度赞赏,称“在许多论文中,这是令人眷恋的一篇。”“这些课题的重要性超出了仅仅希望这些研究将逐步推动化学中重要概念发展的范畴,它还具有很强的美学吸引力。”“有一天,这些方法可能提供化学新见解的基础。”另一些学者在评论这些成果时,称他及研究集体为“中国学派”。这表明了他所主持的这项工作和完成的开创性研究成果在国际学术界有一定的影响。

江元生在进入理论化学的领域后,努力将自己的科研和化学问题联系在一起。在化学图论获得成就的同时,他又尝试用图论方法去研究有机化合物的芳香性和反应活性的规律。他独具匠心地在芳香性规律中以5参数公式代替了传统的8参数公式,不仅使计算简化,而且意义更确切,受到了国际同行的重视,论文不断地被引用和评论,被称为“江-唐-霍夫曼(Hoffmann)”方案。1988年美国学者克莱因(Klein)教授等在《物理和理论化学研究》杂志中,以“JTH(江、唐、霍夫曼的缩写)近似方案的分析”为标题,用了9页篇幅专门分析评论他们的论文,在指出JTH方案所取得的成就的同时,赞赏地说“JTH得到了一种具有明显优点的展开”。这些研究成果为化学提供了一种简单的理论模式,有着广阔的应用前景。分子轨道图形理论的系列成果

在 1987 年获得了国家自然科学奖一等奖。

江元生是国内最早开展计算量子化学的学者之一。他关于簇形化合物方面发表的论文,被国外学者科尔顿(Colton)收集评论,认定为具有“普遍性结果”。他用分子观点去研究固体能带,与著名学者霍夫曼不约而同,霍夫曼看了他们的论文后,写信给他,热情而又自豪地声称“英雄所见略同”。

4 硕果累累

江元生在理论化学领域中的开拓性研究和丰硕的成果受到国内外同行的重视和好评。他已发表学术论文 100 篇,专著 2 部及译著 5 本(合作),5 次获国家及部委奖。自 1978 年以来,连续担任了中国化学会第 20 届、21 届和 22 届理事,23 届常务理事。还担任《化学学报》等 5 家学术刊物的编委。1984 年人事部授予他“有突出贡献中青年专家”的称号。此外,他还是 6 届全国政协委员。80 年代以来,他先后 11 次在国际学术会议上被特邀作报告,并在美、英、日、南、加等国讲学访问。他于 1983—1984 年期间以交换学者的身份在美国康奈尔大学与诺贝尔化学奖获得者霍夫曼教授进行合作研究,成绩显著。1991 年,江元生当选为中国科学院院士。

在化学研究领域,分子结构与性能关系是一个基本问题,理论化学家期望根据理论方法和实验现象的结合,推演和发掘这些关系。在研究思想和研究方法上,江元生注重兼顾直观的抽象,总结与推理,定性与定量几种关系来获得规律性的结果。这使得他的高水平研究能够更好地为化学家所理解和吸收,其成果也容易被推广和应用。在这方面,他是一位努力将理论研究与化学实际紧密联系在一起的理论化学家。

5 品德高尚

江元生对科学事业有着执著追求,将自己的大半生献给了它。除此之外,他还时刻注意个人的品德修养。他根据切身体验,深感献身于科学的人应具备以下的品格:诚实,勤奋和不屈不挠的精神,并身体力行。他对在科学中弄虚作假和投机取巧的行为深恶痛绝,并力诫自己的学生避免染上这种恶习。他严谨治学,为人正直,力争以自己的模范身教影响学生和同事。他指导过 6 名博士生和 20 名硕士生,还满腔热情地给大学生、研究生讲基础课和编写教材。霍夫曼对江元生曾有过这么一段评语:“江博士有着极好的品格,以一种文雅和富有进取心的风格去探索自然界的奥秘,他是多么友善和杰出的人物。”这位著名外国学者对江元生的这种评价如实地反映了他的素质和他在学术界的影响。在回顾数十年科研教学生涯时,江元生满怀激情地谈起他的启蒙老师们,感谢他们对他的培养和指导,他获得今天这些成就是和他们的关心和帮助分不开的。1992 年,江元生到南京大学工作。他认为过去的都已过去,他虽年过花甲,但仍精力充沛,决心以此为新起点,计划在未来的岁月中再为祖国的教育科学尽心尽力,培养出更多的化学人才,为理论化学研究更上一层楼做出新的贡献。