

化学学科发展现状与前景展望

中国化学会为贯彻落实全国科技大会和《国家中长期科学和技术发展规划纲要(2006-2020)》精神,促进化学学科发展和原始创新能力的提升,提高化学科技自主创新能力,按照科协学会部下达的“开展学科发展研究”部署,中国化学会组织了对化学学科的发展研究。在学会所属各学科委员会和专业委员会组织的专家对化学学科 2005-006 年取得的进展进行调研的基础上,撰写完成了《化学学科发展报告(2006)》。本刊转载全文供会员阅读。

一、引言

(一) 化学是承上启下的中心科学

在进入了 21 世纪的今天,人们在谈论科学的发展时指出,“这将是一个生命科学和信息科学的世纪”,那么究竟“化学还有什么用呢?”。诚如诺贝尔化学奖获得者 H. W. Kroto 在回答这个问题时所述,“正是因为 21 世纪是生命科学和信息科学的世纪,所以化学才更为重要”,这是因为化学是一门承上启下、渗透于各种新兴交叉学科的中心科学。

化学作为一门研究物质相互作用的科学,其目标是认识物质的结构-性能关系,开发新的反应和合成技术,提供具有各种功能的材料,这就决定了化学的“中心科学”地位,其在人类认识世界、改造世界中的作用是无可替代的。试想,如果没有合成材料和技术的发展,提供不了高性能的材料,人类探索宇宙奥秘的各种方案何以实施?我们的“神六”又何以能遨游苍穹呢?又比如,没有半导体芯片和光刻技术的不断发展,能有今天的计算机吗?同样,没有化学分析、分离技术的发展,今天的基因组序列解密恐怕也只能是一个愿望而已。

(二) 化学是和社会和经济发展迫切需要的实用科学

化学已经渗透到国民经济的发展和人民物质文化生活的改善和高的几乎所有方面,无论是高新尖端技术,还是国民经济发展的各种支柱和支撑产业,还是人们的衣食住行、生活休闲、医疗保健,无不都与化学科学的发展密切相关。科学技术是第一生产力,一项重大的科学发明会彻底改变人类的生活方式,推动社会和经济的迅猛发展。在化学科学的发展进程中,这样的例子比比皆是。

被誉为 20 世纪最重大的发明之一的高压催化合成氨技术,使粮食生产产生了革命性变革,就是一个极其典型的例子。催化科学与技术是化学的重要组成部分,对国民经济的发展越来越起着举足轻重的作用,“据统计,我国与催化相关的产品产值超过国民生产总值的 20%。”。

高分子科学的发展给人类社会带来的影响是大家最容易直接感受得到的。从人们每天接触到的各类塑料、合成纤维到越来越多运用于各类建筑的轻型结构材料,以至各种尖端技术中使用的特种材料,无不可以看到化学的贡献。这里不妨提到一个最近的例子,正是由于新型高分子薄膜材料及其多层膜形成技术的研发成功,才使得举世称誉的“水立方”游泳馆的设计得以实现,为 2008 年北京奥运会添了彩。

为了提供具有各种功能的材料,合成化学研究无可争辩地成为化学研究的核心内容之一。每年有几十万种的新化合物产生,而且正以几何级数的比例在增长;组合化学等新分支学科的发展必将为材料科学研究、新药开发等诸多领域带来更加繁花似锦的局面。纳米科学与技

术的发展已经而且必将对科学的发展和经济建设作出巨大的贡献。

(三) 化学学科的挑战和机遇

党中央顺应民心，尊重科学，及时提出在全面建设小康社会和社会主义和谐社会的伟大进程中，必须始终坚持以人为本的科学发展观，实现可持续发展的战略方针和宏伟目标。这一伟大号召既为化学科学的发展指明了方向，提出了新的挑战，更为化学科学的发展提供了更大的机遇和用武之地。

比如，我国是一个地大、人口众多而资源相对匮乏的大国，可再生资源特别是新型洁净能源的开发、绿色经济和循环经济的实施、建设节约型社会将是必由之路，对此，化学科学必将起到主导作用。

又如，环境问题在我国日显突出。长期以来，不少人错误地认为，化学和化工就是污染源。毋庸置疑，确实不少化学和化工产品在生产过程中会带来污染，但是，同样毫无疑问的是，许多环境问题决非源于化学化工的发展。更为重要的是，对污染问题的分析、监测和治理正是化学家的任务，“变废为宝、综合利用”更是化学家们的专长。

我国的化学工作者深明自己肩负的重任，决心在建设创新型国家的伟大进程中，做出无愧于时代要求的工作，为把我国建设成名符其实的化学大国和化学强国而不懈努力。

二、从数字看我国化学学科的发展

化学既是一门传统的又是一门不断发展、扩展的基础科学，近年来，新的交叉分支不断涌现。为了更直观地说明我国化学科学的研究发展，本报告力图用一系列的图表和数据统计来阐述。

(一) 我国的论文发表数量快速增长

衡量一门基础科学的发展，科技论文的发表情况是一个极其重要的指标。图 1 示出了 1980~2005 年期间被 CAplus 收录的中国科学家发表的化学学科和与化学学科相关的论文数逐年增长的统计，需要说明的是，图中所列数据没有包括与外国科学家合作发表的论文。

据截至 2006 年 10 月 25 日对美国《化学文摘》(Chemical Abstract, CA)所收录的化学学科和与化学学科相关的论文的最新统计，自 2001 年起我国学者被收录在 CA 的论文、专著和专利总数一直仅次于美国和日本而跃居世界第 3 位，2005 年更达到 168864 条，占 CA 总收录的 128 万余条的 13.19%(表 1)，表明我国已经成为名副其实的化学论文发表大国，而且，特别值得指出的是，2005 年的收录条数为 2001 年的 212.27%，增长速度远远快于美(111.60%)、日(102.34%)和其它发达国家，充分说明我国化学科学研究在落实建设创新型国家的战略方针方面已经取得了明显效果。

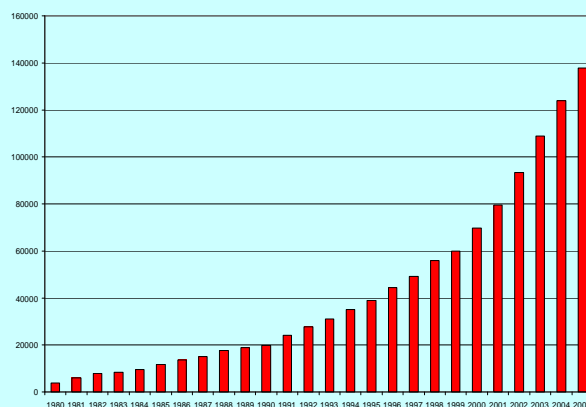


图 1 CAplus 收录的中国科学家 1980 年以来发表的论文统计

表 1 2001~2005 年 CA 收录的世界主要国家发表的论文统计

国家	2001 年	2002 年	2003 年	2004 年	2005 年		
					收录数	比例/%*	增长率/%**
美国	207409	215067	229015	235405	231486	18.08%	111.60
日本	211607	215157	218366	220660	216550	16.91%	102.34
中国	76315	90466	103870	122969	168864	13.19%	212.27
德国	62280	62037	67695	67415	66552	5.20%	106.86
韩国	33528	34814	39524	47957	52116	4.07%	155.44
英国	38808	37578	37613	38250	36662	2.86%	94.47
俄罗斯	35732	36022	38106	36310	36232	2.83%	101.40
法国	31097	29837	30849	31020	30792	2.41%	99.02
印度	16086	17245	19097	21600	22655	1.77%	140.84

*指占当年收录总条目数的比例； **相对于 2001 年的比例

CAplus 对美、日、中、韩四国 1980~2005 年期间的收录统计也显示了同样的趋势(图 2) (图 中所列的有关中国的数据中没有包括与外国科学家合作取得的结果)。

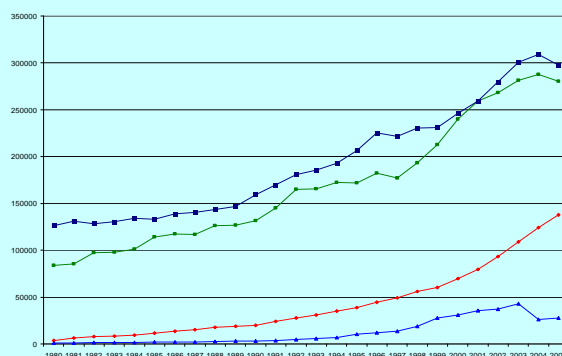


图 2 CAplus 对美、日、中、韩四国 1980~2005 年的收录统计

图中自上至下 4 条曲线依次为美国、日本、中国和韩国的收录统计

据 2006 年 10 月 27 日中国科学技术信息研究所发布的统计, 化学学科在 2002 至 2005 年期间, 各年度发表的国际化学论文数分别为 9788、12637、17096 和 27977 篇, 自 2003 年起一直踞国内各学科的第一位, 其中 2005 年占我国总共发表的国际论文的 18.24%。

值得指出的是, 我国科学工作者所发表的大批学术论文是以中文发表在国内杂志上的,

因此，上述数据并没有完全反映我国的论文发表数量。其实，近年来这类论文的数量增长速度也是非常快的，SciFinder 检索到的以中文发表的条目数(图 3)以及以中文发表的条目所占的比例(4.2%)已经是除英文外的第 2 位 (图 4)。

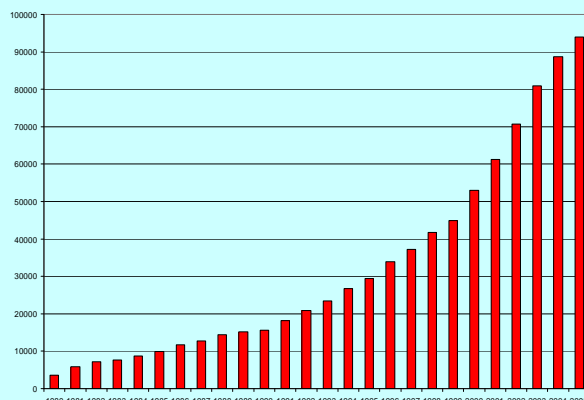


图 3 CPlus 中收录的中文条目统计

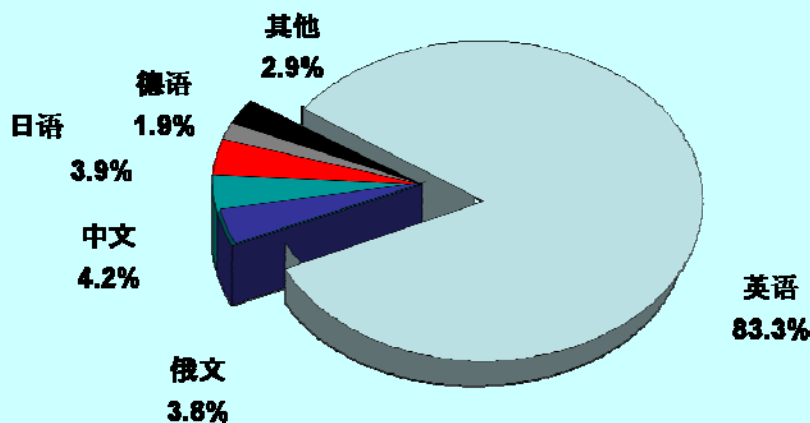


图 4 SciFinder 所检索到的条目的语种分布统计

当然，必须说明的是，由于各统计单位(如 CPlus 和 SCI 等)在统计时取样的门槛不同，因此所公布的绝对数字并不相同，但是其发展趋势则是完全一致的。

(二)我国的论文质量在不断提高

除了发表论文的数量之外，发表的论文质量更是反映一个国家的学术水平的重要标尺。近年来，国家对科技发展给予了极大关注，特别是强调建成一个创新型国家的宏伟目标，更是大大激励了化学工作者的积极性和创造性，取得了一批在国际上产生重要影响的科研成果，在国际顶级学术刊物上发表了一大批高水平的论文，表 2 列出了 2001 年以来国内学者在 4 种著名化学期刊上发表的论文数统计充分证实了这一点。

表 2 2001 年以来国内学者在 4 种著名化学期刊上发表的论文数统计

年份	J Am Chem Soc	Angew. Chem.Int Ed	Chem.Rev.	Acc.Chem.Res.
2001	30	24	2	3
2002	35	35	2	2
2003	81	54	2	7
2004	83	63	1	1
2005	120	75	6	4
2006*	97	84	2	5

*至 2006 年 10 月 25 日

另外,不少论文被列入了“研究集锦(Research Highlight)”、“专栏论文(Feature Article)”、“中心论文(Heart Cut)”、“热点论文(Hot paper)”等栏目,被专门予以介绍和评述,不少论文在发表之后的点击率被评为“前十(Top Ten)/前三(Top Three)”。这在前几年是不多见的,充分反映了近年来我国化学基础研究水平的明显提高,国际影响明显提升。比如,高分子科学方面,截至10月6日,2006年我国学者已经在该学科的14种最著名期刊上发表了论文1360篇,其中在最具有影响的 *Macromolecules*、*Macromol.Rapid.Commun.*和 *Biomacromolecules* 上分别发表了97、70和30篇,占各刊同期发表的论文数的9.7%、34.8%和30%,其它11种刊物上我国学者发表的论文数也均占同期各刊发表的论文总数的13.8%~38.6%,更值得提到的是,在 *Macromolecules* 所发表论文点击率前20名的论文中,我国内地学者的论文有5篇。这些统计数据清楚地表明,我国的高分子科学的基础研究已经在国际上占有举足轻重的地位。又如,催化学科,2001~2002年我国学者在国际催化学科的著名刊物 *Journal of Catalysis* 上发表论文33篇,占该刊同期总论文数的4.6%;2003~2004年增至50篇,约占6.3%;2005~2006年9月进一步增至61篇,占9.3%。还如,分析学科,从2003~2006年9月底我国内地学者在美国 *Analytical Chemistry* 上发表的论文数量依次为32、40、49和36篇。这些数据足以表明,我国在这些领域已经取得了长足的发展。

反映科技论文的质量与水平的一个重要指标是被引用情况。据2006年10月27日中国科学技术信息研究所发布的统计,化学学科在2002至2005年期间,各年度发表的论文被引用篇数分别为8317、9597、12222和18807篇,被引用总次数分别为18954、24015、29948和53459篇次,居国内各学科的第一位。以2005年的统计为例,分别占2000~2004年被SCI收录的、我国科技人员作为第一作者发表的国际论文在2005年被引用论文篇数51223篇、被引用次数133417篇次的36.72%和40.07%。表3是中国学者2000年以来被SCI所收录的化学论文数与论文被引频次的情况(论文被引频次是可能逐渐降低的,例如,由于2005年发表的文献还没来得及被引用,因而2005的被引频次就有所降低)。由表可以看出,化学学科被收录的论文数目占各学科被收录的论文数的比例略有增加,而被引用数的增长则要比论文数的增长更快,这也表明化学学科的论文质量的提高速度要稍高于其它的学科领域。

表3 2000年以来SCI所收录的化学论文数与论文被引频次的情况

年份	收录的篇数		总被引用篇次数	
	化学	占有所有学科的比例/%	化学	占有所有学科的比例/%
2000	6011	23/78	43806	26.89
2001	7222	24.41	44799	26.46
2002	8381	24.81	44136	28.95
2003	9948	24.40	37807	27.93
2004	12388	26.92	23589	30.99
2005	15912	26.81	5055	30.99

就单篇论文而言,我国不少论文的总被引频次也有大幅度增长。比如,截止2006年10月25日,近10年来发表在美国化学学会(ACS)主办的期刊上的论文总被引频次为520次的有1篇,272~200次的有7篇,180~158次的论文有4篇。这些论文都被 *Essential Science Indicators (ESI)* 评为“高被引论文(Highly cited papers)”(即:在1996年以来发表的在相应学科领域被

引频次排在前 1% 以内的论文)。

(三) 化学类学术期刊的水平明显提高

SCI 收录的我国学术期刊数目和影响因子的增长也从另一侧面反映了我国科研水平的提高。以 2000 年和 2005 年收录的期刊种类为例, 我国的科技期刊被收录数从 47 种增加到 75 种, 其中化学类期刊从 8 种增加到 19 种, 平均影响因子从 0.4093(最高是《中国科学 B》, 0.751) 提高到 0.6199(最高是 *New Carbon Materials*, 1.463)。无论从期刊种类的增加还是从影响因子的提高, 化学学科的发展都是最快的学科之一。在上述 19 种被 SCI 收录的化学期刊中有 11 种是属于中国化学会主管或主办的期刊, 由此也可以看出中国化学会在加强学术交流、推动我国化学学科发展方面所做出的努力与贡献。

(四) 研究布局符合国际发展趋势

从 SciFinder 数据库检索的数据中各学科的分布情况(图 5)可以清楚地看到, 生物化学是当今国际上最受重视的一个领域, 其论文数几乎已经占目前论文总数的 1/3。表 4 列出的我国在 2005 年发表而被 CA 收录的论文的学科分布情况与上述检索结果十分相符, 表明我国化学科学的布局是与国际发展趋势一致的。

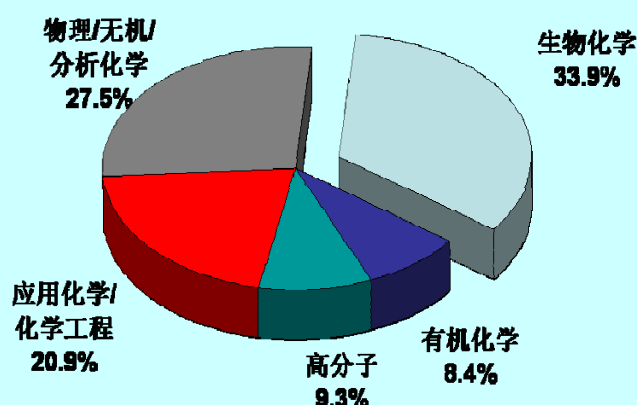


图 5 SciFinder 数据库检索的数据的学科分布统计

表 4 2005 年 CA 收录的中国学者发表的论文的学科分布

(按关键词列出前 45 位)

	关键词	收录条目数
1	哺乳类病理生物化学	9548
2	药理学	8303
3	药学	8011
4	光、电子和质谱及其它相关性质	6056
5	生物化学基因学	5800
6	有色金属与合金	5516
7	电子现象	4994
8	陶瓷	4449
9	食品与食品化学	4311
10	化石燃料、衍生物与相关产品	4112
11	废物整治和处理	4097

12	免疫化学	3802
13	植物化学	3698
14	生物化学方法	3427
15	塑料制造与加工	3385
16	黑色金属与合金	3089
17	塑料生产与使用	2784
18	药物分析	2766
19	电化学、辐射与热能技术	2763
20	水	2748
21	结晶学与液晶	2685
22	无机化学与反应	2358
23	空气污染与工业卫生	2158
24	合成高聚物化学	2143
25	哺乳类生物化学	2060
26	工业有机化学品、皮革、脂肪与蜡	2039
27	微生物、藻类、菌类生物化学	1980
28	工业无机化学品	1899
29	肥料、土壤与植物营养学	1885
30	哺乳类生物激素	1824
31	毒物学	1756
32	矿物与地质化学	1603
33	单元操作与过程	1576
34	农业化学品的生物调节	1563
35	发酵与生物工业化学	1558
36	无机分析化学	1483
37	磁现象	1479
38	表面化学与胶体	1404
39	水泥、混凝土与有关建筑材料	1400
40	涂料、油墨与有关产品	1346
41	纺织品与纤维	1320
42	核现象	1251
43	普通物理化学	1245
44	辐射化学、光化学、照相和复印程序	1183
45	苯及其衍生物和稠苯化合物	1158

2006 年国家自然科学基金委员会化学部总共资助 1148 项(含 39 项重点项目), 总经费达到 35498 万元,比 2005 年的 30061 万有了明显增长。从表 5 给出的 2004~2006 年度的申请项目的学科分布, 同样表明国内学者的选题方向完全符合国际发展趋势。

表 5 化学科学部 2004~2006 年各学科面上基金项目的受理情况统计

	2006	2005	2004
无机化学	590	505	410
有机化学	912	751	617
物理化学	843	685	556

高分子科学	585	422	401
分析化学	594	470	383
化学工程	1128	930	741
环境化学	613	518	434

(五) 研究队伍更壮大且结构日趋优化

无论从发表论文的数量还是各类基金申请数量的增加，都从一个侧面反映了我国化学研究队伍的迅速壮大。据基金委化学部的统计，申请单位由 2004 年的 419 个增加到 2005 年的 469 个，2006 年进一步增加到 539 个，比 2004 年增长了 28.64%，而且获得资助的单位数也从 178 依次增长为 207 和 220 个。由于基金的评审相当严格，而且资助受总额度限制，因此上述数据足以表明，不仅我国从事化学科学研究的队伍数量有了明显增加，而且队伍的质量也在不断提高。其中，获得 6 项或以上资助的单位数从 2004 年的 43 个单位增加到今年的 56 个单位，反映了我国重点研究单位的队伍质量得到了明显提高，表明知识创新方针正在得到很好落实。

另外，研究队伍的年青化和年龄结构日趋合理，是科学研究可持续发展的重要保证。以高分子学科在研基金项目的负责人的年龄结构统计(图 6)为例，31 至 45 岁的占将近 70%，从他们承担的课题的进展更表明，一大批富有实力的年青化学家已经担当、而且完全胜任把我国化学科学推向世界之巅的重任。十分可喜的是，图中数据表明，还有一批老同志仍然活跃在科研的第一线，一批更年青的同志也已经崭露头角，表明随着国家人才战略的各项措施的不断落实，我国的化学科研队伍的年龄结构已经逐渐符合科学发展本身的规律。完全可以相信，在国家对基础研究的高度重视下，以这样的人才梯队结构所领导的我国化学科研必将取得更为辉煌的成就。

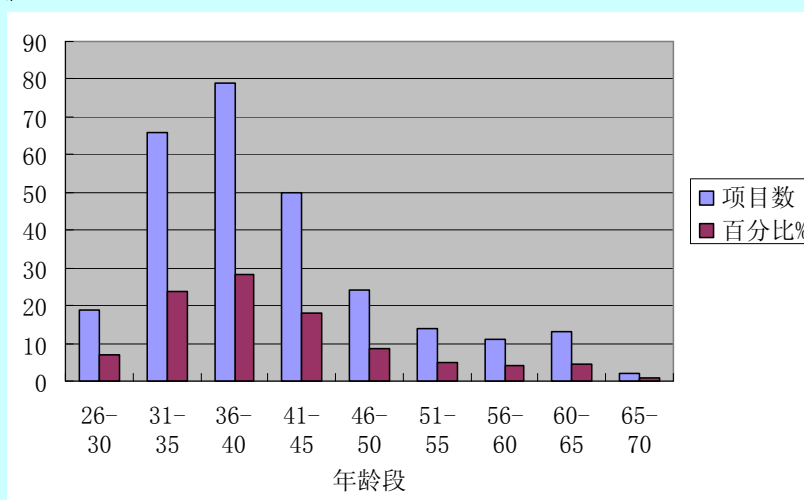


图 6 国家自然科学基金高分子学科在研项目的负责人的年龄结构统计

三、我国化学学科的研究进展

近年来，我国化学学科在基础研究和应用基础研究方面都取得了巨大的进展，这在前节的一些数字统计中已经得到了充分的反映。根据本报告所附的各专题报告提供的内容和国家

科技奖励办公室公布的资料，本节扼要介绍我国在化学领域所取得的重要研究成果。

(一)概述

如前所述，化学科学既是一门传统的基础科学，又是一门应用背景极强的实用科学，已经渗透到国民经济和社会可持续发展的每一个角落，涉及到加强综合国力和提高人民生活质量的方方面面。对于近年来我国在化学学科的基础和应用基础研究领域取得的成就，除了可以从前节的统计数据来得到充分说明之外，化学家们所获得的一系列奖励也可作为有力的佐证。在2006年初国家科学技术奖励大会上授奖的2005年度三项国家科技奖中，化学领域共获得国家自然科学奖二等奖8项(侯建国等的“单分子结构与电子态的理论和实验研究”、佟振合等的“超分子体系中的光诱导电子转移、能量传递和化学转换”、任咏华的“过渡金属炔基及硫属簇配合物的分子设计及其发光性能的研究”、陈新滋等的“新型手性配体的设计、制备及其在不对称催化反应中的应用”、江雷等的“具有特殊浸润性(超疏水/超亲水)的二元协同纳米界面材料的构筑”、徐奕德等的“甲烷直接催化脱氢转化为芳烃和氢新反应的研究”、赵进才等的“有毒难降解有机污染物光催化降解机理的研究”、徐晓白等的“典型化学污染物环境过程机制及生态效应”)，国家科学技术发明奖一等奖1项(宗保宁等的“非晶态合金催化剂和磁稳定床反应工艺的创新与集成”)、二等奖7项(孙宝国等的“重要含硫食用香料的研制”、朱玉雷等的“耦合工艺生产 γ -丁内酯和2-甲基呋喃的研究及应用”、陈芬儿等的“*d*-生物素的不对称全合成生产新技术”、徐南平等的“面向超细颗粒悬浮液固液分离的陶瓷膜设计与应用”、张涛等的“聚烯烃用高效脱氧剂的研制与工业应用”、周勇等的“生产清洁燃料的高活性加氢精制催化剂的研制及工业应用”、李佐虎等的“铬盐清洁工艺与集成技术”、马军等的“臭氧催化氧化除污染技术”)和国家科技进步奖二等奖12项(李顺鹏等的“农药残留微生物降解技术的研究与应用”、陈标华等的“异丙苯清洁生产成套技术的研发及工业应用”、陈志法等的“年产5万吨级有机硅单体生产新技术及装备的开发研究”、石亚华等的“中压加氢裂化技术(RMC)的开发与工业应用”、高正明等的“大型高效搅拌槽的研究开发及工业应用”、吴剑华等的“单管四旋静态混合管式氯醇法环氧丙烷生产技术及装备”、黄险波等的“新型阻燃热塑性树脂系列产品的开发及产业化”、余国琮等的“高效规整填料精馏塔技术及应用”、汪信等的“几种无机纳米材料的制备及应用研究”、徐振元等的“年产3000吨高质量毒死蜱技术开发与应用”、罗胜联等的“有色金属工业重金属废水重复利用综合技术研究”、李晓红等的“三峡水库淹没区固体废弃物污染治理专项技术研究”)。在2006年9月国家科技奖励办公室公示了三奖评审委员会分别评审通过的建议授奖项目，其中被建议授予国家自然科学奖一等奖1项(支志明的“金属配合物中多重键的反应性研究”)、二等奖10项(徐如人等的“开放骨架磷酸铝新结构类型的开拓”、高松等的“磁性金属配合物的设计、结构与性质”、郑兰荪等的“碳原子团簇的形成研究”、麻生明等的“金属参与的联烯化学中的选择性调控”、傅家谟等的“珠江三角洲环境中毒害研究污染物研究”、王殿勋等的“大气污染中的瞬态物种的产生、结构和反应”、张立德等的“一维纳米线及其有序阵列的制备研究”、刘维民等的“先进润滑材料制备与性能”、成会明等的“单壁和双壁碳纳米管的制备和研究”、吴德海等的“碳纳米管宏观体的研究”)，国家科学技术发明奖二等奖7项(程春生等的“创制高效杀菌剂啉菌噁唑及其产业化”、吴一弦等的“异丁烯可控阳离子聚合与丁基橡胶聚合新工艺”、彭孝军等的“大幅面数码喷墨染料及其应

用”、张宝砚等的“热致前胆甾和胆甾液晶聚合物材料及其应用”、谢有畅等的“使用单分散型氯化亚铜/分子筛吸附剂分离一氧化碳技术”、徐僖等的“固相力化学反应器及其在聚合物材料制备和加工中的应用”、李大鹏等的“超临界二氧化碳萃取中药有效成分产业化应用技术”)和国家科学技术进步奖二等奖 17 项(沈建忠等的“动物性食品中药物残留及化学污染物检测关键技术与试剂盒产业化”、沈平平等的“化学驱动提高石油采收率的基础研究与应用”、马建中等的“乙烯基聚合物鞣剂组成结构与性能相关性的研究”、罗文德等的“年产 20 万吨聚酯四釜流程工艺和装备研发暨国产化聚酯装置系列化”、王锐等的“PA6/PE 共混海岛法超细纤维及人造鹿皮的系列化产品开发和产业化”、朱美芳等的“热塑性高聚物基纳米复合功能纤维成形技术及制品开发”、龙军等的“生产满足欧 III 标准汽油组分并增产丙烯技术的研发与工业应用”、周云霞等的“高分子量抗盐聚丙烯酰胺工业化生产技术的研发与应用”、高金森等的“催化裂化汽油辅助反应器改质聚烯烃技术的开发和应用”、郑书忠等的“高浓缩倍率工业冷却水处理及智能化在线(远程)监控技术”、唐波等的“重要农药、医药中间体的绿色化工生产技术集成”、何细藕等的“开发建设 10 万吨大型裂解炉”、陈群等的“苯酚烷基化清洁催化技术及工业应用”、郝树仁等的“烃类原料蒸气转化制氢系列化催化剂及应用技术”、陈远童等的“长链二元酸的研发与工业生产”、罗和安等的“环境友好生产乙酰甲胺磷新工艺”、曲久辉等的“饮用水水质安全风险的末端控制技术与应用”)。另外,还有一大批成果获得省市、部委的奖励。在国际上,我国化学家获得了多项国际大奖,比如,北京大学化学与分子科学学院刘文剑获得了国际量子分子科学院授予的 2006 年度大奖,这是国际上对青年量子化学家的最高奖励,他还获得亚太理论与计算化学家协会颁发的 2006 年度“Pople 奖”;中国科学院高能物理研究所柴之芳获得 2005 年度国际放射分析和核化学最高奖—George von Hevesy 奖,这是发展中国家第 1 次获奖,也是自 1968 年设立该奖以来的第 28 位获奖科学家;中国科学院大连化学物理研究所李灿在 2004 年获得每 4 年评选一次、每次只奖励一位科学家的国际催化界最高奖—国际催化奖。

纵览我国化学家们所取得的成就,大体可以从以下几个方面来叙述: 1. 坚持“科学是第一生产力”的观点,突出科研必须为国民经济发展服务的宗旨,从实际中提出问题,解决问题。一大批科研项目荣获科技发明奖和科技进步奖就是这方面的突出例子。2. 坚决贯彻建设创新型国家的战略目标,重视原始创新性研究。科学发展的一个突出特点是学科交叉、融合势头十分强劲。我国化学家们及时发现和捕捉到了不断涌现的新分支交叉学科和新增长点,并且迅速安排力量,投入研究工作,从而加快了发展的步伐。这方面较突出的例子是纳米科学、分子生物学、包括分子电子学等在内的有机功能材料领域研究的进展。3. 坚持以科学发展观、可持续发展的思想统领全局,这是党中央在全面建设社会主义小康社会和和谐社会的伟大进程中的总指导方针。它对科学工作者特别是化学工作者既提出了更严格的要求,又提供了不可多得的机遇。环境化学、绿色化学的发展就是一个很好的例证。4. 十分重视和深化基础研究是提升一个国家科技水平的须臾不可忽视的关键。近年来,我国在化学的一些传统学科(无机化学、有机化学、物理化学、分析化学、高分子化学、放射化学等)的基础研究中,取得了一系列重要成果,尤以为化学界再次获得国家自然科学一等奖为代表,在国际上产生了重要影响,这不仅为我国成为科技大国,更为我国成为科技强国做出了重要贡献。

(二)为国民经济发展服务

科学技术是第一生产力。坚持技术创新是国民经济发展的柱石，大至国家，小至一个企业，无一例外。技术创新与知识创新又必须互相促进，相辅相成，对此已经被越来越多的人所理解，在实践中已经发挥了巨大的威力。

宗保宁、闵恩泽等通过将广泛应用的阮尼(Raney)镍晶态加氢催化剂的结构非晶化，成功制备了骨架化、多孔、比表面积大的镍-铝非晶态合金催化剂，极大提高了催化剂的加氢活性，并通过引入稀土元素和采用碱抽提铝技术等，解决了这种非晶态合金的热稳定性差、比表面积小的问题，同时，化学法抽铝生成的偏铝酸钠溶液又被用来合成分子筛，实现了零排放清洁生产，建成了百吨级非晶态合金催化剂工厂；通过研究磁稳定床的床层结构与磁场强度、催化剂物性、流体流速等因素之间的关系，得到了磁稳定床的操作相图，并以此调节磁场，使得床层在链式状态下操作，避免了沟流的形成和提高了液固接触。把均匀磁场和非晶态合金催化剂的磁性相结合，形成磁稳定床反应工艺，在国际上首次实现了磁稳定床和非晶态合金催化剂的集成创新和工业化，大大缩短了反应流程，根除了发烟硫酸的使用，降低了能耗和原料消耗，提高了原子利用率和产品质量，减少了废渣、废水和包括 NO_x 在内的废气的排放，取得了明显的经济效益。例如，己内酰胺是生产尼龙 6 纤维(锦纶)和尼龙 6 工程塑料的单体，是一种我国紧缺的重要化工原料。中石化巴陵分公司和石家庄化纤股份有限公司曾分别引进了一套以苯和甲苯为原料的年产己内酰胺 5 万吨的装置。在 2000 年，由于国外己内酰胺倾销等原因，这两套装置年亏损近 4 亿元。在把包括了上述新工艺在内的一系列重要创新(利用金属卟啉仿生催化环己烷氧化代替无催化剂氧化、利用钛硅分子筛催化环己酮肟化一步法原子经济合成环己酮肟代替传统的经历四步的拉西法和利用非晶态合金催化剂和磁稳定床集成的己内酰胺加氢精制工艺代替传统的以阮尼镍为催化剂的搅拌釜式工艺)应用于己内酰胺生产过程后，精制效果是传统釜式工艺的 5~10 倍，催化剂耗量降低 70%，并在上述两公司分别完成了 25 万吨/年和 24 万吨/年己内酰胺的新装置建设，使得此两公司在 2005 年全面实现扭亏增盈。此外，上述集成工艺技术还在医药中间体加氢过程和葡萄糖加氢制备山梨醇的多家企业中得到应用，并已完成了用于氢气精制脱 CO 和芳烃吸附脱硫等过程的工业试验。由于项目所作出的重要贡献，荣获了 2005 年度全国唯一的国家科技发明一等奖。

刘中民等将 SAPO-34 催化材料应用于甲醇制低碳烯烃(DMT0)的催化过程，并开发了相应的催化剂和与之配套的自主创新的成套技术，建成了目前世界上第一套万吨级甲醇制烯烃工业化装置。

中国科学院稀土化学与物理重点实验室研制出性能良好的杂化发光材料和图案化的发光薄膜。长余辉和等离子显示面板荧光粉实现了产业化，为企业创造了较大经济效益。稀土镁合金为神州 6 号飞船减重 13kg，满足了国家的重大需求。四川攀西矿高效、清洁稀土分离流程，经专家鉴定一致认为“该流程达到国际领先水平”。

中国科学院长春应用化学研究所在高分子材料的生产方面取得了一系列重要进展。继我国在世界上最早开发稀土顺丁橡胶(1962 年)并进行千吨级工业化试验(1983 年)之后，近年来，开发了高效、稳定、均相的稀土催化剂制备技术，并采用改进的“连续进料、连续陈化和绝热聚合”的生产工艺在顺丁橡胶分子量及分子量分布控制方面取得突破性进展，其聚合活性

和单体浓度明显提高，催化剂用量明显减少，提高了生产效率，生产成本降低到接近镍系顺丁橡胶的水平。稀土顺丁橡胶由于其链结构规整度最高而显著提高了轮胎的实用性能，更符合现代子午线轮胎的用胶要求，其质量已经得到国内外轮胎制造公司(如英国邓禄普、法国米其林及国内浪玛、成山、珠江等)的认可，标志着我国稀土顺丁橡胶质量达到国际先进水平。稀土三元催化剂和合成方法的专利技术已经成功用于二氧化碳共聚物的工业化生产，而且这种催化剂还能实现三元甚至四元共聚。继 2004 年与企业合作建成了世界上规模最大的、年产 3000 吨二氧化碳基塑料生产线以后，目前正在对万吨级生产线的关键技术进行攻关。聚乳酸已经完成了年产 30t 规模中试的通用 PLLA 产业化研究，产品性能基本达到了 Cargill Dow 公司产品的水平。利用具有自主知识产权的技术吹塑的淀粉薄膜，形成了制备无形状要求的淀粉泡沫缓冲包装材料的全套技术。开发的新一代聚酰亚胺“异构聚酰亚胺”的加工性能得到大幅度改善，熔体粘度降低 3 个数量级，还改进了美国的 PMR 技术，使之适合于更多聚酰亚胺树脂体系。

生物医用高分子材料大体上可分为体外使用和进入人体两类，体外使用的多用聚氯乙烯、聚丙烯和聚乙烯等，目前全国一次性医用高分子材料的生产企业已经达到 600 余家，产品的产值达到 38 亿元，占全国医疗器械总产值的 15%。全国每年消耗的聚氯乙烯约 10 万吨。在人体内使用的高分子材料，近年来发展最快的是生物可吸收或可降解的高分子，主要用途是手术缝合线、骨折内固定件、矫形器械、组织工程支架、药物控制释放载体等，其中天然来源的高分子主要有甲壳素、胶原蛋白等，合成高分子主要是乳酸类聚合物，外消旋聚乳酸和相应的松质骨固定螺钉国内已有小批量生产。

把化学成果转化为应用的例子还很多，在前面概述中提到的国家科技发明奖和国家技术进步奖获奖和建议授奖项目就都是我国化学与化工专家们长期坚持把科学研究成果转化为生产力应用于国民经济和生产实践的突出代表。

(三)重视原始创新，新兴领域呈现良好发展势头

基础研究中重视知识创新是一个首要任务。十分可喜的是，在建设创新型国家的伟大号召下，化学家们近年来取得了许多突出的成就，特别是在一些新兴研究领域更是取得了不少在国际上产生较大影响的成果。

1. 纳米科学方兴未艾

纳米科学与技术是当今最为热门的研究领域之一，几乎渗透到化学研究的各个方面。

对衬底表面和凝聚相环境中的单个分子和原子团簇的几何与电子结构进行直接观察和理论表征是纳米科技的重要基础。侯建国等发展了一套实验测量与理论模拟相结合的对单分子结构进行高分辨率表征的方法，系统地总结了高分辨 STM 图像和 STS 谱的规律；用直接成像法获得具有化学键分辨率的 C₆₀ 单分子 STM 图像；成功地确定了单个 C₆₀ 分子在硅表面不同吸附位置的取向；实现了同时对单分子的电子态进行位置和能量空间的表征；通过 STS 揭示了非晶态与晶态的 Pd 纳米点的电子分布；通过单分子操纵技术构造出基于 C₆₀ 和 Au 纳米团簇的具有显著负微分电阻效应的单分子器件，论文先后发表在 *Nature* 等国际最具影响的科学期刊上。他们还利用低温超高真空扫描隧道显微镜，对吸附于金属表面的钴酞菁分子进行“单分子手术”，在世界上首次成功实现了单分子自旋态的控制，为单分子功能器件的制备提

供了一种重要的新方法,结果发表在 *Science* 上, 并被同期的“透视”栏目进行了专门评介。

合成具有独特光、电、磁性质的纳米材料、超导材料以及采用温和的方法合成传统的高温高压相物质是当代无机化学和材料科学领域的研究热点。李亚栋等提出了一种“液体—固体—溶液”相转移、相分离的机制,突破了现有合成方法通常只能适用于某些单一或有限种类纳米材料的局限,成功实现了贵金属、半导体、磁性、介电、荧光纳米晶与有机光电半导体、导电高分子及羟基磷灰石等生物医学材料等系列尺寸均一、单分散功能纳米晶的合成制备,结果分别发表在 *Nature* 和 *Adv.Mater.*等著名学术刊物上。*Science* 以“晶体生长:明星品质”为题,介绍了俞书宏等用化学溶液法合成具有 14 个腔洞的 14 面体硫化铜美丽微晶的工作;钱逸泰等采用溶剂热方法在 200°C 合成出了六方碳化硅;在 600°C 合成出了 α - Si_3N_4 纳米线;用热处理前驱物法合成了 ZnSe 纳米线束。谢毅等用光热化学法合成了微米管状等不同形态的硒材料,发现其形貌对其化学储氢性能有影响;由水热法合成的新相 VOOH 材料,具有优良的电化学性质,可作为锂离子电池材料。徐正等采用一步液相化学路线,在较低的温度和常压下可控合成了高质量的具有铁磁性(T_c 都在室温以上)的纯立方相和纯六方相镍纳米晶,还开发出了一种简单有效制备磁性金属镍纳米管的方法和制备金属复合富勒烯纳米管同轴电缆结构的方法。郑兰荪等以 ZnO 纳米结构为生长模板,以 SnH_4 为锡源,通过化学气相沉积方法成功地得到了具有三维外延核-壳结构的 ZnO/ SnO_2 复合结构,并发现外延复合之后 ZnO/ SnO_2 四角叉表现出不同于 ZnO 和 SnO_2 的光致发光。

化学自组装及其规律是当今分子工程研究中的前沿问题,利用化学自组装方法,可在固体表面构筑分子纳米结构,在纳米器件制造方面具有潜在的应用前景。我国科学家开展了一系列关于配体及其金属配合物表面组装的研究,选取长方形、正方形、螺旋状和笼状等分子,得到了多种不同的表面分子纳米结构,直接观察到了分子的各种形态。研究还发现,单一组分的配合物分子可自发地在 Au(111)表面形成有序超分子阵列,分子吸附后能保持原有的形貌特征;双组分体系在表面则形成畴结构;而三维笼状分子形成对插的组装结构。在大量的分子组装实验基础上,总结了分子组装体受到分子骨架、电化学诱导、组装环境等的影响规律,发现链状分子的诸多性质如组装中的分子构型、组装体手性以及畴区取向等与组装分子的链长有密切的关系。洪茂椿等用化学自组装法设计合成出多个系列金属-有机纳米笼、纳米管和纳米线和纳米管阵列,合成了含金属芯的纳米线,并应邀在 *Chem.Commun.*发表专栏文章。由纳米棒自组装而成的 V_2O_5 空心微球在锂电池应用中表现出良好的电池特性;大规模制备的 ZnS 纳孔纳米粒子则表现出优异的光催化活性。发展了界面反应生长方法(IRG)结合外延生长制备出大面积 ZnO 纳米网,它是具有良好光空间约束效应的二维光子晶体激光器。

提出了利用具有原子级空间分辨能力的扫描探针显微技术(SPM)诱导材料表面发生局域物理或化学变化的热化学烧孔型 STM 存储技术,有望实现纳米尺度的海量信息存储。围绕热化学烧孔材料的设计与合成、STM 烧孔效应与烧孔机理、分子结构与烧孔性能的关系、以及存储性能指标的综合评价等课题,开展了一系列系统性的研究工作。

利用碳纳米管、金属及金属氧化物纳米粒子、高分子等生物相容性材料构建了一些功能化界面,提出了扩散层电极对和功能化概念的器件,为高灵敏度、高选择性生化分析奠定了基础。利用纳米组装技术构建了一系列具有高灵敏度、高选择性的酶电化学传感器、免疫电化

学传感器、基因电化学传感器等，用于重要疾病的早期诊断。利用纳米技术，建立了一些灵敏、稳定的电致化学发光传感器件。

纳米科学在聚合物研究中同样发挥了重要作用。比如，江明等首先在聚合过程中使嵌段共聚物组装形成纳米颗粒，利用纳米粒子多聚体外表的聚苯乙烯壳层分布密度的变化，继续与其他纳米粒子或多聚体结合而一步获得了瓶刷状纳米线。杨柏等通过带烷基季铵化聚苯乙烯共聚物与巯基取代羧酸包覆的纳米晶复合，实现了可加工性，能形成环状、螺环和纤维状的单色或多色微球，还能形成纳米图案化，在高含量化合物半导体量子点纳米粒子/聚合物复合材料制备方面取得新进展；他们由以双甲基丙烯酸铅在醇类溶剂中自组装形成的直径 200~300nm 的纳米纤维辐照聚合获得了铅离子含量高达 54.9(wt)%的、耐溶剂性的聚合物纳米纤维，经室温下 H₂S 气体处理，获得了分散在聚合物纤维中的直径 4nm 的 PbS 纳米粒子，这种原位制备方法简单易行，不会引入杂质也无需任何处理就能获得稳定均匀分散半导体化合物纳米粒子/聚合物纳米纤维，有望用于光、电、磁器件的制备。在聚合物/碳纳米管复合材料研究中，潘才元等利用自缩合烯类单体聚合在多壁碳纳米管表面获得链接超支化聚合物，有望改善碳纳米管在聚合物中分散和增大界面相互作用。

徐柏庆等通过可控合成得到了一些纳米金属氧化物粒子，研究了“金属/氧化物”催化剂体系“载体”氧化物的纳米尺寸效应；提出了纳米复合型“金属/氧化物”催化剂概念，研制了几种高性能纳米复合型“金属/氧化物”催化剂。

利用胶体与界面化学方法制备微纳米功能材料是诸多方法中较为普遍和相对经济适用、产量高、可实现工业化生产的方法。例如，齐利民等以由正负混合型表面活性剂构建的反胶束体系作为反应模板，实现了 BaXO₄(X = Mo、W)一维或多维纳米结构的可控合成以及大小均一的六角星形 PbS 纳米晶的控制合成，为溶液中半导体纳米晶的形貌控制合成提供了一条相对“绿色”的途径。在传统的微乳液软模板非离子型表面活性剂的胶束溶液中辅以超声条件实现了大批量 Se 单晶纳米管的合成；利用超声和微波加热的辅助方法，在离子液体介质中得到各向异性的金纳米盘和纳米带；在微乳液体系中通过设计油/水界面来控制反应而得到比传统方法产率更高、性质更均一的单分散纳米晶。表面活性剂对纳米材料包覆形成的空间稳定壁垒对 pH 和电解质浓度不敏感，因而比电荷稳定更有效，对防止团聚而得到体积很小的单分散纳米晶和量子点有广泛应用；表面活性剂在不同晶面的选择性吸附作用导致不同晶面的生长速率不同，最终导致各向异性纳米材料的生成；表面活性剂的种类和复配，也会影响目标产物的聚集和晶化。此外，除利用表面活性剂体系的模板作用，借助扩散中的 Kirkendall 效应等，通过无机晶体前体可控转化过程，还可实现对具有规整多面体形貌的无机中空结构的可控合成，如具有多级有序结构的十二面体银笼以及八面体状氧化亚铜单晶纳米笼。通过把纳米粒子胶体溶液引入有机相形成液/液界面，用引发剂使纳米粒子在界面自组装形成有序薄膜，不仅可以组装金属纳米粒子有序单层或多层薄膜，也适用于氧化物纳米粒子的组装，所得到的纳米粒子有序薄膜的尺寸可以调控，并且很方便转移到(导电)基底上，利于后续的电催化、异常光学以及其他研究的进行。

利用 LB 膜技术获得具有规则排列的纳米颗粒、纳米线等是有序薄膜研究的新进展之一，这种阵列一方面可以利用典型的两亲分子体系，也可以直接利用纳米结构进行组装。刘鸣华等采用 LB 膜印刷术成功制备了聚吡咯纳米颗粒平行或交叉排列的纳米阵列结构且其纳米结

构特征可以在一定程度上得到调控。

我国率先开展了有机纳米体系的研究。姚建年等继因成功地将纳米材料特异性研究从金属、无机半导体拓展至有机小分子领域并在对有机分子纳米体系的新特点、有机纳米结构的形貌调控、维度对有机晶体电子结构的影响等方面的重要进展而获得 2004 年国家自然科学二等奖以后，又在有机纳米材料光谱行为的调控规律、具有不同结构特征和尺寸高度均一旦可控的有机纳米结构单元的制备、纳米粒子中激子手性的尺寸依赖性以及颜色可调的有机发光材料等方面取得了新进展。李玉良等利用氢键组装构筑了系列有机固体纳米材料。他们提出了协同自组装和自聚合的概念，利用这一概念建立了组装高度有序的聚合物纳米线阵列的方法，获得了在铜基底上生长的大面积高聚物纳米线阵列。张希等利用 π - π 相互作用和双疏-双亲原理获得了稳定性非常好的圆盘状胶束，并通过层层组装模拟了一些生物微纳米结构。胡文平等采用物理气相传输等控制合成了不同尺度的有机固体单晶纳米材料和纳米单晶的三维结构，并利用一维单晶纳米材料构筑了有机晶体的交叉、平行等复杂结构，这为有机晶体在纳米器件中的进一步应用开拓了新的思路。

纳米间隙电极是研究纳电子学、分子电子学的重要工具和手段。刘忠范等提出并实现了利用纳米间隙电极的高频阻抗特性进行距离控制的方法，所设计的装置可以在几十 Hz 到几十 kHz 的频率范围内实现反馈控制下的恒电流电化学沉积，从而可以近线性地连续控制电极间距从几十 nm 到小于 1nm 的较宽范围内变化，拓展了此类方法的适用体系。陈胜利等建立了纳米尺度电化学界面的动态双电层理论模型，可有效地描述纳米尺度电化学界面的高电流密度和纳米限域引起的动态双电层效应和电极尺寸效应。电化学方法是制备纳米材料的有效方法之一，比如利用三步(活性炭纳米管，氧化 PtCl_4 , 还原 PtCl_6)制备了碳纳米管与 Pt, Ni, Ru 的复合物，利用电位阶跃方法在碳纳米管上制备出了具有比一维的复合物对甲醇的氧化具有更强的催化性能的三维结构的纳米 Pt, Pt, Ru, PtRuNi 合金粒子，并已用于生物传感器、直接燃料电池方面的应用研究。

2. 对与生命相关的化学问题的研究日益受到重视

化学与生物、生命科学的交叉科学问题的研究一直是当代科学中的一个极其重要和倍受关注的领域。仿生学、生物化学、酶化学以及新兴的化学生物学等与生命科学密切相关的研究领域在我国越来越受到化学领域研究人员的关注和重视。

在化学生物学的研究中，蒋华良等利用国产超级计算机开发了分子动力学并行算法，在膜蛋白分子动力学模拟、配体对信号通路调控的分子动力学模拟和实验研究方面，取得具有国际先进水平的工作。中国科学院上海生命科学院以天然产物为探针发展了抗幽门螺旋杆菌药物的候选靶标，并测定了天然产物与靶标蛋白复合物的晶体结构。丁健等在对全新结构二萜醌类化合物沙尔威辛的作用机理研究中，在国际上首次提供表明转录因子 c-Jun 在下调 *mdr-1* 基因表达和诱导凋亡过程中起着关键作用的直接证据。湖南大学化学生物传感与计量学国家重点实验室与湘雅医学院合作在基于核酸探针的分子医学研究方面作出了国际领先水平的工作。通过国际合作，发现 PKC ζ 为一个新的抑制癌细胞扩散的药物靶标，发现表皮生长因子和趋化因子所诱导的两类不同的趋化运动信号传导皆需要 PKC ζ ，由此认为 PKC ζ 是理想的抑癌基因靶点，该工作发表后在 Breast Cancer Net 被专文评论，并被用于指导药物筛选。赵新生等在 DNA 单核苷酸多态性识别方面取得重要进展。马会民等研究了一种对二聚体蛋白质 N-末端可进行专属性光学标记与分析的通用方法，发展了荧光光谱法在蛋白质解折叠研究中

的应用。中国科学院上海有机化学研究所与生物物理研究所合作在冠状病毒的广谱抑制剂研究方面取得重要进展，在细胞模型上可以抑制由人感冒病毒、猫腹膜炎病毒和小鼠肝炎病毒的感染，这说明这些冠状病毒的广谱抑制剂有可能被用来治疗这些感染性疾病。他们还与哈佛大学细胞生物学研究人员合作证明，这类化合物可以引起细胞中翻译起始因子eIF2 α 的去磷酸化，eIF2 α 经去磷酸化修饰后就会使翻译受阻，从而抑制新生肽链的合成及其移位到内质网的速度。

核酸酶及其模拟研究中，计亮年等设计、合成了一系列结构新颖的金属多吡啶配合物作为新型人工核酸酶，系统地研究了核酸酶模型化合物和DNA作用的热力学和动力学机制；发现了一些DNA“分子光开关”钌化合物和“多键合中心”的铜配合物能够有效断裂DNA；在新型超氧化物歧化酶的模型设计方面也取得重要结果。郭子建等获得了具有高核酸酶活性的和高抗肿瘤活性的金属配合物体系并探讨了金属中心之间的协同作用和配体修饰对生物活性的影响。中国科学院稀土化学与物理重点实验室发现稀土对核酸的序列和结构具有识别能力，为认识与揭示生命过程奥秘，提供了重要的理论基础和信息。在老年斑和阿尔茨海默病机理方面，杨频等首次采用光谱法和膜片钳技术相结合的方法证明了A β (10-21)可作为研究金属离子诱导的多肽聚集与细胞作用的模型片段；合成了一系列乙酰胆碱酯酶抑制剂，研究了它们对神经细胞膜离子通道电流的影响。黄仲贤等研究了与阿尔茨海默病有关的金属蛋白-神经生长抑制因子的构效关系、血红素蛋白的结构-功能转换以及各特定的氨基酸残基和特定的结构元在生物大分子中所承担的作用；运用核磁共振方法成功地解析了神经生长抑制因子蛋白(GIF，也称金属硫蛋白-3)的hGIF的 α -结构域的三维结构，发现hGIF的生物活性不但与 β -结构域的Thr5残基CPCP的特殊氨基酸顺序有关，而且与其它残基例如Glu23有关，这表明hGIF活性可能与大脑中的锌代谢和NO的信号传递有关； α -结构域通过结构域间的相互作用对蛋白分子的活性起作用，通过分子设计和结构改造，成功地将一个b-型的细胞色素体外转换成为一个c-型细胞色素蛋白，并把一个电子传递蛋白改造为一个具有催化活性的金属酶。

利用分子动力学模拟和突变研究了被认为是抗严重急性呼吸道综合症(SARS)结构药物设计的关键靶标的冠状病毒类 3C 蛋白酶，该酶以二聚体和单体的混合形式存在，发现单体永远是非活性的，二聚体中的两个促进剂只有一者在某一时刻是活性的，一个促进剂就足以完成催化过程。一个单体催化所需的正确构象可以在二聚体形成时诱导产生。

研究了增强表面 DNA 杂化特异性的扫描电势发卡变性(SPHD)方法，原理可用于不同DNA杂化碱基序列的检测。利用单分子成像捕获到单个24-聚体MjHsp16.5分子的解离过程，实时荧光共振能量转移谱(FRET)检测到温度调节的亚单元交换，确定了不同温度下的决速步。

过度紧张是休克的最重要原因之一，研究人员比较研究了中国人群的不同过度紧张类型对引起休克风险的长期影响。发展了一种基于核酸适体(aptamer)和DNA分子光切换复合物[Ru(phen)₂(dppz)]的新信令(signaling)方法，用于蛋白质的灵敏度达到1 nmol/L的检测。发现[Gd@C₈₂(OH)₂₂]_n纳米粒子对老鼠的肝癌细胞(H22)的生长显现高抑制活性。将CdSe/ZnS量子点和磁性 γ -Fe₂O₃粒子包覆在共聚物纳米球中，可以得到双功能纳米球，能够捕获和分离特殊的癌细胞。

生命分析化学正在成为学科交叉的重要生长点，我国取得的重大进展有：利用选择标记

蛋白质技术研究蛋白质的局域结构；建立手性分析新方法；发展高维分离技术并用于蛋白组学研究；继续发展了针对动物学习与记忆过程中化学物质基础的活体、在线生化分析平台；发展了纳米相关生化分析的新方法与新技术，特别是光学和电化学传感方法；创造了辉光放电离子化分析新技术；表面等离子体共振及其像分析开始迅速发展；建立了新原理的样品在线浓缩方法。在蛋白质组学领域，“人类肝脏蛋白质组计划”经过国内七十余家实验室的共同努力，首次建立了规范化的中国人肝脏组织标本库和国际第一个系统化人类健康肝脏蛋白质组数据库，并进行了系统而深入的生物学分析，获得了大量具有重要生理和病理意义的功能蛋白质，开发和改进了一系列蛋白质组学的新技术新方法，获得国际蛋白质组领域科学家的高度关注，也为人类所有组织、器官、细胞的蛋白质组计划提供了模式与示范。在高丰度蛋白去除、低丰度蛋白富集、新型色谱分离介质、多维分离模式、新型质谱基质等蛋白质的高效、高通量分离和高灵敏度鉴定方面取得了重大进展。

金属组学研究在原子光谱联用技术、样品的分离富集方法、Hg、Cd、Sn、As、Se等重要元素的形态分析以及在生命和环境体系中元素与生物分子相互作用研究方面均开展了卓有成效的工作。在砷对基因和蛋白质的调控方面，进行了长期而深入的探索，为治疗急性早幼粒细胞白血病做出了重要贡献。

2001年国家基金委启动了题目为“微流控生化分析系统的基础研究”的重大研究项目，经过5年的研究，微流控芯片的研制与加工技术、微流控高通量连续进样方法、微流控电致化学发光系统、微流控固定化酶反应器在蛋白质分析中的应用、微流控单细胞分析、微流控荧光和吸光检测系统的微型化，以及纳米技术在微流控系统中的应用等方面取得一系列重要结果和进展，开发了多项创新技术，申请了百余项专利，并研制了多种具备不同程度自主知识产权的微流控分析仪器装置或样机，为相关仪器的产业化提供了有利基础。该项目在2006年3月通过专家验收，认为研究成果在国际相关学术领域已具备一定领先优势。5年中，国内学者发表的SCI收录微流控论文数已达190篇，仅次于美国，居世界第二位。

利用化学热力学的原理和方法研究生命过程的重要现象，在许多情况下是其它研究方法和手段所不能代替的。清华大学、北京大学、武汉大学等运用多种分析测试手段，在生物大分子与药物等小分子相互作用、细胞体系热力学、分子识别、生物膜相变与稳定性、纳米尺度分子有序聚集体的构筑规律与疏水作用的本质等方面取得的成果，对于药物分子的筛选、认识生命现象本质等具有重要的理论和实际意义。

利用胶体化学知识与技术，郭荣等研究了药物分子(如病毒唑、阿昔洛韦、阿克拉霉素等)诱导两亲分子有序组合体的形成、转变规律，揭示了药物分子与两亲分子有序组合体之间相互作用的规律，并建立了相关理论模型；根据药物分子在分子有序组合体中的结合位点，研究了不同种类分子有序组合体，尤其是高级聚集体对药物活性的影响，进而筛选合适的药物载体；探讨药物的助溶-增溶机理，研究了两亲分子有序组合体对药物水解的抑制性、抗氧化性等行为的影响，为提高药物的稳定性提供了理论依据；王毅琳等通过设计生物相容性两亲分子有序组合体调节与药物分子、生物大分子如蛋白质、DNA的结合方式，进而有效调控药物与生物大分子之间的相互作用。这些结果的取得，为分子设计和药物开发提供了理论基础，进一步扩展了表面活性剂的功能与应用范围特别是在生命科学中的应用。

胡乃非等研究了血红素蛋白质(如肌红蛋白、血红蛋白、辣根过氧化物酶和过氧化氢酶等)

在各种薄膜电极上的直接电化学与电化学催化，发现纳米金与 Mb 静电层层组装电极具有更高的电活性，可能成为开发生物传感器和反应器的一种新方法。上海师范大学化学系电化学研究室和湖南大学化学生物传感与化学计量学国家重点实验室合作，拓展了表面增强拉曼光谱和成像联用技术以及光谱电化学技术，在生物和有机大分子于电极表面自组装单层结构和性能关系的研究及数据解析和图像处理等方面取得了较大进展。俞汝勤等与日本关西大学合作，在分子水平观察了环境友好的缓蚀试剂植酸类化合物在银、铜和铁表面的自组装过程、结构和电化学极化行为；对巯基嘌呤分子在金电极表面的单层膜的稳定性和单层膜在金电极和银电极的吸附稳定性进行了比较。

利用物理、化学调控下各个功能体产生的荧光应变信息，提出了“并行连接、有界运动”的藻胆体与光合反应中心匹配的新模型；建立了竹红菌素分子对 DNA 分子光破坏机制；发现了竹红菌素分子与人血清蛋白特异性结合的性质；以藻胆蛋白作为荧光探针，发现藻胆蛋白与竹红菌素-蛋白纳米球之间强结合性和光诱导的相互作用，据此研制成针对微血管疾病光动力医疗的竹红菌素-蛋白、多糖、磷脂结合的几种新型纳米药物制剂，首先将竹红菌素应用于鲜红斑痣、视网膜黄斑变性、小静脉增生等微血管类疾病的光动力治疗研究，目前动物实验取得完全成功。 $[\text{Eu}(\text{tta})_3\text{dpbt}]$ 配合物结合了双光子敏化和高纯红光发射特点，对于少害发光生物标记和高质量生物成像及其它生物应用具有重要的价值。

生物医用高分子是高分子科学中的一个十分重要领域。卓仁禧等合成了以季戊四醇、间苯三甲醇、肌醇为核的聚酰胺-胺树枝状高分子，因其球形结构并能形成正离子，已经在试探作为新型非病毒基因载体。景遐斌等在用于组织工程的生物功能化支架研究中，发现当存在由合成的 RGD 短肽接枝的聚乙二醇-聚乳酸-聚谷氨酸三嵌段共聚物与丙交酯和乙交酯无规嵌段共聚物混合制成的聚合物膜时明显增大了膜的亲水性，有效促进了软骨细胞和 3T3 细胞在膜表面的黏附能力以及增殖能力。在仿生研究方面，邵正中等观察到 *Nephila edulis* 蜘蛛主腺体丝在很低温度下具有很显著的韧性，在液氮低温下仍能保持可测性，表明在极端条件下蜘蛛丝可作为超级纤维使用，指出蜘蛛丝力学性能的差异主要是由内部大分子链取向程度不同造成的，从而为通过高分子聚集态结构调控进行仿生制备提供了理论基础。通过对由超支化多臂共聚物“HBPO-star-PEO”在水中自组装得到的巨型聚合物囊泡为模型薄膜的分裂和融合过程研究，提出了基于薄膜渗透性控制的囊泡融合和分裂机理；实时观察了类似生物膜的动态分裂并提出协同分裂概念，预示融合过程中并不必需有蛋白质存在，支持了邻近囊泡膜的模型。从而将细胞仿生化学扩展到了聚合物体系。

理论化学研究表明，细胞色素 P450 酶催化反应单独地经由低自旋态反应路线进行，提出了动力学同位素效应可作为自旋态的准确探针；通过同源建模方法构建出谷胱甘肽过氧化物酶、细胞周期依赖性激酶、Nudix 水解酶 Ndx1、牛源苯酚硫酸转移酶(bSUL)、3-羟犬尿氨酸转氨酶(3-HKT)、甲基茉莉酮酸酯酶、佛手酚氧甲基转移酶、人类细胞色素 p450 超家族中 CYP2C9 变体酶 CYP2C9*13 的三维结构，确定了酶的活性位点的位置、结构和组成，促进了酶催化机理的量子化学研究。

开展了 MM/PBSA、GB/SA、MM/SASWA 及 MM/PBSA 等一系列化学信息学方法研究，并对某些受体-配体之间结合自由能、蛋白质的水合自由能等进行了计算和预测，得到了与实验结果一致的计算结果。建立了生物利用度、溶解度、 $\log P$ 、 pK_a 、caco-2 穿透、肠吸收、

血脑屏障穿透及化合物 ADEMT 性质预测等多种模型，得到了良好的预测效果。提出并建立了分子的亲水-亲脂势(HMLP)，已用于蛋白质分子的折叠以及相互识别与作用等问题的研究。对 PDB 数据库中的蛋白质序列进行了邻位效应和不对称性分析、对人类基因组与病毒基因组序列的不相容性进行了分析；傅立叶功率谱、小波变换、时频分析、人工神经网络、支持向量机等方法也被用于基因或蛋白质序列分析，得到了良好的结果，采用 Delaunay 三角算法、主成分分析方法等进行蛋白质的结构预测也进行了尝试。基于数据库遗传算法的靶标集中组合库构建方法发展及其在新药发现中的应用结果得到了国内外同行的高度关注。上海药物研究所开发出了通过互联网面向世界各地用户的靶标蛋白筛选方法和应用平台，拥有众多用户。

北京师范大学将国际常用的临床诊断和治疗放射性药物国产化并在某些方面进行了方法和技术创新，满足了我国核医学临床的需要，例如脑显像剂、心肌显像剂、肾显像剂、肿瘤显像剂等。在将计算机药物设计应用于放射性药物方面，也取得了进展，已指导新药设计。张智勇和陈春英在稀土元素分子活化分析和汞的分子毒理方面取得创新成果，在 2005 第 8 届“生命科学中的核分析方法”国际会议上被评为仅有的 2 篇“最佳青年论文奖”。赵宇亮等编著的厚达 600 页的“Nanotoxicology”一书已定稿，将由美国科学出版社于今年出版。

3. 有机功能材料与器件研究进展显著

有机固体是具有光、电、磁性能的有机和聚合物材料等有机固体材料以及由这些材料所组成的信息和能量转换器件的统称，主要探讨新型有机功能分子和高分子的设计、合成，研究其聚集态的结构、分子间的相互作用、电子行为及相关现象，同时开展其特殊物理、化学性质的应用以及分子器件的研究。我国在此领域的不少方面都取得了很好的结果，在国际上产生了较大的影响。

有机、高分子电致发光是已经部分实现了实用化的一个热点领域。王利祥等采用将多种发光组分通过共价键连接形成共聚物，以其为单一发光层的发光器件在蓝色、绿色和红色区域同时发光，从而实现了白光发射，最大亮度超过 10000 cd/m，电致发光效率达到 5.3 cd/A，功率效率达 2.8 lm/W；用磷光染料掺杂制备的白光发光二极管(WPLED)，电致发光效率达到 8.9 cd/A。论文发表后分别由《Nature》的“透视”栏目和英国皇家化学会的“化学技术”栏目和《Chemistry World》杂志进行了专题评述。曹镛等在此领域也取得了一系列重要进展，他们报道了第一个在紫外区发光的共轭聚合物 9,9'-二烷基取代-3,6-聚硅芴，发现通过 Suzuki 偶联反应合成的噁二唑与芴的超支化嵌段聚合物具有优异的稳定性，升温退火处理后仍能保持稳定的发光性能；报道了一类含金属配合物的单一分子白光共轭聚合物，其中侧链型聚芴类白光聚合物器件的流明效率达 6.1 cd/A，CIE (0.32, 0.44)；主链型器件的流明效率达 3.9 cd/A，CIE (0.33, 0.34)。如果对聚合物薄膜进行前热处理，可以明显改善白光器件的综合发光性能，特别是光强输出和色度稳定。在聚芴中引入带有硒吩与苯并噻二唑基团的窄带隙单体，得到了第一例能在近红外区域具有电致发光性能的非稀土离子和染料离子体系共聚物，通过改变共聚单体可把最大电致发光峰进一步红移，使其与近地太阳光谱更为匹配。王悦等与日本理化所合作，采用呋唑取代的烯炔类化合物获得了高纯、高效的白光器件；此外，他们在一维纳米材料、有机晶体的发光特性研究方面，也得到了系列创新性的结果。陶绪堂等采用无溶剂 Wittig-Horner-Emmons 反应在温和条件下合成了具有很好光电性能的含呋唑和苯撑乙烯单元的树枝状共轭高分子。马於光等利用螯合共聚物实现了高效饱和红光发射，且发光效率随电流密度增加并没有明显衰减，适合用于磷光聚合物发光二极管。报道了用电化

学方法制备图案化发光聚合物交联膜，有望发展成新型、简便、快速和经济地实现彩色图案化的一种新方法。刘云圻和于贵等发现 Silole 的电致发光外量子效率高达 8%，芳基取代的 silole 的实验和理论研究证明了该类化合物具有高效电致发光性能的主要原因是它们在薄膜状态下有高的荧光量子效率和高载流子迁移率，对设计兼有高发光效率和高迁移率的发光材料具有重要意义。

有机场效应管的研究是分子电子学的一个热点课题。朱道本、徐伟等设计合成了一种由两个三苯胺单元构成的环状分子，揭示出环状分子在分子的堆积排列、重组能等方面都较线性分子有较大优势，最终导致环状分子在载流子迁移率方面高出线性分子 2 个数量级，这一结果是目目前基于三苯胺衍生物的场效应管中最好的结果，而且也将对材料设计提供借鉴。刘云圻等研究了 2-苊氧-4, 4, 5, 5-四甲基咪唑啉-1-氧自由基的磁性能及其薄膜性能，并以它为半导体材料、SiO₂(450 nm)为绝缘层制备了显示良好 p-型场效应性能、可以在较低的操作电压下工作的场效应晶体管。闫东航、耿延侯等通过选择不同的稠芳香环合成了系列具有不同晶体结构和高稳定性的有机半导体材料，对薄膜中的堆积方式进行控制，提高了分子间的电子相互作用和取向排列，以共轭分子 NaT4 为半导体获得了其有机场效应迁移率与非晶硅器件相当的场效应器件。同时，通过选择合适的 n-型和 p-型半导体材料和优化两薄膜的厚度，得到了高迁移率的夹心型有机场效应晶体管器件。

在密度信息存储方面，宋延林等通过与国内外合作，利用扫描探针显微镜等技术，在热稳定的新型螺噁嗪薄膜上实现了可擦写的多层高密度光学信息存储和真空沉积自组装单晶薄膜的超高密度信息存储以及在有机晶体 4'-氰基-2, 6-二甲基-4-羟基偶氮苯(CDHAB) 自组装薄膜上实现了纳米尺度信息点的写入-擦除-再写入，为可擦写的超高密度信息存储材料的设计提供了新的思路和途径。

在有机太阳能电池方面，李永舫等报道了带二噻吩乙烯支链的聚噻吩在 380 nm~650 nm 显示宽而强的吸收峰，使用这种聚合物与 PCBM 共混(重量比 1:1)制备的聚合物太阳能电池在模拟太阳光(AM1.5, 100 mW/cm²)下的最高能量转化效率达到 3.18%，为当前新型共轭聚合物材料的最高水平。此外，他们还设计和合成了一种带共轭桥连的交联型聚噻吩衍生物，含 5%共轭桥的聚合物的空穴迁移率比不含共轭桥时提高了两个数量级，其光伏性能也有明显提高。

在有机传感器件研究中，张德清、马会民、王树等通过对四硫富瓦烯(TTF)单元氧化态的调控实现了分子荧光开关；利用对含有 TTF 的给体-受体分子内电子转移过程的调控设计了一系列新型的化学传感器，发现其对单线态氧的化学发光探针以及对糖、Hg、F、H₂PO₄ 等的化学传感器均具有高选择性、高灵敏度。

田禾等利用分子构型的变化控制分子的结构和荧光变化，构筑了分子半加法器，分子“算盘”等分子器件。秦金贵等将有机大环多胺配合物插入无机层状主体，得到了具有金属导电特性的亚铁磁体，实现了有机固体导电性和强磁性的有机结合。此外，我国在高效荧光、磷光材料的合成方面，也做出了很好的工作。张德清等利用四硫富瓦烯(TTF)的电化学活性以及组装特性，成功地得到了一种可以通过氧化调控成胶的新型有机小分子凝胶剂，给 TTF 的研究注入了新的活力。

胡文平、帅志刚等通过国际合作，用自组装的方法构筑了聚苯乙炔的纳米光开关，纳米

晶体管 and 聚合物分子结，分子结表现出明显的室温量子现象，理论计算表明这是因为聚合物分子呈现量子化的电子结构，电荷在聚合物分子内表现出量子传输特性的缘故。这一结果为理解聚合物分子内电荷的传输规律提供了帮助，美国化学会 Heart Cut 栏目对此给予专门评述。江雷等围绕双疏-双亲界面问题的研究应美国《化学研究评述》和德国《先进材料》的邀请，撰写了两篇综述。此外，有机固体的相关理论，在帅志刚等的推动下，也得到了快速的发展。

(四) 坚持科学发展观，为经济可持续发展与和谐社会建设服务

随着我国国民经济的高速发展，环境和资源问题已经显得越来越突出，这是一个涉及到能否保证长期可持续发展的关键。近年来，我国化学家们对，比如，气相和多相光化学反应机理和大气污染物治理、有毒污染物的迁移转化和风险评价、水体沉积物中有机污染物记录、持久性有机污染物(POPs)的动态过程和风险评价的研究、污染物在土壤中的吸附和降解、污染土壤环境的修复、生物标志物在污染环境诊断和生态风险评价中的应用、手性污染物的对映体选择代谢和毒性、POPs 和环境内分泌干扰物以及有机污染物的定量结构和活性关系(QSAR)和定量结构和性质关系(QSPR)等的研究都取得了明显进展。

绿色化学的宗旨是化学家们希望采用化学的手段从根本上不产生污染，在生产、生活与生态环境间创造一种极大地减少对自然的损害甚至适当地反馈自然以达到人类与自然和谐发展的平衡，其科学问题大体包括绿色合成、绿色催化、绿色介质、绿色原料、环境友好产品和绿色工艺与技术。前面介绍的“非晶态合金催化剂和磁稳定床反应工艺的创新与集成”就是绿色催化、绿色工艺与技术方面的典型例子。在基础研究中，高效绿色催化是绿色化学的核心内容之一。近两年，徐杰等围绕绿色催化开展的系列工作、施章杰等提出的高选择性氧化和卤化催化剂体系、王剑波等的高空间选择性的立体选择催化、程津培等的手性 Michael 加成、丁奎岭等的自负载手性催化剂多相化和寇元等的离子液体负载的铈纳米簇催化剂等都受到国内外高度评价。其寇元等的结果发表后即被“美国化学与工程新闻(C&E News)”在“科技聚焦”栏目下专文报道，称“中国化学家报道了一例具超常寿命和活性的铈纳米催化剂”，“催化剂的总转化数经五次循环达到 20,000，高出此前纳米簇苯加氢记录五倍多”。

随着现代化学的发展，我们的日常生活与化学的联系日趋密切，与公共安全有关的化学问题在建设社会主义和谐社会中的作用日趋突出。比如，在对毒品、毒物、炸药、隐藏武器等违禁品的探测技术与设备的研发中，化学正在发挥着越来越重要的作用；DNA、指纹技术等目前已在各地公安机关广泛应用；人体气味成分分析技术也有明显进展；苯丙胺类毒品分析的最低检测浓度已达到 0.05ng/mL，等。近年来，我国在全球禁止核试验条约和禁产公约等中的化学研究、核废物处理和处置化学方面也取得了国际同行认可的进展。

(五) 重视传统学科的基础研究

加强基础研究，重视知识创新是近年来化学科学发展的最突出特点之一。化学作为一门传统的基础学科，像任何一门学科一样，存在着大量需要深入研究、探索的问题，即使是一些新兴的领域同样需要基础化学的深入来支撑而发展。对于这一点，我国的化学家们都有非常清醒的认识。在国家科技部、自然科学基金委的支持下，我国已经取得了一大批具有国际

影响的成果。下面摘要介绍近两年取得的重要结果。

1. 无机化学

无机化学领域最为突出的进展是支志明的“金属配合物中多重键的反应性研究”，他创立了活性钌-氧、钌-氮和钌-碳多重键配合物化学并用于揭示原子和基团向有机底物转移的反应机理；报道了手性 $\text{Ru}=\text{O}$ 、 $\text{Ru}=\text{NR}$ 配合物并用于直接观察对映选择性原子或基团转移反应；最近他开拓了包括钌催化卡宾转移反应、分子内碳-氮键的形成、用氧对映选择性氧化烯烃以及 Wacker 型烯烃氧化成醛等在内的一系列可应用于药物合成和精细化学品合成的技术；创立了磷光金属配合物光化学，利用光化学的方法合成并测试了多种新型高活性 $\text{Os}=\text{O}$ 、 $\text{Os}=\text{N}$ 配位不饱和金属激发态物种，这些物种具有基态分子所无法达到的特殊性质和反应性；解决了包括氮偶合反应、闭壳金属离子激发态配合物的形成和仿生物有机氧化等多个化学领域难题。他取得的突出成果得到国际学术界的高评价，已经被国家科技奖励评审委员会建议授予 2006 年度国家自然科学一等奖，这是继 2002 年蒋锡夔等有机化学家之后又一次由化学家荣获一等奖。

徐如人等开拓了开放骨架磷酸铝的新结构类型，丰富与总结了相关结构化学规律，建立了合成与结构数据库，开辟了开放骨架磷酸铝的结构设计与定向合成的新路线。相关研究成果被邀请在国际有重要学术影响的杂志《Acc. Chem. Res.》(2003)和《Chem. Soc. Rev.》(2006)上发表特邀综述。

研究具有特定光、电、磁性质的新型功能配合物是当代无机化学领域最活跃的学术领域，分子磁体是目前国际上一个多学科交叉的前沿科学领域之一。高松等设计合成了国际上首例同自旋“单链磁体”叠氮钴一维配合物；设计合成了多个系列结构新颖的短桥连接分子磁体，特别是异金属磁体、混桥杂化磁体和不对称“三原子单桥”构筑的分子弱铁磁体；在国际上首次获得了锰的叠氮桥手性分子磁体，发现了从非手性配体构筑手性分子磁体的途径；发展了以金属磁性簇合物为节点组装三维微孔磁体的方法，并利用客体分子调控其磁性质。今年，他们又由溶剂调控得到了具有三种不同拓扑(方格，蜂巢及 Kagomé)的叠氮桥连的二维层状 Co(II) 化合物，为系统研究二维磁体尤其是 Kagomé 反铁磁体提供了极好的素材。陈小明等制备出电子自旋倾斜和典型变磁性、单链磁体性质的“磁性纳米线”等分子磁体。孟庆金等研究了对应于不同取代基阳离子的二硫烯配阴离子堆积模式对分子铁磁、反铁磁、抗磁、介磁、自旋派厄斯转变和类自旋交叉等性质的影响。郑丽敏等得到了第一例具有反铁磁相互作用的奇数核环形簇合物—九核铁环型簇合物。左景林等成功合成了一系列包括单分子磁体在内的具有新颖结构和高自旋基态的簇合物和一维聚合物。廖代正等报道了迄今第三例且长程有序温度远高于前二例的、以 $[\text{Cr}(\text{CN})_5(\text{NO})]_3$ 为构筑件的结构确定的并显示出特有绿色晶型的分子磁体 $\{\text{Mn(III)}[\text{Cr(I)}(\text{CN})_5(\text{NO})]\} \cdot \text{H}_2\text{O}$ ，有望作为一种多功能的分子光磁器件。吴新涛等研究出多孔反铁磁材料，张斌、王哲明分别和日本分子科学研究所 Kobayashi 合作合成出了有机无机杂化反铁磁材料和具有三维长程磁序的功能材料。。

在配合物化学理论和材料方面，陈小明等发现了新的原位 C-C 键脱氢偶联和羟基化的配体反应；揭示了有机腈与氨的“一锅”环化反应的机理 应邀为《Acc. Chem. Res.》撰写综述(排版中)；获得了多种具有类似无机沸石拓扑结构和良好吸附性能的新型微孔材料；发现在水分子的吸附/脱附过程中，微孔结构及配位键同时发生变化的新现象，得到了具有智能结构

变化潜能的微孔材料。廖代正等报道了第一例含阴离子水簇 $\text{I} \cdot (\text{H}_2\text{O})_6$ 化合物单晶结构的 $[\text{Ru}(\text{bpy})_3]_2[\text{I} \cdot (\text{H}_2\text{O})_6 \text{Fe}(\text{CN})_6 \cdot \text{H}_2\text{O}]$ 。宋友等合成得到了迄今第一个具有三维分子筛结构的八氰基稀土聚合物 $\{[\text{Nd}(\text{CH}_3\text{OH})_4\text{Mo}(\text{CN})_8]_3\} \cdot [\text{Nd}(\text{H}_2\text{O})_8] \cdot 8\text{CH}_3\text{OH}$ 。李丹等研究了含有立方方面心拓扑结构的十二核铜簇。冯守华等合成了具有高稳定性、热稳定性能接近 400°C 并表现出了良好的二阶非线性光学性能与荧光性能的手性偏苯三酸铜配位聚合物；获得了多种具有类似无机沸石拓扑结构的新型开放骨架结构材料。卜显和等合成了柔性双亚砷类配体和硫醚类配体，构筑了多种结构独特的多维配位聚合物；还合成了基于 3-(2-吡啶基)吡啶的含氮杂环系列配体，通过与辅助配体共同得到多个结构新颖的分子聚集体；采用水热合成手段，以带负电荷的含氮羧酸为辅助配体，得到了多个结构新颖，功能独特的金属叠氮配合物。

将过渡金属离子和稀土金属离子组合起来制备 d/f 混金属配合物是晶体工程中的一个挑战性课题。采用三乙四胺六乙酸、亚氨基二乙酸等脂肪酸作为配体，合成出了系列维数不同的稀土-过渡混金属配位聚合物，它们不但结构新颖，如具有三维穿插结构的 Co-Ln 配位聚合物等等，而且有重要的理论分析价值。采用不同位置取代的吡啶酸或苯甲酸等合成了从零维到三维的各种结构新颖的混金属配位聚合物。采用 2,6-吡啶二酸衍生物通过水热合成方法结构得到独特的 Pr-Ni-Na 三金属体系。通过温度控制稀土离子上的配位水分子数目，可以有效地调控配位聚合物的结构。如在室温条件下得到的一维梯状 Mn-Yb 配位聚合物，通过升高温度减少 Yb 上的配位水分子数，可以成功地将该一维聚合物转化为具有纳米级空洞、高度对称的三维配位聚合物，该类三维配位聚合物不但磁学性质特殊，并且在可见光区有良好的发射光谱。更重要的是该系列 Mn-Eu, Mn-Dy 配位聚合物加入不同金属离子后其发光性能显著变化，有望作为 Mg 和 Zn 的荧光探针材料。曹荣等利用 5-磺基间苯二甲酸与铜离子反应，得到一系列由四核平面型次级构筑基元组装成的二维和三维化合物，与镍离子的反应得到一个三维具有纳米孔道的配位化合物，它具有高的表面积 ($>700 \text{ m}^2/\text{g}$)，并可保持热稳定性至 350°C 并且在吸附多种客体分子后仍然保留多孔性能。含稀土和钡的磺酸化合物 $\{\text{Ba}_2(\text{H}_2\text{O})_4[\text{LnL}_3(\text{H}_2\text{O})_2](\text{H}_2\text{O})_n\text{Cl}\}_n$ (Ln = Sm, Eu, Gd, Tb, Dy) 具有开放的隧道，可以很容易地吸附和脱附客体水分子，整个骨架结构有类似海绵的动力学性能。

金属-氧簇不仅具有结构多样性，而且在催化领域具有广泛的应用，此外在分子电子学、功能材料及医药等领域也具有潜在的应用前景，因而该领域的研究一直成为合成化学及晶体工程研究的热点之一。最近，“金属-氧簇”的概念已经由单一的“前过渡金属-氧簇”研究范畴拓展到“稀土-氧簇”、“主族金属-氧簇”及“后过渡金属-氧簇”等领域。洪茂椿等通过非水介质合成路线合成了一个具有较强蓝光发射的新型混合价态十四核钒-氧簇合物；王恩波等通过单手性氨基酸金属配合物与钨-氧簇成功构建了具有螺旋孔道的单手性金属-氧簇聚合物，实现了小手性配体到金属-氧簇单元的传递；段春迎等以前过渡金属-氧簇为模板剂构建了新颖的三维金属-有机骨架，同时孔道中还发现了一个二十七核的质子化水簇。吴新涛等通过引入氨基酸配体，成功合成了系列高核铜-稀土簇 ($\{\text{Gd}_6\text{Cu}_{24}\}$, $\{\text{Tb}_6\text{Cu}_{24}\}$ 和 $\{(\text{Ln}_6\text{Cu}_{24})_2\text{Cu}\}$ (Ln = Sm, Gd) 并对它们导电性及磁性等进行了研究。杨国昱等报道了两个基于纳米尺寸锆-氧团簇单元 $[\text{Ni}@\text{Ge}_{14}\text{O}_{24}(\text{OH})_3]$ 构建的具有独特螺旋桨形状的二十四元环超大孔道的锆酸盐，首次在温和溶剂热条件下合成的无机微孔材料中发现了金属键的存在。他们还成功合成并研究了由三螺旋链与双螺旋链交织构成的具有左、右手螺旋管状的稀土-有机开放骨架配合物，

论文被选为 *Angew. Chem. Int. Ed.* 的“热点论文”；在稀土氧化物与过渡金属盐共存条件下，合成出具有复杂拓扑结构的三维稀土-氧团簇聚合物；在十四核稀土-氧团簇聚合物研究工作的基础上，通过第一及第二配体的“协同配位”，成功地合成了二个基于三十六核纳米稀土-氧簇单元的簇聚合物。这些研究为今后进一步以不同属性种类的簇单元构建大孔或超大孔材料打下了基础。

在功能材料与器件方面，任咏华通过分子设计合成了一系列具有丰富发光性质的可溶单核与多核金属炔和硫属过渡金属配合物，阐明了它们的发光机理，指出其发光和光物理受金属、炔和硫属配体以及辅助配体的种类、金属-金属距离、配体成键和桥连模式等影响；发现重金属嵌入有机炔和低聚炔可产生新颖高效磷光富碳材料；可溶发光金属硫属簇，可作为金属硫属半导体材料的模型化合物；对于“有机金属和金属簇基分子发光材料”这一新兴分支学科的发展起了推动作用。黄春辉等设计合成了高发光效率的稀土配合物发光材料和铈发光材料；获得了一系列具有离子识别功能的双光子荧光传感器；通过组装获得了纳米凝胶材料和多种形貌的有机凝胶材料，制备了高温固态的电解质材料，获得了转化效率可达 5% 的染料敏化固态太阳能电池；沈珍等设计合成了一系列具有离子识别功能的红光/近红外分子荧光传感器；姚元根等合成出具有荧光性能的含 Cu_3I_4 簇的链状聚合物。

2. 物理化学

化学热力学是物理化学的基础、经典领域。超临界流体相行为和分子间相互作用热力学是超临界流体的基本性质，也是超临界流体理论研究和超临界技术在各领域应用的基础。我国科学家在超临界水和甲醇等方面开展了大量的探索，其中利用超临界水制备一系列纳米材料方面取得了较大进展。比如在超临界水中制备的高度分散的 Ru/碳纳米管复合体系对苯催化氢化为环己烷的反应具有非常高的催化活性。这一合成方法预计可以用于一系列复合体系的制备上。陈晓等将超临界二氧化碳和离子液体两种绿色溶剂结合起来，以离子液体为极性微环境、超临界二氧化碳为连续相，构建新型微乳液体系；将离子液体与某些空腔化合物一起组建包合物。

甲基基团对二甲基亚砜和甲醇混合溶液中的氢键形成具有正面贡献，过剩光谱法表明这两者中的甲基对氢键形成的作用不同，二甲基亚砜甲基给电子而甲醇甲基夺取电子。研究发现次级烷基在氢键中的作用不可忽视，这对于理解化学和生物学中的复杂氢键系统起到了促进作用。

材料热力学是材料科学的重要基础之一，对于材料的设计和应用具有重要的指导意义。中国科学院大连化学物理研究所等对如新型金属有机骨架化合物储氢材料、高能推进材料、催化材料等的制备及其热化学的研究取得重要研究成果。中南大学建立了适用于多种工业材料的通用热力学模型，多组元热力学数据库可为焊接、凝固、非晶、准晶、薄膜生长等各种材料设计提供重要的信息。南开大学等研究了冠醚、环糊精、杯芳烃等合成受体分子/离子识别过程的热力学起源，定量研究了所构筑的杯芳烃连接环糊精等多种键合模式的功能超分子体系的分子键合能力和选择性以及热力学参数之间的关系，为构筑新型功能超分子体系提供重要的信息。中国科学院化学研究所、河南师范大学、辽宁大学、石油大学等测定了多种离子液体体系的热力学性质，为离子液体的开发、应用以及绿色化工过程提供了重要的实验和理论依据。北京化工大学以咪唑类离子液体为代表，开发了全原子力场、联合原子力场等方

法，用于预测多种离子液体及混合物的各种物性，取得了较好的结果，方法具有参数少、计算量小的优势，因而更有利于离子液体的分子设计。

通过国际合作，杨学明等利用自行研制的氢原子里德堡态-交叉分子束装置首次获得了 $F+H_2 \rightarrow HF+H$ 反应的 HF 产物全量子态分辨的平动能谱，解决了长期以来备受关注的 $F+H_2$ 反应共振的这一重要科学问题，并且对人们加深关于反应过渡态和共振态的理解有着重要的作用。

过渡物种的检测是研究化学反应的一种有效手段。王殿勋等将紫外光电子能谱仪(PES)用于瞬态物种动态检测，开拓了可靠、方便、快捷的把 PES 谱用于化学反应动力学研究的新颖方法，并由此获得了一系列有关臭氧损耗、光化学烟雾、酸雨形成中起重要作用的瞬态物种的产生、结构和反应的结果，还在各类碳氢自由基与 O_2 和 NO_x 的微观基元反应、F、Cl、Br、I 的纯净原子束流的产生和“高强度、高分辨、低本底的光电子能谱”等多方面取得了结果。过渡物种的检测中基质隔离红外技术是近来用于探测短寿命化合物，例如 $(CH_3)_2Ti(H)OH$ 、 $(CH_3)_2Ti(H)OH$ 的一种方法；制备出含有 Xe-O 键的非对称开壳型 $XeOO$ 阳离子物种等。“和频振动光谱(SFG-VS)”中提出了采用零偏角(PNA)法来精确确定取向参数，给出了 SFG-VS 的极化率选律和归属规则，为 SFG-VS 的定量取向和谱图分析打下了坚实的基础，已经被应用于汽液界面分子的 CH_3 、 CH_2 和 CH 基团的张量比分析。

近两年来我国在催化剂制备科学与技术、催化剂表征、催化反应动力学与机理、生物催化及其化学模拟、光催化、电催化，碳一化学与低碳烃化学、新型催化反应与技术工程、理论化学在催化中的应用、催化在能源、环境、石油化工、石油炼制和精细化学品合成中的应用等方面取得了一系列成果和重要进展。比如，李灿等在柴油氧化萃取超深度脱硫研究、在多相手性催化研究和在 In-Mn 催化剂上的可见光催化制氢等方面都取得了重要进展。夏清华等在 Chem.Rev.上发表了匀相和多相催化不对称环氧化反应的进展综述。长期以来，甲烷直接催化转化制备高品质液体燃料和化学品一直是化学研究的热点和前沿课题之一。徐奕德等实现了在无氧和连续流动下于 Mo/HZSM-5 催化剂上把甲烷直接转化为芳烃和氢的反应，证明了 Mo/HZSM-5 催化剂的双功能特性；指出了 Mo 物种的价态和落位、分子筛的孔道结构和 B 酸中心分布是决定甲烷无氧芳构化催化剂反应特性的关键因素；发展了甲烷氧化偶联和无氧芳构化的偶合反应过程，明显提高了反应的活性和稳定性；开发了一种具有潜在的工业应用价值的新型 Mo/MCM-22 催化剂。徐柏庆等发现了负载金属催化体系中载体的纳米尺寸效应。利用分子束制备技术，获得了严格意义上的单一尺寸膜催化剂，发现 Pb 膜催化剂在功函数调节和 CO 催化氧化反应上呈现精确的量子尺寸效应，在纳米催化的量子调节方面给出了定量的实验证据和理论阐释。此外，在低碳烷烃临氧活化和选择氧化、催化新材料的研制、均相及多相不对称催化反应、绿色催化、费托合成新催化剂、催化原位表征和理论模拟等方向上也取得了重要进展。

新型有序分子组合体的构建和应用是一个近年来受到极大关注并取得了很好进展的一个课题。国内学者根据分子间、聚集体间相互作用的特点以及两亲分子自组织过程的空间与能量要求，设计、合成了一系列新型两亲分子化合物，通过改变它们的化学结构，进而影响相应体系中有序分子组合体的形成与构造；通过采用相应的实验手段并结合理论研究方法，探讨了多种类分子间作用力在有序分子组合体形成过程中的作用机制及协同效应，寻求简便、

有效的调控特定有序分子组合体的手段，发现了一些体系中囊泡等两亲分子有序组合体形成与转化的调控规律。例如，郝京诚等发现无盐阴/阳离子，包括静电阴阳离子和配位作用表面活性剂溶液体系表现出了奇特的性质，通过强碱阳离子表面活性剂与长链烷基脂肪酸等摩尔混合(1:1)，制备了层状密堆集的“洋葱相”；利用金属离子的配位作用构筑了无盐配合表面活性剂多室囊泡相。又如，黄建滨等在 Bola 型两亲分子与异电性传统表面活性剂混合体系的聚集行为研究中，发现分子结构中刚性集团的引入有利于混合体系形成囊泡。在易水解的 Bola 两亲分子体系中利用分子结构中刚性集团变化以及 pH、无机盐、有机添加物质调节聚集体内分子间空间与能量的要求，在相应条件下相继获得了球形囊泡及管状结构等不同的两亲分子有序组合体；含有联苯基刚性基团的阳离子 Bola 型两亲分子与阴离子型表面活性剂混合体系，具有低浓度时囊泡优先胶束形成的特点；黄建滨等还发现正丁基苯、正/环己烷、正辛烷和正十二烷等非极性添加剂的加入可以使多种阴、阳离子表面活性剂混合体系中的胶束转变为囊泡；通过选取特定的正负离子表面活性剂混合体系，发现了随温度升高诱导的胶束-囊泡转变的新颖现象；这些可控的胶束/囊泡共存体系在作为双模板合成有序的“双孔”材料方面有着潜在的应用价值。再如，以离子液体为极性微环境构建微乳液、溶致液晶和囊泡等。

手性是自然界的普遍现象，自然界以及生命体中蕴藏着大量的手性分子，其形成是多层次的，分子以上层次的手性问题中，非常重要的课题之一是手性如何起源的？非手性的分子能否形成手性的组装体？刘鸣华等发现具有特殊结构的非手性分子可以通过在气/液二维界面上的超分子组装过程形成具有光活性的手性超分子聚集体，指出各种分子间的弱相互作用所诱导的超分子聚集以及在气/液二维界面上发生的对称性打破是这种重要现象的原因所在。

《Science》的“研究集锦”栏目中对此进行了专门的评述。

为实现非水体系中按人为设计的多层膜组装，张希等提出了基于氢键的交替层状组装方法，赋予了多层膜结构调控的新途径。层层组装技术的一个发展趋势是如何将层状组装与功能组装相结合。他和曹维孝等合作提出了将聚电解质交替沉积组装与原位光反应相结合来解决基于静电作用的聚电解质多层膜的稳定性的方案，同时这也成为制备感光性超薄膜的一种新方法，并可用来制备图案化多层膜表面。他们还发展了一种在聚电解质多层膜修饰的电极表面制备金纳米结构的方法，经过十二烷基硫醇修饰后，这种覆盖有树枝状分形结构的三维金纳米结构的表面，表现出了超疏水的特性，从而提供了一种制备自清洁表面的新方法。他们还将超疏水涂层修饰于圆柱状金丝的表面，成功地模拟了其漂浮于气/液表面的减重性质。除了平面膜结构以外，将层层组装技术扩展到微胶囊的制备是一个令人瞩目的动向，例如李峻柏等报道的具有生物相容性的中空微胶囊，他们还发展了层层组装-压力-模板技术，利用氧化铝为模板，制备了具有良好柔性的聚电解质纳米管。

林昌健等发展了多种微探针技术原位直接测量钢筋/混凝土界面微化学环境及其与腐蚀电化学行为的关系，发现钢筋/混凝土界面 Cl 和 pH 是控制钢筋在混凝土中腐蚀发生、发展的关键性参数。夏永姚等用化学键把聚氧乙烯齐聚物分子修饰到无机纳米粒子表面，得到的化学键合材料溶解锂盐后具有非常稳定的电导率，进一步修饰还能得到液态的聚合物纳米杂化材料。庄林等提出采用模式识别方法研究纳米 Pt-Ru 催化剂的构效关系，绘制出活性与各因子的多元函数图，指导纳米 Pt-Ru 催化剂的设计，对电池用氢氧化镍的质子扩散系数提出了基于纳米亚结构的新模型，对文献中扩散系数数据极大的分散性(6 个量级)和矛盾的扩散系

数对荷电状态的依赖性作出了统一的解释；陈政等在“动态三相界线”电化学领域提出和证实了无传质影响条件下的“薄层模型”以及有浓差、欧姆极化条件下的“纵深模型”。在此基础上他们制备出了磁性和储氢材料，观察到了相关过程中的新实验现象；提出了“非现场钙钛矿化方法”等改进方法；孙世刚等通过用硫或锑吸附原子对铂电极表面进行化学修饰来实现对 1,3-丁二醇电催化氧化途径的控制。杨汉西等提出了一种直接硼氢化钾燃料电池，硼氢化钾的氧化反应电子数可达到 7.5 以上，活性物质利用率达到 90% 以上；陈胜利等的微生物燃料电池的功率密度比文献中使用电子中继体的大肠杆菌微生物燃料电池要高 4~5 倍；周运鸿、詹辉等阐述了非化学计量的三元层状材料第一周不可逆容量产生的内在原因，解决了关于这一问题的歧义；通过将活性 S-S 键固定在分子内部在新型有机聚硫化合物的分子设计上实现了创新；夏永姚等将锂离子电池的离子嵌入-脱嵌机制与超级电容器的双电层机制协调组合于一个储能器件中，组成不对称电容器，并采用纳米聚苯胺材料、聚苯胺纳米线得到很好的大电流充放特性。蔡文斌等在化学镀与电镀配方和参数的合适选择、电催化时间分辨和芳香化合物吸附结构解析以及调控 SEIRA 效应与导电性方面取得进展。

近年来我国学者在包括与光功能、光电功能有关的各种无机、有机和高分子化合物的合成和制备；各种有机分子、无机半导体、超分子体系、纳米体系和与生命过程相关体系的光化学反应研究；利用瞬态光谱、超高压装置、原子力显微镜等高时、空分析技术进行的分子和集合体的光物理和光化学动力学和动态特性研究；光电功能体系、光催化体系和光敏化体系在环境治理、光能转换、信息存储与显示和光功能药物材料等方面的应用基础研究中取得了一批重要结果。佟振合等用光化学和光物理相结合的方法证实，分子内能够有效地进行远距离电子转移和三重态能量传递，发展了“通过化学键”进行传递的理论；对长链非极性分子在有机-水混合溶剂中的聚集和自绕曲以及碳氟链和碳氢链的互疏性提供了一系列新证据；提出和证实极性分子在非极性溶剂中受疏脂作用驱动也形成聚集体和自绕曲，利用极性链和非极性链分别受疏脂和疏水作用发生自绕曲，成功地合成了一系列大环化合物。赵进才等成功地在可见光照射下实现了染料污染物的 TiO_2 光催化有效降解和矿化，提出了与紫外光光催化反应不同的染料污染物可见光光催化降解机理；设计并合成了一系列可见光照射下可有效活化 H_2O_2 以及 O_2 降解并矿化有毒有机污染物的新型铁氮配合物及其负载型可见光光催化剂，并提出了相应的可见光光催化反应机理；研制成功可见光照射下可有效地活化 O_2 降解多氯酚等有毒有机污染物、非金属硼和氧化镍二元协同改性的 TiO_2 基可见光光催化剂，通过对 TiO_2 表面和体相改性的研究，澄清了一些国际上十分关注而又有争议的科学问题。今年，这两项工作又取得了新的进展。研究了树枝形聚合物体系的电子转移和能量传递过程，利用光物理和光化学的方法证明了芳醚树枝形聚合物体系中三重态能量从外围向核心的有效传递，提出了芳醚树枝形聚合物的折叠构象使位于外围和核心的给、受体相互靠拢，三重态能量传递是通过空间机制进行的机理。还有，利用脂肪或芳香二胺和取代吡咯-2-醛形成的双席夫碱、双二吡咯、含芳环脂肪二胺、多元酸等作为配体，依靠金属离子的模板作用，通过不同的合成方法，自组装成具有不同环形、空腔、三维或线性结构等的金属/有机超分子化合物，研究了它们的光物理性质和对金属离子、中性分子的识别作用。开展了超高压条件下的光化学研究，发现压力的增加将极大地促进有机分子间的相互作用，使其发光电子结构发生改变，观察到了在常压条件下观察不到的激发态发光，为分析有机材料中的不同电子结构提供了新的

方法；通过高压作用，得到了在常压条件下得不到的新的有机化合物晶体结构，为在超高压条件下进行新相态有机化合物合成制备开辟了新的途径。在半导体发光材料和染料敏化 TiO₂ 纳晶多孔薄膜太阳能电池的研究工作中，也取得了很好的进展。

3、有机化学

进入 21 世纪以来，有机化学一直保持着强劲的发展势头，受到科学界的高度关注，自 2001 年以来的六年中，除 2002 年之外，诺贝尔化学奖都授予有机合成或与有机化学密切相关的分子生物学的科学家。由此可见，一方面有机化学与生命科学相结合成为化学生物学发展中的核心学科，与材料科学相结合发展各种新型的有机功能材料，与环境科学相结合从事社会可持续发展的绿色化学；另一方面为了应对社会和科学发展的需求，有机化学学科本身也呈现出日新月异的面貌。有机化学的三个方面：物理有机化学、有机合成和有机分离与分析都取得了长足的进步，而其中尤以有机合成的发展特别突出。同样，我国化学家在这些方面也取得了很大进展。

从上世纪 80 年代以来，金属参与的有机合成反应就一直是有机合成新反应发现的一个主要源泉，过渡金属，尤其钯催化的碳-碳键形成新反应是这方面突出的例子，钯催化的反应也在天然产物复杂分子的合成中得到了广泛的应用，更进一步说明了金属参与的有机反应的作用和影响。

陈新滋等致力于设计和制备高效、高选择性的手性配体，将其应用于各种不对称催化反应中；并致力于对催化剂的回收与再利用以及环境友好不对称催化反应的设计进行探索。他们发现了首例能在空气中操作、可用于不对称催化氢化的含吡啶联芳手性配体；通过手性螺环骨架亚磷酸酯的设计制备，建立了手性配体设计刚性规律；将可溶性手性载体与均相手性催化剂相结合，开辟了手性催化剂固载新途径；首次以烷基铝进行羰基化合物不对称烷基化并获得了高立体选择性，为不对称烷基化的工业应用提供一个可行途径；发展了羰基化合物的不对称炔基 / 烯基化反应，为合成炔基 / 烯基手性醇奠定了基础；通过手性亚磷酸酯—铜催化的不对称共轭加成反应，得到了生物活性化合物的重要中间体。

金(黄金)和其化合物用于有机合成反应是近几年金属参与的有机反应研究中的重要方向之一，麻生明等今年对金催化烯炔底物的环化作了专门介绍。他们近年致力于金属参与的联烯化学反应，取得了很大的进展。此外，江焕峰等、麻生明等和唐勇等还分别报道了钯、铑和碲等参与的反应。

不对称氢化、不对称合成 α -氨基酸是不对称合成中的经典而又不断发展的课题，丁奎岭等利用组装的概念找到了结构较为简单的单膦配体，在 α -烯胺酯和末端烯胺(烯-1-胺-2)上用铑催化氢化获得了极高的ee值。周其林则利用手性螺环的单膦配体，在 α -烷基芳乙烯上实现了高对映选择性的氢乙烯基化。杨丹用二价钯催化进行了串联氧化环化反应，一次获得二氢吡啶类的化合物，当以金雀花碱为配体时可获得较好的对映选择性。

在当前热门的用脯氨酸类有机催化剂方面，国内不少单位都开展了工作，其中特别有意义的是程津培等将手性有机催化剂与离子液体连起来，用以催化对硝基烯的不对称Michael加成，可以获得很高的ee值，催化剂易于回收再用，可望用于其它的不对称反应。

杨丹在手性配体存在下进行了Lewis 酸催化自由基环化反应，由苯硒基底物出发进行苯硒基转移环化，形成三个手性中心和一个环，也可进一步串联反应生成四个中心和二个环，

生成单环产物时产率可达70~80%。这是催化不对称自由基环化中较为成功的一个反应。

在高质量的全合成工作方面,国内学者也做出了很好的工作。比如,马大为等报道了Halipeptin A的全合成,翟宏斌等报道了(+)-Absinthin的全合成以及潘鑫复等报道了Machaeriol D的全合成,等。

4. 分析化学

近年来,我国分析化学家已经在纳米生物化学分析技术、微流控系统与芯片分析化学、基因组学和蛋白质组学中的分析新技术和新方法、生物单分子、单细胞分析及实时、定量生命信息表达、生物分子相互作用研究、中草药分析及指纹图谱、环境分析化学、细胞与病毒分析、药物与临床分析、表面、界面、微区和结构分析、化学计量学与信息学、与重大疾病相关的标志物检测与分析、涉及人民健康的食品分析与食品安全和涉及国家安全与突发性事件的分析新技术、新方法等方面取得了一系列重要的研究成果。我国分析化学研究的国际学术地位明显提升,仅以在分析界的权威刊物《Analytical Chemistry》上发表的论文数量连年不断增加就可以说明这一点。鉴于上述内容已经在各有关段落中予以介绍,这里就不再复述了。

我国在单细胞检测方面起步稍晚,但不少研究已经达到国际先进水平,在纳米电极检测单囊泡释放等方面处于国际领先地位,已被Harris教授编入美国分析化学教科书及化学分析专书。2005年出版了国内外第一部“单细胞分析”专著,充分反映了我国在这一领域取得的学术成果。在毛细管电泳及微流控芯片检测单细胞方面也首先取得突破。

将毛细管电泳中分离高压对检测电路耦合的不利因素,转化而建立了一种新的可检测电活性物质、非电活性物质以及生物分子的普适电化学分析方法,为微流控芯片的发展以及阵列式、高通量分离电化学分析器件开辟了新途径。

在色谱研究方面,着重发展了多维、多模式、集成化平台,用于包括蛋白质组、代谢组、多肽组、中药和环境样品等的复杂样品体系的高效分离与高灵敏度检测技术。已建立了全二维气相色谱-时间飞行质谱(GC×GC/TOF MS)、超高压液相色谱/质谱(UHPLC/Q-TOF MS)、多维液相色谱/串联质谱(Multidimensional HPLC/MS/MS)、二维液相色谱/阵列毛细管电泳/质谱(2D-HPLC/array CE/MALDI-TOF MS)、二维毛细管电泳(2D-CE)等技术平台;合成了手性分离固定相、整体材料固定相、分子烙印固定相、酶反应器基质、MALSI-TOF MS靶体基质及各种应用与人体血液净化的吸附材料等新型材料;在仪器研发方面,开发了基于热膨胀原理的微流泵、多维液相色谱系统、具有自主知识产权的模拟移动床装置等新型色谱装置及配件。

化学计量学方法研究,特别是高维数据处理和小波变换方法等研究得到了创新成果,提出了基于PSO(粒子群优化)的样品加权和波长加权PLS回归方法,发展了交替三线性分解(ATLD)算法,提出了交替惩罚三线性分解(APTLD)、交替不对称三线性分解(AATLD)、交替拟合残差(AFR)等交替迭代算法以及三线性渐进因子分析法、顶点矢量顺序投影法等非迭代算法,实现了在现代分析化学中实际复杂体系的直接快速定量分析。拓展了黑色体系分析的理论和方法。对小波变换在分析信号的数据压缩、背景扣除与重叠信号分辨和用于化学振荡信号分析等方面继续取得进展;支持向量机(SVM)、局部建模及多模型建模等一系列新的建模方法被成功用于近红外光谱分析。系统研究了运用独立成分分析等新技术化学计量学方法

与近红外光谱技术结合对中药产品进行质量鉴定与控制。中药指纹图谱是目前国际公认的控制中药或天然药物质量的最有效手段,我国学者开展了复杂体系解析的化学计量学方法与指纹图谱分析技术相结合的基础研究,同时也进行了在中药、香精香料、代谢组学等领域的应用研究,为复杂体系的定性定量分析、中药等复杂体系的质量控制及在代谢组学中的应用提供了新思路和新方法。

5. 高分子化学

可控聚合与树枝状聚合物的制备是高分子化学近期的热点之一。吕小兵等通过温和条件下 CO_2 和外消旋环氧烷的不对称区域高选择性和立构高选择性交替共聚合,获得了具有 >95%的头-尾结构和>99%的碳酸酯连接的聚碳酸酯。超支化聚合物研究取得了一系列重要结果。例如,颜德岳等利用 β -环糊精与缩聚单体 1-(2-氨基乙基)哌嗪之间的主体超分子相互作用实现了对超支化聚合构筑的调控,《Nature Material》的“研究集锦”栏目对此进行了评述;由二缩水甘油-1,4-丁二醇醚(BDE)和三元醇的质子转移聚合获得了一类升温不透明、降温又透明的主链热敏超支化聚醚;潘才元等制备了核为树枝状结构、壳为 8 或 16 个等长枝链星状臂的聚合物和星状臂为(苯乙烯-丙烯酸甲酯)嵌段共聚物的树枝状-星形聚合物等特殊构筑的聚合物。

在可逆形变与形状记忆功能高分子方面,王晓工等利用含偶氮聚合物在偏振激光辐照下的可逆形变使聚合物微球逐步变成椭球、乃至棒状。

在易制备无规共聚物、均聚物或树枝状嵌段聚合物的自组装、环境响应(光控、温敏、pH 敏感、仿生物膜等)囊泡的研究、聚合与组装一步完成等高分子多组分、多层次、多尺度组装与功能集成方面取得了重要进展,克服了国际上主要采用嵌段聚合物来组装聚合物所存在的合成困难、品种及结构有较大的局限性等问题。江明等报道了由无规共聚物自组装形成了含有亚微米尺度的心空腔和存在于表面的 0.7nm 的大量环糊精微空腔的多级空腔胶束。论文由美国化学会网站 Heart Cut 栏目进行了介绍和评述。他们还报道了可逆光控胶束化、光控胶束-空心囊泡转换自组装体系。史林启等研究了形成温度与 pH 双重响应通道的聚合物胶束,且其通道的尺寸和透过率可通过改变嵌段聚合物组成和环境来调控。习复、陈尔强等合成了一种两亲的刚性或半刚性的带有树枝化侧基的柔性主链聚合物 ABA 型三嵌段共聚物,随着四氢呋喃/水混合溶剂水含量增大,组装从核-穗球形胶束、柱状胶束、柱状胶束形成螺旋结构、螺旋柱状胶束进一步组装形成超级螺旋或超级环状聚集体。在分子结构表征方面,陈尔强、唐本忠等研究了聚(5-[(4'-庚氧基-4-双苯基)羧基]羟基)-1-戊炔)的刚性聚乙炔主链及其介晶侧链的协同聚集,观察到该聚合物形成具有排列“受挫”高度有序的近晶相和间距由侧链长度决定的纳米图案化;安立佳等用带有热台温控的原子力显微镜原位研究了 PMMA 和 SAN 共混薄膜,得到了真实反映高分辨表面相分离形态和结构演变的相图,并进一步研究了远离临界点的共混薄膜表面相分离动力学和时间尺度内特征波矢随时间变化的标度关系。用分子模拟方法揭示高分子链的缠结现象对聚合物结晶过程的影响以及运用耗散粒子动力学方法探索材料表面拓扑结构图案对表面疏水性的影响等研究取得了新进展。

韩式方等发展了新的液晶高分子流体本构方程,研究了液晶高分子流体流动稳定性、分岔现象和流体取向特征。周持兴等研究了聚合物链形态和共混体系流变学以及反应性加工,开发了流场中聚合物大分子链线团形态数字分析平台,建立了建立相应的本构关系。许元泽等

研究了疏水缔合作用和弱凝胶化体系的流变行为，提出了描述凝胶化过程的剪切粘度数学模型。郑强等采用动态流变学方法，初步建立了多组分多相聚合物体系结构、形态、功能特性与流变行为的关联。解孝林、何嘉松等发现了无机微、纳米粒子对热塑性聚合物及其与液晶高分子复合熔体的“滚珠”(ball bearing)效应，为加工热敏性聚合物、提高液晶高分子的原位成纤作用提供了新途径。张劲军等通过对原油流变规律和机理的研究，准确预测了凝点以上任意温度时含蜡原油粘度和流变参数，开发了输油管道结蜡预测软件，并成功应用于国家“西油东送”等重点工程。

6. 理论化学与计算机化学

在理论计算化学领域，我国的发展势头很好。在理论方法的发展方面，刘文剑等在相对论密度泛函方法研究中使得四分量完全相对论与二分量准相对论密度泛函方法无论在计算精度还是计算效率方面达到完全一致，新发展的精确准相对论方法比文献中的近似相对论方法还要简单；提出了绝热近似下含时密度泛函理论的统一形式和高精度近似形式，自主地建立了一套把国际上最新取得的相对论量子化学进展都包含进去的量子化学程序包 **Beijing Density Functional(BDF)**。在电子相关方法如MP2和CC的线性标度化理论发展方面，提出的局域相关方法克服了内存和存储量需要线性增长的计算瓶颈,真正实现了含几百个原子体系的MP2或CC单点能量计算；根据分子片的能量在同系化合物中的可迁移性，提出了一种基于分子片的基态能量的简便计算方法，可以大大减少大体系的计算量。帅志刚等发展了考虑电子关联的分子体系的高阶非线性响应理论，相关程序已被美国科学家应用于双光子吸收分子材料的设计。厦门大学提出的价键组态相互作用方法，数值计算结果与耦合簇方法相当，价键可极化连续介质方法可应用于描述溶剂化效应的价键计算，所建立的计算程序包 **Xiamen Valence Bond (XMVB)**被国际上许多重要研究小组应用；提出了X3LYP、xPBE等弱相互作用的新杂化泛函形式，提高了计算精度，得到国际上同行的认同。建立的一个快速计算分子能量和一系列分子静态特性的电子结构方法实现了用线性标度计算大分子的静态物理特性。此外，在非平衡溶剂效应方面，发展了基于连续介质模型的新理论和应用模型，对电子转移溶剂重组和光谱过程溶剂效应等方面的传统理论和相关模型进行了重要改进，解决了过去的理论与实验矛盾的问题。运用概念密度泛函与原子-键电负性均衡原理建立了可极化的力场模型，发展了具可极化力场的与经典量子结合的分子动力学理论(ABEEM/MM/QM/MD)方法，并用于研究水离子溶液、多肽和蛋白质等生物大分子在水溶液和凝聚相过程。

在化学动力学理论方面，张东辉与杨学明等合作，对3原子体系气相化学反应得到与实验高度一致结果的论文已经在《Science》上发表；他又给出了4原子化学反应过程的准确态-态微分截面。方维海等在经典动力学理论的基础上，利用从头计算激发态能量、能量梯度和力常数矩阵，发展了Hessian基础上的二级近似积分方法，从而发展了激发态从头算动力学，朝着光化学反应过程的定量描述迈进了一大步。韩克利等发展了一种可用于描述电子和原子核波包运动的阿秒分辨的精确量子力学方法。

此外，在分子器件、材料性能、纳米结构计算与模拟方面以及催化理论计算包括酶催化过程研究中取得的创新性成果已经在前面相应部分中阐述，这里就不再复述了。

在运用化学信息学(计算机化学)进行 QSAR/QSPR 研究方面，通过引入投影寻踪新技术，找到了烷烃、烯烃和环烷烃色谱保留指数分布的内在结构关系和知识规律；通过正交投影技

术对不同拓扑指数所表征的结构信息进行比较，为找到更好的结构描述子提供了理论基础；通过对模型评价、稳健方法、分类建模等方法的研究，得到了比 PLS 更优秀的建模方法。化合物结构特征提取是 QSAR/QSPR 研究的基本步骤和重要环节，提出了“广义三角形法”、“广义二面角法”、“结构投影法”、“投影边界数学描述法”等方法学创新成果。粒子群算法的变量分区方法、逐步超球建模方法以及支持向量机技术等也在 QSAR 研究中得到应用。此外，利用 QSAR 研究方法对新材料的物理化学性质与其原子结构参数、化学配方、加工工艺等的关系研究以及熔盐相图研究充分显示了化学信息学的应用潜力。中国科学院上海有机化学研究所化学结构数据库、化学谱图数据库以及化学信息管理方面的研究工作已获得初步成功；中国科学院过程工程研究所对所建立的 ChIN(The Chemical Information Network)不断更新，访问请求数已经超过亿次；并建成了一个化学专业搜索引擎的原型系统 ChemEngine。

7. 核化学与放射化学

中国科学院兰州近代物理所最近利用重离子加速器提供的 Ne、Mg 重离子束分别轰击 Am，产生和鉴别了两种超重新核素 Db 和 Bh，参与了 Hs 和 112 号元素的化学性质研究；合成了 Er、Hf、Hf、Hg、Hg、Am、Th、Th 和 Pa 等新核素；在轻稀土质子滴线区，利用延发质子-伽玛符合以及快速氦喷-带传输技术，成功地合成和鉴别了 Ce、Nd、Pm、Sm、Gd、Gd、Tb、Dy、Ho、Yb 等新核素；在轻稀土质子滴线区、超铀缺中子区、重质量丰中子区等核区，首次合成和鉴别了 20 种新核素，从实验上初步观测到了丰中子区 β 延发裂变现象，对 20 多种核素的衰变性质进行了研究，使我国在国际核化学这一前沿领域占有一席之地。

在锕系元素化学方面，刘文剑最近用离散变分法(DVM)计算了 PuH_2 及 PuH_3 分子电子结构，用考虑相对论效应的有效原子实势基组的密度泛函理论 B3LYP 计算 U_2 和 Pu_2 的结构和性质并研究铀和氢的反应动力学，用全势线性缀加平面波(FLAPW)方法在广义梯度近似(GGA)、反铁磁下研究 δ -铀(001)面的性质，用赝势平面波计算铀及铀化合物的结构等；发展了国际上第一个可以用于重元素体系激发态及电子多重态精细结构计算的完全相对论含时密度泛函理论方法。

为了处理来自动力堆的深燃耗乏燃料，改进了现有的PUREX流程。研究了 N,N -二烷基氨基甲酰甲撑磷酸二烷基酯类和酰胺羧醚类萃取剂对于锕系元素的萃取化学。用只含C、H、O、N四元素的取代羟胺、肼或羟肟酸及醛等代替传统的氨基磺酸亚铁作还原剂，有利于高放废物的减容，它们对于 Np(V) 和 Pu(IV) 的还原反应动力学的差别可以强化对 Np 的去污效果，改善了对 Np 的回收。中国原子能科学研究院系统研究了这类“无盐试剂”对 U ， Np ， Pu 的还原反应动力学、配位作用及辐照稳定性，找到了有望用于先进核燃料后处理流程的工艺条件。

清华大学研究了烷基磷(膦)酸，烷基硫代磷(膦)酸和羟肟等对锕和镧系元素的萃取分离，首次将商品Cyanex 301萃取剂用于从镧系元素中分离锕，分离因子达到500。用纯化过的Cyanex301为萃取剂，锕和镧系元素的分离因子可 >2000 ，用少数几级逆流萃取即可实现上述元素的良好分离，并且完成了热验证实验。发现二烷基二硫代膦酸与中性磷萃取剂组成的协萃体系可降低萃取pH到2.5，辐照稳定性进一步提高。在此基础上，研究了不同取代烷基的二硫代膦酸对分离锕和镧系元素的影响，结果说明二(2-乙基己基)二硫代膦酸的分离效果最佳。该成果被国际同行评价为“本领域中多年来最重要的发展”。

中国科学院高能物理研究所和北京大学等在放射分析化学及其在交叉学科中应用方面取

得了重要成果。他们负责的国家重大基金项目“核分析技术在分子水平上研究典型环境污染物的毒理”(2004-2008)进展良好。刘元方等通过用加速器质谱在分子水平上研究了环境低剂量水平 C 双标记的无铅汽油添加剂甲基叔丁基醚(MTBE)及其代谢物叔丁醇(TBA)与小鼠肝/肾/肺 DNA 和血液蛋白 Hb/SA 的加合的剂量-响应以及加合物的体内衰减情况,于 2005 年向国家环保局提出了一份关于无铅汽油添加剂 MTBE 的对策建议:“继续使用,加强防范,逐步限制,积极开发”,得到了国家环保局的肯定和好评。

四、展望与建议

化学科学涵盖的内容极其丰富,各分支学科的发展非常迅猛。国情决定我们必须遵循“有所为、有所不为”的方针,选择对科学发展和国民经济与社会发展具有最重要意义的项目来研究。

纳米科技、材料科学(功能材料和结构材料,特别是功能材料)、能源和生命科学是当今世界各国都特别重视的领域,化学科学的各个分支学科的主要研究也与这些方面密切相关,新的交叉学科不断涌现,对此必须予以进一步关注。

化学研究在不断延伸到国民经济的各个方面,特别是能源、环境、医药、食品等重大领域,在这些方面的科技投入明显增加,针对解决实际问题 and 具有重大研究背景的课题日益增多,有些研究已经解决了一些长期存在的难题。

化学与可持续发展和建设和谐社会有着密不可分的关系,坚持科技创新与知识创新的相辅相成,进一步加快化学成果的转化、强化环境与绿色化学的研究、关注与公共安全中的化学问题的研究都是极其重要的大课题。

虽然应用或应用导向型的研究在不断增多,但是,化学原创性成果的取得强烈依赖于基础研究的发展。报告前面列举的事例无一例外,因此,继续加大基础研究依然是化学发展之本,特别是新兴的交叉学科的开展更取决于化学基础学科的深化。

对化学现象与规律本质的认识需要理论,未来应该对理论与计算化学方向有更多的关注与投入,以促进化学研究更好更快地发展。

对于化学学科发展本身的需要,新技术装备的开发和推广也是值得重视的一个方面。

下面就按学科对其发展提出建议,以供参考。

(一)无机化学

固体材料化学、配位化学、生物无机化学将是无机化学最重要的方向。合成具有独特光、电、磁性质的纳米材料、超导材料以及采用温和的方法合成传统的高温高压相的物质是无机固体材料领域的研究热点。功能配合物、建立在配位化学基础上的超分子配位化学、无机纳米团簇分子的设计合成及其性能研究和金属配合物的晶体工程是配位化学领域的研究前沿,将不同性质的构筑单元结合到同一个固体的晶格之中,获得兼具两种或两种以上功能的多功能材料、将过渡金属离子和稀土金属离子组合起来制备 d/f 混金属配合物以及金属-氧簇合物是晶体工程的挑战性课题。揭示并阐明金属生物大分子的结构和生物功能,尤其是金属中心的结构及其作用将成为今后生物无机化学研究的重点。无机药物及其在重大疾病防治中的应用、神经系统中的金属离子、多层次复杂生物系统的生物无机化学问题等将在今后若干年内

得到迅速发展。

(二)物理化学

1. 化学热力学

复杂体系、非平衡态的化学热力学、纳米化学热力学、材料热力学、生物热力学和热化学、绿色化学中的化学热力学、溶液热力学、临界点附近的热力学和提高统计热力学计算和分子力学计算的精确度和模型的普适性以及新型热分析技术的开发等应是研究的重点。

2. 催化

在化石能源和资源优化利用、新能源探索、环境保护、绿色化学以及人类健康与生活质量的改善等方面催化学科将发挥更大的作用。开拓利用廉价和可再生资源(如甲烷等低碳烷烃取代烯烃、芳烃、CO₂、生物质等的有效利用)为原料、在尽可能温和的条件下进行的包括烷烃活化、选择氧化、烷基化、聚合反应以及与新能源、资源探索 and 环境保护相关的催化剂与催化过程；高选择性催化合成，特别是不对称催化合成过程的均相催化剂体系和产物的分离与新反应介质等在内的新催化反应、新型催化材料，提高目标产物的选择性、乃至实现副产物的零排放；催化剂的高通量合成和评价方法、可原位与动态表征催化剂和催化反应机理的高灵敏度、高分辨率的新实验方法以及新理论方法的探索等都将是今后高度关注的课题。

3. 胶体与界面化学和有序分子膜

制备新型的两亲分子一直是追求的目标。两亲分子结构导致的自组织以及在此基础上赋予其它的特殊功能(例如螯合或配位功能、光或电致变形或变色功能、聚合功能、温度和 pH 敏感功能等)，将是使其分子有序结构更好地发挥和发展新技术潜力的关键。对有序分子组合体系内在规律和化学反应调控本质的全面了解，以及两亲分子有序组合体在生物医药领域的应用也应予以特别关注。有序分子膜的研究应该特别注意学科的相互渗透、交融发展和理论模拟与实际应用双重目标的互相补充、协同发展，重点是在组装单元概念的拓宽和广义化、新组装技术的探索与开发，以构建各种有特殊功能的有序功能分子聚集体和多功能集成芯片；模拟生物体系中的有序分子聚集体，提供生物生理活动的人工模拟平台等。

4. 光化学

基本的光化学原理和化学反应的本质研究的深入；新的光化学反应的发现和反应过程及条件的研究；在生命体系中的能量吸收、转移、储存和转换；新型光电功能材料的光物理过程和光化学反应研究；光作为一种清洁的反应试剂在环境保护中的作用、利用太阳能进行的能源生产和利用以及新的研究手段的引入都将是今后的重点。

5. 电化学

基本的电化学过程及反应机理的深入研究；电化学新材料、新方法的探索；电化学与其它学科交叉研究，如纳米电化学、生物电化学等；在化石能源和资源优化利用及可再生能源利用方面的新型储能体系的探索等都将继续是今后的热点。

6. 有机固体

迁移率高和稳定性好的场效应材料、敏感性和选择性好的传感材料、新型具有电学双稳态的存储材料、高效且稳定的电致发光白光材料、吸收光谱与太阳光匹配的载流子迁移率高的有机太阳能电池材料等都是有机固体材料研究的较为急迫的任务；纳米尺度的精确调控，

定向、定点、多维、大尺寸组装及组装动力学过程、机理与模型研究，以及有机功能纳米材料在器件中的应用都还待进一步的探索；器件的结构改善、新型器件的开发，特别是提高电致发光器件的发光效率和白光稳定性以及有机光伏器件的太阳光利用率和光电能量转换效率是器件研究的重点。

7. 理论化学与化学信息学

现代化学的发展要求理论计算“更大、更快和更准确”，这就要求在理论和计算方法上都不断有新的突破。应该注重理论方法发展的研究，加强凝聚相的动力学理论和统计力学的研究，要特别注重新概念、新思想的提出。实际复杂体系分析是化学信息学的主要方向之一，以化学信息学手段解决化学、生命、环境、材料等学科中各种复杂的实际问题是该学科的努力目标；数据挖掘和知识发现是化学信息学的核心内容。海量的化学结构数据和化学测试数据的深层次挖掘、化学结构与各种化学性质和化学行为的定量关系研究、面向生命科学问题的研究是化学信息学的重要课题，算法研究是化学信息学的基本任务。

(三)有机化学

物理有机化学、有机合成和有机分离与分析是主要方向，尤以有机合成为核心。比如，金属参与的有机合成反应就一直是有机合成新反应发现的一个主要源泉，其中烯烃复分解反应和金参与的有机合成反应是近年受到更多关注的反应方法；自由基介导的合成反应主要探索不同底物和反应条件下的自由基反应选择性以及如何避免采用剧毒的含锡试剂；“一个反应瓶”内的多步反应(如‘串联反应’和‘多组分反应’)是发展有机合成方法学的一个主要方面。手性纯化合物的合成，除拆分方法外，由易得的手性纯天然产物(糖、萜类等)为原料，构筑到目标分子，包括进行非对映选择性不对称反应形成新的手性中心，或者通过包括底物诱导的、化学计量手性试剂参与的不对称合成反应以及手性催化剂参与的催化不对称合成反应(金属催化的不对称反应和有机催化不对称反应)是主要途径。复杂天然分子的全合成仍将是极具挑战性的课题。

(四)分析化学

生物分析化学是当今颇受关注的研究领域之一，其重点是基因组学、蛋白质组学、代谢组学、金属组学中的分析新技术和新方法、生态环境学、纳米生物技术、免疫传感器和酶联免疫分析、分子层次间物质的相互作用、生物传感器、微流控系统与芯片分析化学、以及与此相关联的光谱、质谱、核磁共振、扫描探针显微镜、电化学、色谱等分析和分离方法的联用和组合，并推动生物试剂、分析仪器的研制和开发。此外，中草药分析及指纹图谱、环境分析化学、细胞与病毒分析、药物与临床分析、表面、界面、微区和结构分析、与重大疾病相关的标志物检测与分析等也受到很大关注。多层次(水平)、多参数、全组分分析方法和平台、时空高分辨的活体无损分析方法、海量数据处理和挖掘技术以及生物样品制备特别是浓缩或放大方法和技术等都是方法学中亟待解决的关键问题。生物样品对象将逐渐从简单的“死物”转向活物，建议应更多关注脑智障、疾病、传染病相关方面的分析方法发展，加强包括新的荧光成像技术等在内的检测单细胞中单分子的研究。

此外，对方法学和分析方法的集成研究以解决深层次问题、仪器研制和开展极端条件下的电分析化学基础问题的研究都需进一步加强。同时，有机分析化学、色谱学将仍然始终是

分析化学领域的重要内容之一。

(五) 高分子科学

我国高分子主要工业产品(塑料、橡胶、纤维、油漆与涂料)产量均名列世界前茅,而且将继续迅速发展,对基础研究提出了更高要求,特别是新型功能高分子的基础研究。可控聚合仍将是今后高分子合成化学的主要方向,发展可控聚合反应方法(包括例如易位聚合在内的烯炔易位反应、“Click”化学在高选择性、单一产物合成中的运用)、制备特殊构筑高分子实现聚合物结构与性能的精确调控是近期的热点;对由无规共聚物、均聚物或树枝状嵌段聚合物的自组装形成的环境响应(光控、温敏、pH敏感、仿生物膜等)囊泡的研究、一步完成聚合与组装的新技术的开发将使高分子组装研究逐步向具有特殊性能与功能的组装体发展;通过高分子合成化学与高分子物理的合作实现功能高分子的功能设计、功能导向合成、性能表征与器件研究,应该继续是今后的重点。基因传递载体、组织工程发展所要求制备的生物功能化材料将在本世纪得到更大发展。

在 高分子学科发展的同时,应该对高分子材料的改性、应用和开发予以特别的关注,它既是材料科学中的重要组成部分,又是高分子学科发展的重要源泉与动力。坚持实现资源、环境的可再生、利用应是高分子材料应用研究的基本出发点。

联系宏观、介观、微观、纳观尺度的流变学研究,尤其是本构模型的研究仍将是未来相当一段时间内的研究重点。复杂流体的结构流变学与凝聚态物理学的结合成为流变学发展的主流和高技术生长点的基础。微流体、电流变液、浓乳液、浓悬浮体、高分子多相体系、高凝/高粘度原油、新型生物医用材料、智能材料、功能材料、结构材料和功能结构材料的流变学应用研究是未来的热点。流变学测量技术进一步智能化、集成化并实现流变学参数的多尺度下在线测量是学科发展的支撑。

(六) 与生命相关的化学问题

与生命相关的化学问题的研究是本世纪化学发展中受到的极其关注的方向,化学生物学是与有机化学、分析化学等多学科发展紧密相关的一门新的交叉学科。就化学生物学学科本身来说,通过各种功能基因组研究计划(如蛋白质组计划、结构基因组计划和代谢组计划等)从细胞和分子层次弄清疾病发生的机制与防治的机理,发现并确证药物作用的靶标,然后有的放矢地寻找药物是主要的研究方向。与其它学科的交叉、融合将是本学科发展的基石。

(七) 环境化学与绿色化学

土壤污染化学、污染生态化学和理论环境化学的研究将会更快发展,有毒化学物质低剂量长时期暴露的生态效应及风险评价的方法学的研究更加深入。环境化学的研究将从分子水平上揭示复合化学污染物作用的微观机制和生态毒理效应及对人体的影响;从多介质多界面环境的整体角度揭示和预测化学污染物在实地环境中的归趋和行为,为发展污染环境的原位修复提供技术依据和有效途径。其中,新化学污染物特别是对新型持久性污染物和环境内分泌干扰物的发现和鉴别、新的环境分析方法和技术的发展、复合污染机制和模型和原位修复以及固体废弃物处置新技术和资源化原理等将是今后研究的重点。

绿色化学包括绿色合成、绿色催化、绿色介质、绿色原料、环境友好产品和绿色工艺与技术。高效绿色催化是绿色化学的核心之一,特别是一步/一锅催化替代复杂的传统过程将受到

高度重视。生物柴油是一个热点，离子液体/超临界/过程强化等仍受到很多关注。生物质的利用转化是重中之重，利用生物质特别是纤维素木质素获得燃料油和化学品，是未来的新增长点。

(八)核化学与放射化学

为使我国放射化学研究达到世界先进水平，并满足我国国家安全和核电建设的重大需求，建议加强放射化学教育，积极培养放射化学人才；开展新元素和新核素的合成和化学性质研究、先进核燃料后循环处理、锕系元素化学、放射性药物化学、环境放射化学、高放废物处置化学、放射分析化学、与核试和军控相关的核化学与放射化学问题等方面的基础研究，例如新元素和新核素的寻找、强辐射场下的核燃料性质及其化学分离行为、极端条件下的基础放射化学知识尤其是钚化学知识等基础研究；促进放射化学与其它学科的交叉融合，建议考虑设立以放射化学和核技术为基础的多学科研究中心拓展放射化学的影响力。