

国家自然科学基金委员会化学科学部资助出版

超越分子前沿

——化学与化学工程面临的挑战

〔美〕21世纪化学科学的挑战委员会 著

陈尔强 等 译

梁文平 审校



科学出版社

www.sciencep.com

超越分子前沿

——化学与化学工程面临的挑战

〔美〕21 世纪化学科学的挑战委员会 著

陈尔强等 译

梁文平 审校

科学出版社

北 京

图字:01-2004-0305

内 容 简 介

本书是美国政府关于化学科学的发展报告。由美国国家研究委员会及化学科学与技术分委会组织的 21 世纪化学科学的挑战委员会撰写,我国国家自然科学基金委员会化学学部推荐出版,北京大学化学与分子工程学院组织翻译。介绍了目前化学科学的发展状况及 21 世纪的发展方向。内容包括 12 章,即:引言;学科的结构和文化;普通化学键;合成与生产;创造和探索新物质及新转换;物质的化学和物理转化;分离、鉴定、成像以及物质和结构的测量;化学理论及计算机建模;从计算化学到过程系统工程;与生物学及医学的交叉;材料设计;大气及环境化学;能源:以供未来之需;国家安全与个人安全;如何实现我们的目标等。

本书内容适用面广,具有科普性。对于化学、化工界的广大科研人员、学生、项目官员、政策制订者等有较强的参考价值。

图书在版编目(CIP)数据

超越分子前沿:化学与化学工程面临的挑战/[美]21 世纪化学科学的挑战委员会著;陈尔强等译,梁文平审校—北京:科学出版社,2004

ISBN 7-03-013231-9

I. 分… II. ①21…②陈…③梁… III. 化学-研究-进展-世界 IV. O6-1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2004)第 026732 号

责任编辑:周巧龙 黄 海 吴伶俐 / 责任校对:朱光光

责任印制:钱玉芬 / 封面设计:陈 敬

科学出版社 出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

新蕾印刷厂 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2004 年 4 月第 一 版 开本:B5(720×1000)

2004 年 4 月第一次印刷 印张:11 1/4

印数:1—4 000 字数:207 000

定价:30.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换〈环伟〉)

书名: Beyond the Molecular Frontier: Challenges for Chemistry and Chemical Engineering

作者: Committee on Challenges for the Chemical Sciences in the 21st Century

本书根据美国国家科学院出版社 2003 年版次翻译

This is a translation of **BEYOND THE MOLECULAR FRONTIER: Challenges for Chemistry and Chemical Engineering**, Committee on Challenges for the Chemical Sciences in the 21st Century, National Research Council © 2003 National Academy of Sciences. First published in English by National Academies Press. All rights reserved. This edition published under agreement with the National Academy of Sciences.

中译版序

当前我国科技界正在根据“十六大”提出的要求制订 15 年(2006~2020 年)中长期科学技术发展规划,国家自然科学基金委员会化学科学部副主任梁文平教授组织北京大学化学与分子工程学院陈尔强等 21 位有关领域的专家、教授,翻译出版《超越分子前沿——化学与化学工程面临的挑战》一书,具有深远意义。原书是由美国国家研究委员会及其化学科学技术部下属的 21 世纪化学科学的挑战委员会组织编写的。由美国化学会前会长、哥伦比亚大学教授 R. Breslow 和圣巴巴拉加州州立大学教授 M. V. Tirrell 担任编写委员会主任。它是继 1965 年《化学:机遇和需求》(Westheimer 报告),1985 年《化学中的机遇》(Pimentel 报告),1988 年《化学工程的前沿:科研需求与机遇》(Amundson 报告)和 1992 年《The Role of Chemistry and Chemistry Engineering》之后最新的 21 世纪化学和化工发展战略报告,对制订我国的化学和化工发展战略具有重要的参考价值。

本书的书名只有“超越”、“分子”、“前沿”三个关键词,达到了高度概括和简洁之美。第二个关键词点明化学和化工是研究分子的科学,第一个关键词点明 21 世纪化学和化工的研究对象已不限于分子,要超越分子以上的各个层次,直到有组织的化学体系(organized chemical system),包括材料、器件、活的细胞,甚至整个器官(参见原文第 17 页)。超越的另一层意思是要超越化学科学的传统界面,渗透到化学能起重要作用的生命科学、材料科学、能源科学、环境科学、信息科学、国防和安全科学等领域中,与这些领域的科学家们共同作战,促进和加速相关科学技术的发展。第三个关键词点明要超越当代化学的前沿,展望未来的需要和可能的进展,为制订发展战略提供参考。

本书第 3~8 章提出化学要解决的六个基本问题:①合成与生产制造;②物质的化学和物理变化;③分析、分离、识别和控制;④计算和理论;⑤化学与生物学、医学的界面;⑥材料的设计和制作。这六个问题中最重要的是化学合成与生产制造。

我手头还有一份梁文平教授送给我的《化学科学重大科学问题调研报告》第一稿,是中国科学院化学部和国家自然科学基金委员会化学科学部为了我国中长期科学技术发展战略规划的需要而编写的。这份报告的内容分为三个综合性的重大科学问题和六个专题:①合成与反应化学;②材料化学;③化学生物学;④分析科学;⑤过程与产品工程;⑥理论和计算化学。

该份报告和《超越分子前沿——化学与化学工程面临的挑战》是在差不多同一时期(2001~2003 年)、为了相似的目的(我国的规划比美国的展望更加明确和具

有指导意义)、用差不多相类似的调查和集思广益的方法,但却是在两个国家分别独立编写完成的,而提出的六个基本问题及其思路和见解却有惊人的相似性。例如,两份报告都超越了无机、有机、分析、物化、高分子、化学工程等的传统学科分类法,都把合成化学放在化学和化工的核心地位,都重视现代分析化学、化学生物学、材料化学、计算和理论化学,都赞成把化学和化工结合起来。这说明我国化学和化工的学术界是充分了解化学和化工的国际发展前沿和未来趋势的,是和国际接轨的。

《超越分子前沿——化学与化学工程面临的挑战》的第3~11章是经线,每一章都按照下列四条纬线来编写:①目标;②发展现状;③未来的机会与挑战;④这一问题为什么重要?《化学科学重大科学问题调研报告》提出的六个专题是经线,它的纬线是每个专题分战略意义、现状和发展趋势、战略目标、优先发展的研究方向等四个方面来写。所以两个报告也有相似性。

另外,我们的报告还只是第一稿,尤其是与国民经济和可持续发展直接有关的主要化学问题,相当于该书第9~11章的内容:大气及环境化学;能源:以供未来之需(已列入专题报告1);国家安全与个人安全,这些内容还有待编写。特别是与国家安全和人民安全有关的化学问题,在我们过去的规划中,没有给予应有的重视。另外,与化学和化工有关的资源保护、优化利用和可持续发展问题可否也设一专题?

该书的第12章提到采取哪些方式来提高化学和化工的效率,以更好地为人类的福利做出贡献。建议化学家和化学工程师应该更加致力于与媒体,以及幼儿园以上的学生保持有效的沟通。书中提到“化学”很少在新闻媒体露面(Chemistry is to a large extent invisible in newspapers, news magazines, television and radio, 英书原书第184页)。这句话提得多么切中时弊呀!

媒体大量报道的世纪之交的伟大科学工程——人类基因组计划,实际上是用现代分析化学技术对基因进行化学测序的。但社会人士不知道化学在人类基因组计划中所起的关键作用。同样,媒体报道古老的DNA可以在试管中复制的PCR技术,在考古学和刑事侦察学上是一个重大的技术。人们都认为这是生物技术,实际上却是获得1993年诺贝尔化学奖的化学技术。在这些重要新闻中,化学都未露面。所以,该书内容概要部分(第3页)写道:“现代生物学的很多,事实上是,大部分进展都依赖于作为生物现象基础的化学发现。”由此可见,现代生命科学的发展和化学的发展有着非常密切的关系,但由于化学在新闻报道中很少“露面”,多数中学生和他(她)们的家长老师并不知道,难怪北京一位中学生向诺贝尔化学奖获得者Kroto教授提问:“大家都说21世纪是生命科学的时代,那么我们学化学有什么用呢?”

在自然科学中,化学与人类生活的关系远比天文学和考古学更为密切,但天文学和考古学在报刊上“露面”的机会却比化学多。“化学很少在新闻媒体露面”这个现象实在值得我们深思!部分原因是我们化学家和化学工程师不善于向媒体介绍他(她)

们的研究成果。由于化学很少在媒体“露面”，社会上在谈论 21 世纪是信息科学和生命科学大发展的时候，很少提到化学在其中的重要作用。人们不知道化学在 20 世纪干了些什么，甚至提出“21 世纪的化学何去何从的疑问”。

报刊上常说 20 世纪发明了六大技术：①信息技术；②生物技术；③核科学和核武器技术；④航空航天和导弹技术；⑤激光技术；⑥纳米技术。但却很少有人提到包括合成氨，合成尿素，合成抗生素、新药物、新材料和高分子的化学合成技术。

上述六大技术如果缺少一二个，人类照样能够生存。但如果没有哈勃在 1909 年发明的用钨作催化剂的高压合成氨技术，把空气中的氮气充分利用起来，世界粮食产量至少要减半，维持 60 亿人口的生存就成了严重问题。哈勃因而在 1918 年获得诺贝尔奖。C. 博施因改进了哈勃流程，获得 1931 年诺贝尔奖。所以，英国传媒把“Haber Process”评为 20 世纪最重大的发明。

如果没有合成各种抗生素和大量新药物的技术，人类就不能控制传染病，无法缓解心脑血管病，平均寿命就要缩短 25 年。如果没有合成纤维、合成塑料、合成橡胶的技术，人类生活质量就会受到很大影响。信息技术的核心是集成电路芯片，这是化学合成的硅单晶片经过光刻生产的，计算机的存储器材料也是化学合成的，其他部件用了大量合成高分子材料。又如核电站的关键是核燃料，而核燃料铀、钚等的生产和后处理、废水处理等都是化学工业。激光、航空、航天、导弹和纳米等技术无不需化学合成的高新材料。所以，如果没有化学合成技术，上述六大技术根本无法实现。这些都是无可争辩的事实。

原书第 186 页还提供了一个有意义的数字。1999 年，在美国从事物质科学（除生命科学和信息科学外的自然科学，包括力学、物理学、化学、天文学、地球科学等）研究的博士以上毕业生有 110 300 人，其中化学为 55 810 人，占 50.6%。这个数据说明社会对化学的迫切需要。

但中学生和家长们对此缺乏了解，认为化学是古老的学科，是造成环境污染的“祸首”。这就影响到中学生报考大学选择专业的志愿。现在大学化学专业的招生录取线已比 20 年前大幅度降低。如果缺少优秀的中学生来报考化学和化工专业，那就要影响 21 世纪的化学科学以及与之密切相关的科学的发展。所以“化学很少在媒体露面”不是一件小事。我衷心希望在这次制订的我国中长期化学发展战略规划中，一定要把化学和化工的总目标和提出的每一个问题的战略意义，用政府领导、隔行的科学家、社会人士、新闻媒体和中学生能够了解的语言，而不是只有化学和化工专家才能懂得的专门术语，把“这一问题为什么重要？”讲清楚，并且希望化学和化工界人士多与媒体、中学生和中学老师们沟通，多给媒体写些文章，多做些科普报告，促使化学和化工在报刊上多露面，恢复化学正在蓬勃发展的美好形象。

未来的化学除了要超越分子层次、学科界面和研究前沿这三个上面已经提到的“超越”以外，还有三个新的“超越”。这就是：①超越自然界已有的物质，去创造

未知的新物质。现在 CA 登录的已知分子数是几千万(10^7)的量级,有人估计可能存在的,与典型的药物分子大小相似的分子数的量级是 10^{200} (参见原书第 23 页。这个估计我认为太大了,也有小的估计,是 10^{30})。当然,我们不会都去合成它们,而是要严格筛选,“优生优育”。假如筛选的比例是 $1/10^{20}$,也会有 10^{10} 的“优秀分子”有待化学家和化学工程师去创造和合成,从而为人类造福。这说明化学化工的工作领域是十分广阔的。②超越尺度的常规限度。例如,时间的范围可以研究长达亿万年的地质反应;也可以探索小到飞秒级的选键反应,直接观察化学键断裂和生成的详细情况。分析化学和合成化学的方法,可以打造进行微流控生物化学分析的芯片,或建立合成、分离和测定大量化合物的一条龙超微实验装置。另外,因为规模化可使成本降低,所以在石油化工和冶金生产领域,规模越来越大。此外,超越常规的实验条件,在极端条件下进行反应,从而创造前所未见的新物质,也是研究前沿的一个方向。③超越化学科学不仅仅建设物质文明,还要关怀人文、关心人民健康、国家安全,创造化学文化。未来的精细化工厂,将是一个花园式的度假村。所以“化学的江山如此多娇,将引来无数青年英雄竞折腰!”

我衷心希望有更多的优秀青年投身到化学与化工的事业中来。为了完成“十六大”规定的建成全面小康社会的光荣历史任务,化学家和化工学家必须一如既往地努力奋战,“富有野心和侵略精神”(ambitious and aggressive)地开拓化学科学的前沿阵地,为中华腾飞和造福人类做出应有的贡献。青年科学家向科学进军,必须不畏艰险,富有野心和侵略精神,大胆渗透到交叉领域,创建新的化学阵地;否则就不会有大的成就。

该书也难免有疏漏不当之处,在 15 年后回顾一下,可能有一些非常重大的发明创造,在该书中并未提到。但他山之石可以攻玉,相信我们的化学发展规划一定会做得更好。

该书还有一个特色,就是它的表达方式(presentation)非常好,对阅读该书的人们有很大的说服力和吸引作用。这是一位科学家向领导部门或社会人士或新闻媒体汇报工作,向你的实验室的来访客人,或你的未来的学生们介绍你的研究领域,或写基金申请和基金总结时的一项看家本领,值得我们好好学习。科学家要学会能够用任意长短的规定时间(从几分钟到几十小时)把你所从事的,或将要进行的工作内容和意义说清楚,并且要吸引人,有说服力。有的同志尽管研究工作做得很好,但不善于表达。这样的同志,不容易得到社会的(认同和)支持。

以上是我学习该书的心得和对青年读者的期望,如有不当之处,请读者批评指正。

徐光宪

2003. 10. 2 于北京大学

原 书 前 言

项目初始,21 世纪化学科学的挑战委员会对整个化学科学界发出了“21 世纪化学科学的挑战”的调研征询。该征询通过电子邮件的方式发给了许多科学家和工程师;与此同时,另一份综合的调研征询则刊登在《化学与工程新闻》(*Chemical & Engineering News*)刊物上^①。委员会因此收到了许多有价值的回复。此外,委员会在撰写本书时,通过成员个体与其同行的商议,得到了来自更广阔领域的详细与明确的技术上的参与和贡献。本委员会由衷地感谢所有对本项目做出贡献的人们;他们的姓名和单位如附录 C 所示。

本书是在美国国家研究委员会化学科学与技术部的支持下进行的,并得到该组织成员的大力帮助,我们在此一并致谢。

21 世纪化学科学的挑战委员会
联合主席 Ronald Breslow 和 Matthew V. Tirrell

^① “Your Ideas, Please!” Madeleine Jacobs, Editor-in-Chief. *Chemical & Engineering News*, 2000, 78(14)

致谢评审人

本报告根据有关人员的不同观点和技术专长以草案形式送至评审人进行评审,以符合美国研究会报告评审委员会的相关程序。这一独立评审的目的在于提供公正而中肯的意见,以帮助我们尽可能地使报告的正式出版物显得可信,同时也确保该报告在客观性、证据和响应度等方面符合制度标准。评审意见及草案文稿因保护审议程序的诚信而保密。我们感谢以下人员对该报告的评审工作:

Richard C. Alkire, University of Illinois, Urbana-Champaign

John L. Anderson, Carnegie Mellon University

John A. Armstrong, IBM

Edwin A. Chandross, Bell Laboratories

Pablo G. Debenedetti, Princeton University

Louis C. Glasgow, DuPont Company

Louis L. Hegedus, ATOFINA Chemicals, Incorporated

Nancy B. Jackson, Sandia National Laboratories

William Klemperer, Harvard University

Tobin J. Marks, Northwestern University

Kathlyn A. Parker, SUNY, Stony Brook

Michael P. Ramage, Exxon-Mobile (retired)

Martin Saunders, Yale University

Randy Schekman, University of California, Berkeley

Gabor A. Somorjai, University of California, Berkeley

Karl K. Turekian, Yale University

Paul S. Weiss, The Pennsylvania State University

虽然以上评审人对报告提出了许多建设性的意见和建议,他们并没有被要求认可报告中有关结论或建议,也没有在报告正式出版前看到最后的修订版本。本报告的评审由耶鲁大学 Pierre C. Hohenberg 和芝加哥大学 R. Stephen Berry 统审。他们受美国国家研究委员会的任命,负责本报告的独立审查。统审过程既符合有关制度程序,又慎重考虑了所有评审意见。本报告的最后内容由撰写委员会及其所在的机构全权负责。

目 录

中译版序

原书前言

致谢评审人

0 内容概要	(1)
1 引言	(9)
2 学科的结构和文化:普通化学键	(13)
3 合成与生产:创造和探索新物质及新转换	(17)
3.1 目标	(17)
3.2 迄今的进展	(19)
3.3 未来的挑战和机遇	(22)
3.4 这一切为何重要	(31)
4 物质的化学和物理转化	(32)
4.1 目标	(32)
4.2 迄今的进展	(33)
4.3 未来的挑战和机遇	(41)
4.4 这一切为何重要	(42)
5 分离、鉴定、成像以及物质和结构的测量	(44)
5.1 目标	(44)
5.2 迄今的进展	(45)
5.3 未来的挑战和机遇	(54)
5.4 这一切为何重要	(55)
6 化学理论及计算机建模:从计算化学到过程系统工程	(56)
6.1 目标	(59)
6.2 迄今的进展	(64)
6.3 未来的挑战和机遇	(70)
6.4 这一切为何重要	(73)
7 与生物学及医学的交叉	(75)
7.1 目标	(75)

7.2	迄今的进展	(82)
7.3	未来的挑战和机遇	(87)
7.4	这一切为何重要	(95)
8	材料设计	(97)
8.1	目标	(97)
8.2	迄今的进展	(99)
8.3	未来的挑战和机遇	(109)
8.4	这一切为何重要	(116)
9	大气及环境化学	(117)
9.1	目标	(117)
9.2	迄今的进展	(118)
9.3	未来的挑战和机遇	(123)
9.4	这一切为何重要	(126)
10	能源:以供未来之需	(127)
10.1	目标	(128)
10.2	迄今的进展	(128)
10.3	未来的挑战和机遇	(134)
10.4	这一切为何重要	(135)
11	国家安全与个人安全	(136)
11.1	目标	(137)
11.2	迄今的进展	(137)
11.3	未来的挑战和机遇	(138)
11.4	这一切为何重要	(142)
12	如何实现我们的目标	(143)
12.1	化学家与化学工程师	(143)
12.2	教育者	(146)
12.3	媒体	(147)
12.4	公众	(147)
12.5	政府与私立基金	(148)
12.6	工业界	(150)
12.7	重大挑战	(151)
	附录	(155)

附录 A 筹划指导委员会成员简介	(155)
附录 B 任务声明	(158)
附录 C 贡献者名单	(159)

我们中间有谁会不乐于揭开遮住未来的面纱？又有谁会不乐于窥见我们科学的下一次进步及其在未来几个世纪中的发展奥妙？

David Hilbert, 1900, 巴黎

0 内 容 概 要

本书承袭了上半个世纪的传统——对化学科学的情形做一个阶段性的检查：我们目前所处的状态、我们如何获得今日的成就、我们又将走向何方？这些研究是受联邦机构的委托，由国家研究委员会(National Research Council)及其化学科学技术部(Board on Chemical Sciences and Technology, BCST)进行的。这一研究成果可被与化学领域相关的学生和科研人员、机构官员以及政策制订者在制订其议程和推进其研究领域时所采用。早期的化学科学方面的回顾报告包括：《化学：机遇和需求》^①(Westheimer 报告)、《化学中的机遇》^②(Pimentel 报告)以及《化学工程的前沿：科研需求与机遇》^③(Amundson 报告)。

本书概括了 21 世纪化学科学的挑战委员会对上述问题的研究成果，但脱离了往常那种将化学和化学工程分裂成不同学科的做法。在这里，跨越整个化学科学领域的活动，如研究、发现和发明——从基础的分子水平的化学到大规模的化学过程技术——被融合在一起。这反映了这一领域的变化：大学中化学和化学工程的研究与教育之间的协同配合与强烈结合，以及化学家与化学工程师在工业界合作的模式。本书使用“化学科学”，或者偶尔地用“化学科学和工程”来代表化学家和化学工程师的工作范围。第 2 章讨论了化学和化学工程的学科结构，以探究它们对未来发展的意义。我们的结论是科学已经越来越表现为学科交叉，关键问题是不应让专业学科结构阻碍未来化学科学向新领域的拓展。此处，跨学科的定义不仅是指在化学科学内从分子水平到过程技术水平的结合，同时也指包括所有农业、环境科学、医学、材料科学、物理、信息技术以及其他许多工程领域在内的学科与化学科学的交叉。

本书的第 3~11 章讨论了或基础或应用的化学和化学工程领域中的特殊问题。每一章均以列举一些未来的重要挑战开头，然后讨论该领域的目标，以及迄今为止与这些目标相关的进展，接着是来自未来的挑战与机遇，最后说明其重要性。

第 3 章考察了合成与生产制造，并重点强调了化学科学的特质。化学的一个

① National Research Council. Chemistry: Opportunities and Needs. Washington D C: National Academy Press, 1965

② National Research Council. Opportunities in Chemistry. Washington D C: National Academy Press, 1985

③ National Research Council. Frontiers in Chemical Engineering: Research Needs and Opportunities. Washington D C: National Academy Press, 1988

重要目标是创造自然界并不存在的分子和材料。正如宇航员努力尝试研究和理解星球的内在奥秘一样,化学家和化学工程师探求支配原子和分子的性能与反应的基本规律。但是在化学科学领域,我们通常也将研究目标拓广至超越什么是通过合成确实存在的以及什么是能够存在的,并延伸至新型化学产品的生产制造上。合成化学结合了这两个方面。化学家和化学工程师通力合作发现新的方式、方法以创造新的分子并生产它们——不管这些分子是否产生新物质,或者它们仅仅只是一些已知物质的新来源。设计并合成新物质的能力提供了改善自然界原有物质的可能性——这包括已有的成就和未来的机遇两个方面,它们涵盖了从治病救人的药物到那些让我们生活得更安全更快乐的材料。我们认为合成与过程工程在化学领域中起着核心的作用。合成是生成物质的关键,而大规模的化学过程是大多数化学技术得以发展和实现的唯一途径。

第4章讨论了物质的化学和物理转化。此两种转化既出现在环境和活的有机体中,又存在于化学科学家发明创造的物质之中。这类对转化的研究渗入各个层面,从对自然界存在的催化剂(如酶)的基本理解到工业过程上对新催化剂的设计和利用。一个世纪前,化学家刚刚开始从原子、分子和化学键的角度来解释化学转化,而现在他们却设法观察单个分子在反应中的细节。在材料的化学和物理加工中同样发生了巨大的变革,人们可以在分子间作用力的基础上理解物质的性能和流体特征。这些基本认识有助于设计具有空前可靠性的制造生产方式。此外,无论在合成或是制造上,生物化学方法也日渐重要。

可测量的时间尺度也经历了显著的演变。100年前,要测量在1s内发生的事件是困难的;在20世纪中期,这个时间极限也不过只有几个数量级的变化。但是,正如第4章所描述的,化学科学上的进展使我们能够在飞秒(10^{-15} s)的时间尺度上进行科学研究——这一尺度则正好对应了具体的化学键成键或断裂的过程。我们认为,有机会详细地认识化学反应途径和物理转化机理代表了未来一种激动人心的机遇,这将补充我们所处领域的基础科学内容,也将提高我们调制实际应用中有关反应和过程的能力。

第5章广泛讨论了分析领域的问题,包括分离、识别、成像和测量化学物质并确定其分子结构。分析能力和方法学上的变化令人惊叹。一个世纪前, Jacobus Van't Hoff 和 Emil Fischer 因提出碳四面体结构的理论并通过合成葡萄糖的8个立体异构体确证该理论而分别获得最早的两个诺贝尔化学奖。这些“简单”化学结构的确定花费了多年的辛勤工作。到20世纪中期,光谱技术可以研究远为复杂的结构,并在低得多的水平上对结构进行探测。但那时百万分之一的测量仍是一个挑战,即使在20世纪60年代核磁共振技术出现之后,结构确定也不容易。此后,化学仪器以惊人的发展方式改变着测量的界限。测量速度从几个小时减少到几分之一秒,并且可以为多个样品的测量提供快速高通量的测量结果。新的测量

技术也提高了对实时化学过程的控制能力。日常的化学分析对样品的需求量不再是 1g(或是更多),而是毫克或是微克级的。可分析测量的分子尺度也从仅有的几百道尔顿的有机分子转向比有机分子大百万倍的蛋白质和核酸高分子。同时,现代分析仪器的灵敏性也使探测的限度从摩尔水平迈向单个分子,而这意味着超出 20 个数量级的改变。我们认为,分析和结构表征领域代表着重要的也是令人激动的需求、机遇和挑战。例如,探测环境中存在的有毒或爆炸性物质、发现地雷、通过实时监控让化学过程提高效率并对环境友好等。

第 6 章涉及从最基本的方面到生产制造中的计算和理论。计算机革命使接近以下一系列目标成为可能:预测未知物质的性能、预测化学和物理过程的途径,以及设计生产制造有用物质的最优过程。但是这些目标尚未完全实现。若能实现这些目标,并且能应对该领域的挑战,我们就能极大地缩短研发时间来生产制造新物质,并因此跨越大量的经验性、实验性的尝试,从而最理想地满足诸如医学和先进材料领域的要求。我们认为这一研究领域蕴藏着巨大的前景和重要性,而且应尽力追求这方面的机会。

从对生物分子的基本认识到现代农业中化学的贡献,再到药物化学对人类身体健康发挥的重要作用,第 7 章描述了化学与生物和医学的交叉。现代生物学的很多,事实上是大部分进展都依赖于作为生物现象基础的化学发现。在无数的发现中,我们可以列举 DNA 的分子结构和人类基因组的排序。可是要充分认识生物过程中的化学仍然需要我们不懈努力。现代医药化学家已经发明、化学工程师也已经知晓如何生产制造那些让我们征服疾病的许多药物,但是还有很多工作要做。新技术(诸如通过微阵列芯片技术进行基因分类)正在驱动生物化学的进展,而其他的技术(诸如组织再生工程)也从生物化学的进展中凸现出来。我们认为这一领域无论对基本的科学发现还是对治愈人类疾病的挑战和机遇都极其重要。

第 8 章涉及材料的设计和制作,是一个化学和化学工程起核心作用的领域;这与建立在化学、化学工程、电子工程和物理之上的材料科学也有相当的交叠。我们已经熟悉当今的塑料、涂料、织物和电子材料等,但未来的机遇和挑战依然存在。譬如,一些具有超导性能的材料一旦能够实际用于长距离大电流的运输而没有阻抗损失,将对我们的生活产生深刻的影响。我们认为,有关新材料(它们有鼓舞人心的新性能)的发明和制造将使这一领域在未来充满研发的机会。

第 9 章讨论了大气和环境化学,它们同时面临来自基础和实用两大领域的挑战。在基础领域,化学家、化学工程师和环境化学家要探究发生在我们这个星球(如大气、海洋、河流、湖泊以及地球本身)的具体化学内容。这部分也是认识我们居住生活的这个世界的一般动力,但是还有一些实际的考虑因素。我们必须在人口增长、对现代技术产品不断需求的前提下学会生存,而同时又要保证不伤及我们所处的环境。我们的目标是一个能够安全地为全社会供给能量、化学品、材料和制

造物的充分可持续发展的系统,既不发生不可逆的地球珍稀原料的耗竭,也不因非健康的副产物而污染我们的地球。我们认为由面临该领域的挑战而产生的基本认识对地球的所有居民以及人类的未来无疑是关键。

第10章涉及能源问题,包括其他替代能源和解决严重污染后果的可能方法。当我们寻求能量的适当来源、能源转换的合理方式以及使用能源的有效手段,我们必须发展一种可持续的途径,既不枯竭我们已有的能源,也不污染我们的环境。我们认为涉及能源的各类挑战非常重要;为了迎接这些挑战,我们需要在基础科学领域有重大的新进展。

第11章讲述国家安全和个人安全,这包括化学科学在应付恐怖威胁中所起的作用,以及国家和个人安全对现今和未来有关化学进展上的依赖。这个领域面临的挑战是严肃的。我们如何发现化学性或生物性的袭击?发现后又将如何应对?如何为我们的陆海空三军和民间的警察提供更好的材料和武器?如何加强普通百姓的安全?我们认为这是一个化学科学尤其核心和相关的领域。

本书的最后一章——第12章,讨论了如何采取措施提高化学和化学工程的效力,从而更好地为人类的福利和认识做出贡献。我们认为,化学家和化学工程师应该做好准备更好地在跨学科领域进行合作,这将改变我们教育未来化学科学家的方式。同时,化学家和化学工程师应该更加致力于与媒体以及幼儿园以上的学生保持有效沟通。我们也呼吁我们的职业能做出更多努力来吸引妇女和少数民族人士。

我们呼吁教育者修改本科和高中教育的化学课程,通过各式各样的趣味内容使它们对学生有更广泛的吸引力;我们也呼吁 K-12(相当于从幼儿园到第12年级即高中毕业)的教师邀请化学工作者向他们的学生介绍那些等待未来科学家的机遇和挑战。我们还呼吁学生尽可能早地介入科学研究,去认识那些让科学家觉得激动人心的东西。

我们呼吁与媒体合作,解释化学科学的成就和目标;我们呼吁广大民众鼓励他们的子女献身科学,帮助解决我们已经界定的挑战。我们呼吁政府机关以及私立基金会除了资助应用科学本身以外,也资助应用科学背后的基础科学。我们呼吁以化学为基础的工业界支持大学研究和教育,并继续开展对环境有重要裨益的“绿色化学”。

我们认为,化学家和化学工程师不仅有一个光荣的过去,也有一个辉煌的未来。但是我们必须与我们的公民更加有效地沟通,我们必须得到他们的支持才能真正做出我们认为可能的贡献。

“21世纪化学科学的挑战”这一项目除了此概述之外还将产生一系列报告。这些报告的每一篇均由单独的委员会通过相关研讨会独立写作而成,它们避免了化学和化学工程之间传统学科的约束。每一个研讨会的组织都围绕了具有社会需