

“十一五”国家重点图书出版规划项目

10000个

科学难题

10000 Selected Problems in Sciences

化学卷

*Chemistry*

“10000个科学难题”化学编委会



科学出版社

www.sciencep.com

“十一五”国家重点图书出版规划项目

# 10000 个科学难题

10000 Selected Problems in Sciences

化学卷

Chemistry

“10000 个科学难题”化学编委会



科学出版社

北京

## 内 容 简 介

《10000个科学难题·化学卷》一书由我国当前活跃在科研第一线的老中青优秀学者、专家编纂,汇集了一批涉及化学科学各分支领域国际发展前沿和热点以及我国经济社会发展需求有待解决的“难题”或问题。全书内容覆盖面广,交叉性强,富有前瞻性、先进性和重要性。书中既阐明了这些难题的科学内涵,指明了探求的方向和思考空间;同时,也反映出我国学者的高学术水平和我国化学科学的显著进步。

本书的读者对象广泛,不仅可作为高校和科研部门研究生基础和應用基础研究的参考选题;也可作为大学生扩大知识领域的参考书;还可作为激发中学生科学兴趣的辅佐读物。同时,也可供有关政府和管理部门的领导和工作人员阅读。

### 图书在版编目(CIP)数据

10000个科学难题·化学卷/“10000个科学难题”化学编委会编. —北京:科学出版社,2009

ISBN 978-7-03-024268-6

I.1 Ⅱ.1… Ⅲ.①自然科学-普及读物②化学-普及读物 Ⅳ.N49  
06-49

中国版本图书馆CIP数据核字(2009)第038326号

责任编辑:黄 海/责任校对:陈玉凤

责任印制:钱玉芬/封面设计:黄华斌

**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>

**中国科学院印刷厂** 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

\*

2009年5月第 一 版 开本: B5 (787 × 1092)

2009年5月第一次印刷 印张: 43

印数: 1—3 000 字数: 837 000

**定价: 128.00 元**

(如有印装质量问题,我社负责调换〈科印〉)

## “10000 个科学难题”征集活动领导小组名单

组 长 赵沁平 刘燕华 李静海 朱道本

副组长 倪维斗

成 员 (以姓氏拼音为序)

冯记春 韩 宇 何鸣鸿 马 扬 王伟中 谢焕忠

杨玉良 叶玉江

## “10000 个科学难题”征集活动领导小组办公室名单

主 任 陈盈晖

成 员 (以姓氏拼音为序)

马晋并 吴晓东 鄢德平 朱蔚彤 朱小萍

## “10000 个科学难题”征集活动专家指导委员会名单

主 任 倪维斗

副主任 李家洋 赵忠贤 孙鸿烈

委 员 (以姓氏拼音为序)

白以龙	陈洪渊	陈佳洱	程国栋	崔尔杰	冯守华	冯宗炜
符淙斌	葛墨林	郝吉明	贺福初	贺贤土	黄荣辉	金鉴明
李 灿	李培根	林国强	林其谁	刘嘉麒	马宗晋	欧阳自远
强伯勤	田中群	汪品先	王 浩	王静康	王占国	王众托
吴常信	吴良镛	夏建白	项海帆	徐建中	杨 乐	张继平
张亚平	张 泽	郑南宁	郑树森	钟 掘	周炳琨	周秀骥
朱作言	左铁镛					

## “10000 个科学难题” 化学编委会名单

学术顾问 徐光宪

主 任 陈洪渊

副 主 任 冯长根 高 松 侯建国 江 明 佟振合 钱逸泰

编 委 (以姓氏拼音为序)

曹少魁	陈洪渊	陈 军	陈接胜	董建华	方维海
冯长根	冯守华	高 松	郭良宏	郭子建	侯建国
黄承志	黄国贤	黄开勋	江桂斌	江 雷	江 明
蒋华良	李 灿	李光宪	梁文平	林昌健	刘晨光
刘 铮	吕 龙	麻生明	马大为	彭孝军	钱逸泰
秦金贵	邵元华	孙世刚	唐睿康	唐 颐	田中群
佟振合	涂善东	涂永强	万立骏	吴晓明	许家瑞
严秀平	杨光富	杨万泰	姚祝军	元英进	张 希
赵新生	周其林	朱俊杰	邹汉法		

## 《10000 个科学难题》序

爱因斯坦曾经说过“提出一个问题往往比解决一个问题更为重要”。在许多科学家眼里，科学难题正是科学进步的阶梯。1900年8月德国著名数学家希尔伯特在巴黎召开的国际数学家大会上提出了23个数学难题。在过去的100多年里，希尔伯特的23个问题激发了众多数学家的热情，引导了数学研究的方向，对数学发展产生的影响难以估量。

其后，许多自然科学领域的科学家们陆续提出了各自学科的科学难题。2000年初，美国克雷数学研究所选定了7个“千禧年大奖问题”，并设立基金，推动解决这几个对数学发展具有重大意义的难题。几年前，中国科学院编辑出版了《21世纪100个交叉科学难题》，在宇宙起源、物质结构、生命起源和智力起源四大探索方向上提出和整理了100个科学难题，吸引了不少人的关注。

科学发展的动力来自两个方面，一是社会发展的需求，另一个就是人类探索未知世界的激情。随着一个又一个科学难题的解决，科学技术不断登上新的台阶，人类社会发展也源源不断获得新的动力。与此同时，新的科学难题也如沐雨春笋，不断从新的土壤破土而出。一个公认的科学难题本身就是科学研究的结果，同时也是开启新未知大门的密码。

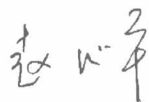
《国家中长期科学和技术发展规划纲要》提出建设创新型国家的战略目标，加强基础研究，鼓励原始创新是必由之路。为了引导科学家们从源头上解决科学问题，激励青年才俊立志基础科学研究，教育部、科学技术部、中国科学院和国家自然科学基金委员会决定联合开展“10000个科学难题”征集活动，系统归纳、整理和汇集目前尚未解决的科学难题。根据活动的总体安排，首先在数学、物理学和化学三个学科试行。

征集活动成立了领导小组、领导小组办公室，以及由国内著名专家组成的专家指导委员会和编辑委员会。领导小组办公室公开面向高等学校、科研院所、学术机构以及全社会征集科学难题；编辑委员会认真讨论、组织提出和撰写骨干问题，并对征集到的科学问题严格遴选；领导小组和专家指导委员会最后进行审核并出版《10000个科学难题》系列丛书。这些难题汇集了科学家们的知识和智慧，凝聚了参与编写的科技工作者的心血，也体现了他们的学术风尚和科学责任。

开展“10000个科学难题”征集活动首先是一次大规模的科学问题梳理工作，把尚未解决的科学难题分学科整理汇集起来，有利于加强对基础科学研究的

引导。其次，这么多科学难题呈现在人们面前，有利于激发我国科技人员，特别是广大博士、硕士研究生探索未知、摘取科学明珠的激情，而这正是我国目前基础科学研究所需要的。此外，深入浅出地宣传这些科学难题的由来和已有过的解决尝试，也是一种科学普及活动，有利于引导我国青少年从小树立献身科学、做出重大科学贡献的理想。

分学科大规模开展“10000 个科学难题”征集活动在我国还是第一次，难免存在疏漏和不足，希望广大科技工作者和社会各界继续支持这项工作，更希望我国专家学者，特别是青年科研人员持之以恒地解决这些科学难题，开启未知的大门，将这些科学明珠摘取到我国科学家手中。



2008 年 12 月

## 序

### ——我通读本书的体会和收获

几天前本书主编陈洪渊院士开完终审编委会后，亲自拿 U 盘把本书全稿拷贝到我的计算机上，使我有幸成为本书的第一位读者。我读了本书后有许多收获和体会，写出来和读者共享。

首先，本书编委会讨论的指导方针很好，从征集到的 400 多条中选出 189 条先行出版，余下的在下次修订后再出版续集。这 189 条的作者都是在第一线做科学研究的高水平学者，所聘编委是在化学界贡献卓著的院士、学者，其中大多数编委是年富力强的中青年学者，在学术上享有高的声誉，思想敏锐，锐意创新。他们抽出宝贵的时间完成这本著作，对建设我国创新型国家作出了重要贡献。我作为本书的第一位读者，有很大收获和启迪，热烈祝贺本书的出版，并对编辑委员会的院士和专家们，以及提供化学难题的学者们致敬，感谢他（她）们对我国化学发展作出的重要贡献！

其次，本书前言第二段给出了 21 世纪化学的新定义和基本任务，简明扼要，有前瞻性，非常恰当。化学的定义和基本任务是与时俱进的。多年来我一直在考虑这个问题，曾经定义 21 世纪的化学为研究广义分子（泛分子）的科学。但物理学是研究物质的各种形态（大到宇宙，小到夸克和电子）及其运动规律的科学，其中也包括广义分子的层次，例如分子物理、凝聚态物理等。现在陈先生定义“化学是一门创造新物质的科学。化学的基本任务是研究物质的组成和结构，阐明物质相互作用的基本规律，揭示和识别天然物质，合成新的化合物。”美国 CAS Registry No 登录的化学物种（chemical species）已达 8000 多万种，其中新识别的生物分子序列占三分之二，新创造的占三分之一。而在 20 世纪开始的 1900 年，这个数字只有 55 万种。所以化学在 20 世纪的 100 年中合成创造和识别了 8000 多万种新分子，是创造新物质最多的学科。其中如合成氨、合成尿素为人类解决粮食问题，合成抗生素等许多新药物，是人类平均寿命延长 30 年的主要原因。合成新材料满足国防、航空航天、核能、信息等高新技术的需要。合成人造纤维、橡胶、塑料等日常生活品。所以这个新定义充分说明化学和数理天地生等基础科学一样，都对人类做出各自的重大贡献。而且这个新定义和物理学没有重复。我强烈推荐中学化学新教材和大学化学教材采用陈先生的新定义。我衷心向高中化学老师们推荐这本新书。近十年来国内外有一种淡化化学的思潮，认为化学是一门老学科，发展前途不大。从本书中可以看出，化学是当前发展最



快的学科之一，它的应用范围也最广。

第三，几个月前陈先生曾给我本书第一稿的打印本，把内容分为六个组，是一个比较好的分组法。但因化学是一个非常复杂的巨系统，任何分组法都不免交叉重复。所以本书最后不予分组，实在是一种很巧妙的处理方法。

本书旨在“高中生有兴趣，大学生能通读，研究生可选题”。其实对于研究生也要先通读，再选题。不但研究生要通读，研究生的导师、高中化学老师们和从事化学研究的学者都值得通读，我自己就从通读中获益良多。这里对研究生读者谈谈我的通读体会，和同学们共同探讨。我的通读方法是，先建立自己的化学知识框架。然后把这 189 个课题分类纳入其中。并和当代化学的国际前沿领域做比较分析研究，从而对当代化学有一个粗线条的了解。我的化学框架是这样的：

可以先分：A 研究对象，B 研究方法，C 研究目的，D 研究层次，共四类。

A 研究对象可分：A1 无机化学。A2 有机化学。A3 前二者的交叉领域，包括配位化学、簇合物化学、金属有机化学、元素有机化学、生物无机化学、催化化学等。A4 高分子化学。A5 化学生物学、生物化学、金属酶化学、蛋白质组学、基因组学、代谢组学等各种组学，以及功能蛋白质设计等。A6 放射化学、核化学、辐射化学等。

B 研究方法可分：B1 合成化学，包括一维、二维、三维和多层次的组装和自组装、组合化学等。B2 分析和分离化学，包括性能测定、监控、各种光谱和光化学分析、各种电化学分析方法、质谱分析法、各种电镜、成像和形貌分析法，在线分析、活体分析、实时分析等，各种物理、化学性能和生理活性的检测方法，萃取、离子交换、色谱、质谱等分离方法，分离分析联用、成分分离分析三联用等。B3 物理化学，包括化学热力学、化学动力学、微观化学动态学、相平衡、溶液化学、胶体化学、表面化学、结构化学、各种波段的谱学、电化学、磁化学等。B4 理论化学，包括量子化学、化学键理论、分子间范德华引力和非共价键的相互作用理论、疏水亲水作用理论、化学统计力学、分子力学、化学反应速度的第一原则理论、广义结构与广义性能的关系理论、纳米尺度效应理论等。B5 计算化学，包括虚拟实验和计算模型、药物设计学、材料设计学。B6 信息化学和系统化学，包括分子编码学、分子谱学数据库及其应用、分子结构信息数据库及其应用、生物分子序列信息库、基因库、蛋白质库、分子信息量的计算、系统化学等。

C 研究目的可分：C1 基础研究，以认识世界为目的。C2~C7 国家目标的各个领域，以改造世界和保护世界为目的。其中 C2 矿物资源和化石能源领域。C3 材料科学领域，包括功能材料、结构材料、生物材料、医用材料等。C4 农业、生物资源、可再生能源领域。C5 生态环境领域，以及环境治理、废物处理的方法，并在源头上减少排放的原子循环经济、绿色化学领域。C6 生命科学领域，

包括人类健康、医药卫生、食品安全领域。C7 国防和天灾、毒品等各种安全领域。

D 研究层次可分：D1 原子层次。D2 分子片层次。D3 结构单元和组装元件层次。D4 分子层次。D5 高分子层次。D6 生物分子层次。D7 超分子层次。D8 尺度层次，特别是纳米尺度层次，以及在合成中控制粒度分布的方法。D9 维度层次，包括一维链、二维膜、二维表面、二维界面、三维空腔结构等。D10 介观的微乳、胶束、反胶束层次及其在萃取分离化学中的应用。D11 分子器件层次，包括分子导线、分子开关、分子反应器等。D12 微流控芯片、微流控化学实验室。D13 分子机器层次，包括分子马达、分子计算机等。D14 宏观固体层次。D15 宏观的液体和溶液层次。D16 宏观的组装器件层次。D17 宏观的人造器官层次。D18 生物活体层次。D19 外界电场、磁场等环境层次。D20 极端条件环境层次，如高压、低温、高能辐照等。

有了这个框架以后，就可把本书的 189 个问题分类纳入框架。下面随取三个问题作为示例。如第一个问题（见 p. 93）：高转化效率的纳米材料太阳能电池属于 A1, B1, C3, D15；第二个问题（见 p. 101）：高效纳米储氢材料属于 A1, B1, C3, D8；第三个问题（见 p. 109）：纳米粒子为单元的多级次程序化组装属于 A1, B1, C1, C3, D8。

这种把书中内容纳入自己框架的方法有下列作用：①引起你学习本书的兴趣；②把书上的东西经过你对各课题的学习、消化、思考、梳理，可以对化学学科有一个粗线条的全面了解，从而启发你的创新思维；③在此基础上可以根据你的兴趣选择你喜欢的课题，从而去选择大学和导师。选择是双向的，大学和研究生导师也要选择你。在口试的时候，你对化学的粗线条了解，并能对一些问题提出看法，导师感觉到你的学术思想活跃，会增加你被录取的机会。

在进了研究生院确定了导师和研究方向以后，具体的选题还是要听取导师的指导，因为导师的了解一般来说比你全面。在抬头看路，明确方向以后，一定要埋头拉车，在你的论文题目的主攻方向，做深入细致的研究，不能再务博，分散你的精力和时间。两者的辩证关系一定要掌握好，听导师指导和独立思考的辩证关系也要掌握好。

以上不成熟的体会仅供研究生读者参考。再次对课题的作者和编委会表达我衷心的感谢和感谢！

徐光宪

于 2008 年 12 月 5 日

## 前 言

“科教兴国，建设创新型国家”，已是我国的基本国策。自改革开放以来，我国科学技术事业大踏步前进，其速度之快令世人瞩目。为了推动我国科技事业的发展，建设创新型国家和培养创新型人才，提高全民族的科技素质，教育部、科学技术部、中国科学院和国家自然科学基金委员会四部门联合发起了“10000个科学难题”征集活动，由教育部科学技术司负责组织实施。征集工作首先从数学、物理和化学三个科学领域开始。这项工作对推进我国科学事业的进步有着重要和深远的意义。

化学是一门创造新物质的科学。化学的基本任务是研究物质的组成和结构，阐明物质相互作用的基本规律，揭示和识别天然物质，合成新的化合物。化学从实验开始，经历了几个世纪的发展，形成了一个非常复杂而有序的巨大综合性系统，可细分成各种门类和层次，其间又相互联结和交叉。根据研究对象、研究内容或研究方法的不同，构成了很多的学科类别。对于这样一个门类繁多、庞大、复杂的化学科学，如何将亟待或有待解决的问题凝炼成科学难题，提出什么样的难题，孰轻孰重，如何把握疑难的程度等等，都曾使我们感到十分困惑。其间，还曾有过不少争议。然而，编委们本着推动科技事业进步的热情和责任，在四部门正确方针的指引下，同时又得到化学界同仁的热情支持，献计献策，特别是得到以徐光宪院士为代表的一批化学界老前辈科学家的鼎力支持和帮助，大家认识到责无旁贷，决心知难而进。徐先生见到编写大纲后立即为本书作了序。其后，又通览全书重新作序，并提出精辟的阅读指导，赐教于读者，使编委们深受鼓舞。

经与数学、物理兄弟学科领域的相互交流，我们很快地在编撰的指导思想、选题范围和内容以及全书的定位等原则问题上取得了共识。对于化学与化工两大领域，我们以化学先行，化工暂缓；不写面面俱到教科书型的著作，而是先按现有传统习惯、未来趋势和当前情况分成六大组，即：（一）无机化学、材料化学、纳米化学；（二）有机化学、农药化学、药物化学；（三）物理化学、能源化学；（四）分析化学、环境化学；（五）高分子化学和物理、高分子材料；（六）化学生物学等六大组。首先，策划这六大组“难题”的条目，并将这六组所提出的“难题”或问题的深度定位在以大学生为主要读者的水准上。所谓“难题”，也并不着意在“难”，而在于能启发大家思考、有科学价值与现实意义并有待解决的科学问题上，而且还考虑不同的层次。本书旨在“高中生有兴趣，大学生能通

读，研究生可选题”；同时，也能为高校老师和研究人员提供在科学研究上有参考价值的材料。

编委会按照传统学科采取分类约稿和自由投稿相结合的方式。同时，编委会的专家订出了编写原则、撰写要求，统一体例，规范文字。在征稿通知发出后，广大工作在化学科研第一线的专家，热情高涨，投稿十分踊跃。提交的稿件经过编委会数次会评、会审，逐条加以审核、修改、整合和梳理，特别关注基本概念准确性；对文字的叙述则不拘泥于同一格调和形式。由于版面的限制和时间的紧迫，我们从 400 多条中选出 189 条先行出版，余下的拟在下次经修订充实后作为续编出版。鉴于所提出的化学“难题”或问题中，各学科间的条目数量不甚均衡，疑难的程度不一，各分支学科的内容又有覆盖或重复，尤其是学科的交叉明显，学科界线已经模糊。所以第一批出版的条目大体上按原征稿的范围放置，但不加学科分类的标题来框定范围，并且前后次序亦作了合理调整，目的在于使读者有一个整体感，让读者“仁者见仁，智者见智”去理解、思考问题的真谛。为了反映难题最后形成的实际情况和避免知识产权的争议，条目署名一律用“撰稿人”方式置于文后。

编撰本书是一次大胆的尝试。编委们怀着一种强烈的时代责任感和使命感为编好本书做了极大的努力，并充分意识到编写好这样的一本书，是一项十分繁重和艰巨的任务。当我们看到这本书即将问世之时，既有一种无比的轻松和满足之感，同时又产生了新的疑虑，担心它能否唤起读者的兴趣，能否达到预期的效果。因为写“难题”的书与一般专著和教科书截然不同，它要面临更多的检验和评说。但是，科学发现和技术进步是无止境的，人的认识也总是不断发展和提高的，很难一次就达到尽善尽美的地步，能引起大家的广泛兴趣、讨论，以至争论，都是我们所希望的好事。

本书的编撰是在以教育部为牵头单位的政府部门的领导下进行，包括选聘编委在内。所选聘的编委包括许多在化学界贡献卓著的院士、学者，他们仍然活跃在科研第一线；而大多数编委和撰稿人则是年富力强的中青年学者，他们有高的学术水平，思想敏锐，锐意创新，在各自领域中已卓有成就。编委会在全书的编撰过程中，始终贯彻“尊重科学、热爱科学、普及科学”的求实精神，以提高广大群众的科学意识。因此，如果本书对普及科学、推动科学进步能起到一点微薄的作用，便是我们极大的收获和欣慰！尤其是期盼吸引广大青年学生将来有兴趣投身祖国壮丽的化学事业，让千变万化、创造新物质的化学科学造福于人类；如果有志青年学生在本书启发下致力于解决某一难题，为化学发展作出贡献，我们会更加欣慰！

可以看到，本书的确体现了我国化学科学的巨大进步，反映出我国化学科学光辉成就的一个侧面和部分缩影。因为书中所提出的化学“难题”或问题，正是

当今国际学科发展的若干前沿和研究热点，也是我国经济社会发展中迫切需要解决的问题。尽管这还是冰山一角，仍足以说明其富有前瞻性、先进性与重要性。本书出版后，我们诚挚地期待着广大读者能指出本书的缺点和不足，以便再版时得到改进和完善。

最后，我们衷心感谢撰写稿件的学者们，他们高的学术水平和认真严谨的科学精神，将镌刻在我国第一部“化学难题”的著作之中，奉献给广大读者；衷心感谢全体编委在征稿、审稿、整合、复审和定稿的一系列漫长过程中所付出的大量时间和精力，这里我特别要提到的是：佟振合院士、钱逸泰院士、侯建国院士、高松院士、张希院士、麻生明院士、梁文平教授、万立骏教授、孙世刚教授、江桂斌教授、赵新生教授、邵元华教授、马大为教授、江雷教授等编委的巨大努力和贡献；衷心感谢教育部科学技术司的领导和科学技术委员会秘书处同志的积极指导和精心的组织协调；衷心感谢科学出版社同志的大力支持和卓有成效的工作。本书凝聚着所有参与者同心同德、锐意创新、团结合作、无私奉献的精神，是集体智慧的结晶。它的出版是编者奉献给我国广大热爱科学读者的一份厚礼。

陈洪渊 谨识

2008年12月10日

# 目 录

## 《10000 个科学难题》序

### 序

### 前言

晶体缺陷的测定及其与固体性质的关系·····	陈接胜	李新昊 ( 1 )
无机有序多孔材料的设计合成·····		霍启升 ( 4 )
金刚石的化学合成·····		钱逸泰 ( 9 )
高透量无机分离膜的制备·····		朱广山 ( 13 )
上转换发光材料及其应用·····	严纯华	孙聆东 ( 16 )
高性能非线性光学材料·····		毛江高 ( 20 )
高压化学·····		刘晓旻 ( 23 )
动力学稳定的高能材料·····	张 闻	熊仁根 ( 26 )
手性自发拆分的预测与调控·····	卜显和	章 慧 ( 29 )
金属-金属 (多重) 键·····	陈接胜	张 锋 ( 32 )
基于分子磁性的分子自旋电子学研究·····	王炳武	高 松 ( 38 )
可用于量子计算机的分子磁体材料的设计合成·····		陶 军 ( 43 )
有机导电磁体·····		秦金贵 ( 46 )
多铁分子材料·····		王哲明 ( 49 )
功能配合物的可控合成·····	左景林	杨国昱 ( 54 )
分子间弱相互作用与功能超分子材料的调控·····		孟庆金 ( 57 )
分子影像材料·····		李富友 ( 61 )
智能配位聚合物分子材料·····		童明良 ( 64 )
过渡金属促进的硼-氢键活化·····		燕 红 ( 67 )
金属药物的作用机理·····		杨晓达 ( 73 )
金属酶模拟·····		毛宗万 ( 76 )
硒蛋白的结构、功能与化学模拟·····		黄开勋 ( 79 )
重元素的相对论效应·····	陈接胜	李新昊 ( 83 )
复杂材料的第一原理电子结构方法所面临的挑战·····		蒋 鸿 ( 86 )
水结构之谜·····		房春晖 ( 90 )
高转化效率的纳米材料太阳能电池·····	孟庆波	林 原 ( 93 )
高效的光分解水制氢纳米材料·····		邹志刚 ( 97 )

高效纳米储氢材料·····	王 平 (101)
新型碳纳米材料·····	李 彦 (105)
纳米粒子为单元的多级次程序化组装·····	唐智勇 (109)
生物无机材料的仿生化学·····	唐睿康 (112)
超高比容量锂离子电池的纳米电极材料·····	陈 军 (116)
固态电极离子/电子输运过程及其耦合机理·····	杨 勇 (120)
燃料电池新型质子交换膜·····	刘孟峰 (122)
能源转换中的非铂催化剂····· 孙世刚 周志有	田 娜 (126)
新型染料敏化太阳能电池·····	陶占良 (129)
由二氧化硅化学法一步制备高纯硅····· 肇 极	李 灿 (133)
氢的安全高效储存·····	陈 军 (136)
金属氢的制备·····	沈 健 (140)
煤炭的低成本气化技术·····	张晓伟 (142)
纤维素的低成本、规模化制备燃料乙醇·····	崔立峰 (145)
界面有机光电效应····· 侯建国	董振超 (148)
过渡金属催化剂上 $N_2$ 催化加氢成氨的作用机理问题····· 张鸿斌	蔡启瑞 (152)
催化剂活性基团的仿生组装·····	伏再辉 (156)
多相催化反应机理和活性中心的表征····· 陈明树 翁维正	万惠霖 (159)
甲烷选择氧化制有机含氧化合物的高效催化体系····· 王 野	万惠霖 (163)
电催化表面结构效应·····	孙世刚 (167)
减少机动车尾气污染的新型催化剂·····	王亚军 (171)
温室气体的捕集、储存和转化·····	张 涛 (174)
石油生物催化脱硫·····	蒋宗轩 (177)
高效率热电材料·····	陶占良 (180)
超高密度信息存储材料·····	宋延林 (184)
有机分子磁体·····	贾丽慧 (188)
多功能内集成的单分子器件····· 赵爱迪	侯建国 (190)
材料老化过程的化学动力学····· 涂善东	王卫泽 (193)
无机晶体结构预测·····	王泉明 (196)
材料/细胞界面结构及相互作用·····	林昌健 (199)
复杂体系的腐蚀电化学研究·····	林昌健 (201)
富勒烯的形成机理·····	谢素原 (203)
材料合成中分子有序组合体模板的机理问题·····	郭 荣 (206)
分子有序组合体的理论模拟与设计·····	郭 荣 (208)
表面增强光谱学的统一理论····· 田中群	吴德印 (210)

表面手性结构的形成、识别与控制	陈 婷	万立骏 (214)
电化学界面结构的理论模型	吴辉煌	田昭武 (217)
超临界流体中的微观聚集行为对化学反应热力学性质的影响	韩布兴	(220)
水在生命化学过程中的作用	贾国卿	李 灿 (223)
分子反应的本质和控制		王鸿飞 (226)
时间分辨的化学反应动力学		杨学明 (229)
非正交轨道的价键理论 Hamiltonian 矩阵计算	吴 玮	(231)
密度泛函理论及其应用	张 颖	徐 昕 (234)
普适的线性标度第一性原理电子结构理论	杨金龙	侯建国 (237)
能同时处理强相互作用和弱相互作用的密度泛函理论		
..... 袁岚峰 杨金龙 侯建国		(240)
从弱到强电子耦合强度下的电子转移动力学和速率理论	赵 仪	(244)
碳-氢键的活化	施章杰	(247)
碳-碳键的活化	施 敏	(251)
二氧化碳的固定和活化	吕小兵	(254)
氮气的固定与活化	施章杰	(258)
有机化合物的直接氟化	胡金波	(263)
“绿色”氧化	刘国生	(267)
新型反应介质	游书力	李 毅 (270)
自由基、卡宾的选择性控制	王剑波	(274)
有机金属络合物催化性能的预测	龚流柱	王中夏 (278)
串联反应及多组分反应	王彦广	(282)
多样性导向的有机合成	柏 旭	(287)
手性起源	肖文精	陈加荣 (290)
手性催化	周其林	(295)
活性天然产物的高效合成	杨 震	(298)
多糖/寡糖的固相合成	连高焱	俞 颢 (301)
天然产物的快速分离鉴定	岳建民	(304)
有机反应的时间分辨	杨国强	(307)
分子识别和自组装	刘 育	(310)
分子间弱相互作用的选择性和方向性	黎占亭	(314)
超分子体系中的电子转移和能量传递	吴骊珠 佟振合	陈 彬 (317)
光合作用的化学机制与应用	刘 扬	(321)
手性农药	刘维屏	徐 超 (325)
“绿色”农药的分子靶标	杨 青	钱旭红 (328)



- 农药的生物合理设计····· 杨光富 (331)
- 农药的剂量传递····· 袁会珠 杨代斌 (335)
- 链式缩聚反应····· 耿延候 袁金颖 隋晓锋 (339)
- 螺旋选择性自由基聚合反应····· 宛新华 (344)
- 非石油路线合成高分子····· 王献红 (347)
- 聚电解质的构象变化····· 张广照 (351)
- 高聚物中的玻璃化转变现象的本质····· 黄定海 (354)
- 大分子体系的非晶液-固相转变····· 安立佳 孙昭艳 石彤非 (359)
- 链状大分子半结晶织态结构的调控····· 胡文兵 (363)
- 高分子固体中的链缠结与网络结构····· 那 兵 傅 强 (367)
- 光子学聚合物的构筑····· 张其锦 (370)
- 聚合物光子晶体····· 宋延林 (374)
- 聚合物太阳能材料····· 陈红征 施敏敏 (378)
- 共轭聚合物分子的电荷传输机理····· 胡文平 (382)
- 模拟生物大分子聚集体功能的大分子自组装····· 史林启 (386)
- 高分子仿酶中识别与催化的协同性····· 刘俊秋 (389)
- 生物材料的血液相容性····· 计 剑 (392)
- 人工肌肉材料····· 徐 坚 (395)
- 仿生自修复高分子材料····· 章明秋 容敏智 许家瑞 (399)
- 生物合成高分子材料的基础问题····· 陈国强 (403)
- 智能和靶向性医用高分子····· 陈学思 肖春生 田华雨 庄秀丽 景遐斌 (407)
- 骨修复中的组织工程技术·····  
 ······ 章培标 陈学思 王 宇 崔立国 庄秀丽 景遐斌 (412)
- 分析化学中的若干科学问题····· 许丹科 陈洪渊 (416)
- 实时动态检测细胞内多分子相互作用的荧光共振能量转移体系的建立·····  
 ······ 李爱芳 江云宝 (419)
- 获取蛋白质的结构与功能信息的新方法····· 马会民 (422)
- 可以直接给出分子结构的高分辨成像技术····· 张新荣 张四纯 (425)
- 自由基动态原位检测与调控细胞功能研究····· 唐 波 (428)
- 卤键在化学和生物分子识别中真的很重要吗····· 晋卫军 (431)
- 金属纳米粒子的等离子体共振散射及其筛选、纯化····· 凌 剑 黄承志 (434)
- 可控电化学信号放大方法研究····· 郭良宏 邵元华 (437)
- 生物分子界面电子转移的基本行为与特征····· 夏兴华 (440)
- 细胞之间信号传导的量化····· 黄卫华 程介克 (443)
- 糖生物学与蛋白质糖基化研究中的分析方法····· 鞠焜先 (447)