



2009-2010

*Report on Advances in
Crystallography*

中国科学技术协会 主编
中国晶体学会 中国硅酸盐学会 编著

中国科学技术协会
中国晶体学会
中国硅酸盐学会

晶体学
科技发展报告

中国科学技术出版社





2009-2010

晶体学

学科发展报告

REPORT ON ADVANCES IN CRYSTALLOGRAPHY

中国科学技术协会 主编

中国晶体学会 中国硅酸盐学会 编著

中国科学技术出版社

· 北 京 ·

图书在版编目(CIP)数据

2009—2010 晶体学学科发展报告/中国科学技术协会主编;
中国晶体学会,中国硅酸盐学会编著. —北京:中国科学技术出
版社,2010.4

(中国科协学科发展研究系列报告)

ISBN 978-7-5046-5004-7

I. ①2… II. ①中…②中… III. ①晶体学—技术发
展—研究报告—中国—2009—2010 IV. ①O7—12

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2010)第 043186 号

本社图书贴有防伪标志,未贴为盗版。

中国科学技术出版社出版

北京市海淀区中关村南大街 16 号 邮政编码:100081

电话:010-62173865 传真:010-62179148

<http://www.kjpbooks.com.cn>

科学普及出版社发行部发行

北京凯鑫彩色印刷有限公司印刷

*

开本:787 毫米×1092 毫米 1/16 印张:11.25 字数:270 千字

2010 年 4 月第 1 版 2010 年 4 月第 1 次印刷

印数:1—2000 册 定价:34.00 元

ISBN 978-7-5046-5004-7/O · 147

(凡购买本社的图书,如有缺页、倒页、
脱页者,本社发行部负责调换)

2009—2010
晶体学学科发展报告
REPORT ON ADVANCES IN CRYSTALLOGRAPHY

专 家 组

组 长 林建华

副组长 王大成 王继扬 陈小明 苏晓东
陈小龙 彭练矛

成 员 (按姓氏笔画排序)

柴继杰	陈久桐	丁建平	董宇辉	冯云龙
葛云程	龚为民	杭寅	何建华	洪茂椿
胡章贵	黄明东	姬洪	来鲁华	李明
李一志	廖立兵	刘景和	刘世雄	刘志杰
吕扬	罗豪甦	麦振洪	牛立文	潘峰
乔园园	饶子和	邵鹏柱	沈月全	施一公
宋海斌	苏成勇	陶绪堂	滕脉坤	王聪
王牧	王颖霞	王占山	王哲明	翁林红
吴东	吴小山	吴新涛	吴以成	徐现刚
薛冬峰	杨德仁	叶宁	尹长城	曾令民
张泽	赵景泰	赵彦明	郑和根	郑伟涛
朱世富				

学 术 秘 书 杨娜 陈冲

序

当今世界科技正处在一次新的革命性变革的前夜。人类迫切需要创新发展模式和发展途径,创新生产方式和生活方式,开发新的资源。这样的需求和矛盾,强烈呼唤着新的科学技术革命。而全球金融危机所带来的世界经济、产业格局的大变化,很可能会加快新科技革命的到来。学科创立、成长和发展,是科学技术创新发展的基础,是科学知识体系化的象征,是创新型国家建设的重要方面。深入开展学科研究,总结学科发展规律,明晰学科发展方向,对促进学科的交叉融合并衍生新兴学科,继而提升原始创新能力、加速科技革命具有重要意义。

中国科协自 2006 年开始启动学科发展研究及发布活动,连续完成了每个年度的学科发展研究系列报告编辑出版及发布工作。2009 年,中国科协组织中国气象学会等 27 个全国学会分别对大气科学、古生物学、微生物学、生态学、岩石力学与岩石工程、系统科学与系统工程、青藏高原研究、晶体学、动力与电气工程、工程热物理、标准化科学技术、测绘科学与技术、烟草科学与技术、仿真科学与技术、颗粒学、惯性技术、风景园林、畜牧兽医科学、作物学、茶学、体育科学、公共卫生与预防医学、科学技术史、土地科学、智能科学与技术、密码学等 26 个学科的发展研究,最终完成学科发展研究系列报告和《学科发展报告综合卷(2009—2010)》。

学科发展研究系列报告(2009—2010)共 27 卷,约 800 万字,回顾总结了所涉及学科近年来所取得的科研成果和技术突破,反映了相关学科的产业发
展、学科建设和人才培养等,集中了相关学科领域专家学者的智慧,内容深入浅出,有较高的学术水准和前瞻性,有助于科技工作者、有关决策部门和社会公众了解、把握相关学科发展动态和趋势。

中华民族的伟大复兴需要科学技术的强力支撑。中国科协作为科技工作者的群众组织,是国家推动科学技术事业发展的重要力量,应广泛集成学术资源,促进学科前沿和新学科的融合,推动多学科协调发展,广泛凝聚科技工作者智慧,为建设创新型国家做出新贡献。我由衷地希望中国科协及其所属全国学会坚持不懈地开展学科发展研究、学术史研究以及相应的发布活动,充分发挥中国科协和全国学会在增强自主创新能力中的独特作用,推动学科又好又快发展。

A stylized, handwritten signature in black ink, likely belonging to Chen Ming, positioned above the date.

2010 年 3 月

前 言

晶体学与其他很多科学技术领域如数学、物理学、地质学、矿物学、化学、材料科学、生物医学、药理学、生物化学、地球化学、金属学等具有广泛而深远的联系。晶体学是一门典型的交叉学科,既有坚实的专门理论基础,也有广泛的实际应用,其交叉渗透性非常强,是当前几乎所有科学技术领域都迫切需要的一门学科,是现代许多高新技术包括纳米科学,生命科学与医药研发等的基础与支柱。因此,在我国开展晶体学科的学术回顾、评估及展望,对于晶体学科的发展,具有重要意义。

中国晶体学会于2009年5月联合中国硅酸盐学会接受中国科协的委托,开始了2009—2010年度“晶体学学科发展报告”的立项研究及撰写工作。这在我国是首次开展晶体学科的进展研究工作,中国科协对各学科进展研究工作非常重视,一再强调指出:学科发展研究是一项延续性的工作,有关学会要从战略高度认识此项工作的重要性,通过实施学科进展研究项目,在所属学科内建立起一支专家队伍,增强学会对科技工作者的凝聚力,打造学会的品牌;要突出重点,站在整个学科的高度上开展综合研究,充分展示本学科国内外整体发展动向,把握整体发展脉络和发展趋势,展示学科发展的全貌,所完成的研究报告应具有导向性和权威性;研究成果要体现学会特色,突出本学科研究成果,关注学科发展热点,强调学术性,充分显示学会的客观性、横向性和公正性;同时要注意国际间的交流,利用研究报告的英文摘要与国外同行进行交流;还要注重学科进展研究成果的传播和利用,除科协正式出版和召开发布会等形式外,今后还应该加强策划,考虑利用网络传播及国际交流等多种交流形式来扩大项目的影响,打造中国科协的品牌。我会对完成这个任务给予高度重视,立即成立了以林建华理事长为首的“晶体学学科发展报告”专家组,2009年6月以来,召开了多次常务理事会、理事工作会及专门的学术研讨会议,布置安排报告撰写工作,决定将“晶体学学科发展报告”分为七个专题报告开展研究及撰写,并且委派了各专题报告负责人,他们都是晶体学相关领域知名专家及各专业委员会负责人。

这份《晶体学学科发展报告(2009—2010)》主要包括综合报告及专题报告两大部分,全文按照科协要求,最后精简为约15万字。由于是初次撰写晶体学科发展报告,综合报告部分简要回顾了国内外晶体学的发展历程、概述了我国各相关领域近年来的发展现状并且提出了面临的问题以及对未来的展望及对策,然后各个专题报告着重阐述了中国晶体学各领域近三年来的取得的重

大进展和成果,并且指明了今后的发展趋势和方向。我国晶体学各个领域近年来发展很快,不但取得了举世瞩目的科学技术成果,而且还引进了大量年富力强的中青年科技工作者,我们希望这份报告对于进一步推动我国晶体学各领域及产业的发展发挥积极作用,并且希望今后每两、三年开展一次学科进展调研工作。在此报告的编撰过程中,我们的专家组及学术秘书们做了大量艰苦细致的调研及撰写工作,在此表示衷心的感谢,特别值得提出致谢的除了我会秘书处外,还有柴蕊及沈杰女士,她们为本报告的编写及研讨会的组织作出了贡献。

由于此学科进展报告的研究撰写任务重、时间紧,大部分报告内容虽经编写者及秘书处反复推敲、认真校对,仍然不免挂一漏万、错误难免,疏漏之处敬请晶体学科同人及专家指正,以便我们在今后的学科发展报告更新时补正。

中国晶体学会 中国硅酸盐学会

2010年1月

目 录

序	韩启德
前言	中国晶体学会 中国硅酸盐学会

综合报告

晶体学学科研究进展与发展趋势	(3)
一、引言	(3)
二、学科发展趋势与主要创新成果	(6)
三、面临的问题、未来展望及对策	(25)
参考文献	(29)

专题报告

生物大分子晶体学研究进展与发展趋势	(33)
功能分子晶体研究进展	(52)
非线性光学晶体材料的研究进展	(76)
激光晶体材料的研究进展	(88)
多(粉)晶衍射研究进展	(101)
电子显微学研究进展	(124)
晶体学研究相关仪器设备及进展	(137)

ABSTRACTS IN ENGLISH

Comprehensive Report

Advances in Crystallography	(159)
-----------------------------------	-------

Reports on Special Topics

Advances in Biomacromolecular Crystallography	(161)
Advances in Functional Molecular Crystals	(162)
Advances in Nonlinear Optical Crystals	(163)
Advances in Laser Crystals	(164)
Advances in Powder Diffraction	(164)
Advances in Electron Microscopy	(165)
Advances in Crystallographic Instruments	(166)

综合报告

晶体学学科研究进展与发展趋势

一、引言

地球上及至宇宙中绝大部分固态物质都是由晶体构成的,晶体是最重要的物质凝聚方式之一,晶体学是研究晶体的形成、组成、结构与性能之间的内在联系以及晶体生成的有关原理与应用、实验方法和技术的一门科学。晶体学的研究包括各种晶体的性能表征、晶体生长机理、晶体结构测定等若干方面,其中晶体结构测定是晶体学特有的核心问题。晶体学是典型的交叉学科,对于现代科学很多分支的发展都具有重大贡献,例如,对于地球上现存矿物晶体的分析研究,可以对地球的地质构造及其起源与发展进行深入了解;晶体学研究可以使我们理解无机及有机小分子晶体的结构与性能关系,可以对我们开发新型功能晶体及相关新材料提供重要的理论指导;进行人工培养生长晶体的结构研究对于原子分辨率水平的结构化学及结构生物学至关重要,也是理解各种功能晶体的结构与性能、进行基于结构的药物设计、大分子及其复合物的结构与功能研究的基础。

晶体学与其他很多科学技术领域具有广泛的联系,是一门既有坚实的专门理论基础,也有广泛的实际应用的学科,领域涉及数学、物理学、地质学、矿物学、化学、材料科学、生物医学、药理学、生物化学、地球化学、金属学等等。晶体学交叉渗透性非常强,是当前几乎所有科学技术领域都迫切需要的一门学科。晶体学是现代许多高新技术包括纳米科学,生命科学与医药研发等的基础与支柱。许多高精尖材料和物质结构与功能的研究以及生物医药学的进步与发展都与晶体学的发展及教育普及密切相关。

晶体学作为一门学科已经有两三百年的历史了,最早是作为矿物学的一个分支建立的。晶体学的真正迅猛发展以及对现代科学产生深刻影响是在 110 多年前德国物理学家伦琴发现 X 射线以后。德国、英国的物理学家们成功地将 X 射线衍射方法应用于测定晶体的原子结构,开创并且极大地推动了结构化学、固体物理、材料科学(包括金属及半导体材料等)、结构生物学、药物研发等重要现代科学领域的发展。20 世纪 50 年代以来,在计算机技术及直接法理论方面的突破,使得小分子晶体结构测定解析工作成为常规。20 世纪 70 年代以来,由于同步辐射光源的发展应用、基因工程以及重组蛋白生产等方面的突破性进展,使得目前生物大分子及其复合物的晶体结构测定及解析工作也已经发展日臻成熟,一旦得到可衍射晶体,结构解析工作也基本成为常规技术。跨入 21 世纪以来,在后基因组时代,随着各类基因组及蛋白质组学技术特别是结构基因组学的发展应用,生物大分子及其他晶体学领域已经发展成为基础理论及计算方法完善、技术及仪器设备非常完备的学科。今后晶体学的发展趋势及研究方向将主要集中在各个相关领域的应用方面,涉及生物医学及药物研发方面的应用,材料科学、纳米技术及应用化学等方面,另外,除了常规的 X 射线晶体学外,电子及中子晶体学、新型中子及同步辐射光源、各类新型高效探测器等也将是晶体学研究今后发展的重点及热点。

由于 X 射线晶体学所揭示的物质结构层面的基础性、重要性、创新性及其在相关各学科的广泛应用,晶体学相关成果成为诺贝尔奖(特别是化学奖)的热点,到 2009 年为止,全世界已经有 40 多位各个领域的科学家因为从事 X 射线及晶体学相关工作而得到各类诺贝尔奖(物理、化学、生理学及医学奖)。与其他学科相比晶体学是诺贝尔奖获得比例很高的科学领域。诺贝尔奖获得者主要分布在德国、美国、英国、瑞士、瑞典、荷兰、以色列、加拿大等国(详见表 1)。

表 1 与晶体衍射及晶体结构有关的部分诺贝尔奖获得者名单
(未包括探测器方面的物理奖项)

年份	学科	获奖者	获奖原因
1901	物理	德国 伦琴 Wilhelm Conral Rontgen	X 射线的发现
1914	物理	德国 劳埃 Max von Laue	晶体的 X 射线衍射
1915	物理	英国 亨利·布拉格 Henry Bragg 英国 劳伦斯·布拉格 Lawrence Bragg	晶体结构的 X 射线分析及解析
1917	物理	英国 巴克拉 Charles Glover Barkla	元素的特征 X 射线
1924	物理	瑞典 卡尔·西格班 Karl Manne Georg Siegbahn	X 射线光谱学
1927	物理	美国 康普顿 Arthur Holly Compton	发现康普顿效应(散射)
1936	化学	荷兰 德拜 Petrus J W Debye	研究偶极矩和 X 射线衍射法
1937	物理	美国 戴维森 Clinton Joseph Davisson 英国 汤姆孙 George Paget Thomson	发现电子衍射
1954	化学	美国 鲍林 Linus Carl Pauling	化学键的本质
1962	化学	英国 肯德鲁 John Charles Kendrew 英国 帕鲁兹 Max Ferdinand Perutz	蛋白质(肌红蛋白/血红蛋白)的晶体结构测定
1962	生理 医学	英国 克里克 Francis H. C. Crick 美国 沃森 James Watson 英国 威尔金斯 Maurice H. F. Wilkins	DNA 的双螺旋结构
1964	化学	英国 霍奇金 Dorothy Crowfoot Hodgkin	青霉素、维生素 B ₁₂ 晶体结构测定
1976	化学	美国 利普斯科姆 William Nunn Lipscomb Jr.	硼烷、碳硼烷的结构
1979	生理 医学	美国 科马克 Allan MacLeod Cormack 英国 豪斯菲尔德 Godfrey Newbold Hounsfield	用电子计算机操纵的 X 射线断层扫描仪
1985	化学	美国 霍普特曼 Herbert Hauptman 美国 卡尔勒 Jerome Karle	直接法解析晶体结构
1986	物理	德国 鲁斯卡 E. Ruska 德国 宾尼希 G. Binnig 瑞士 罗雷尔 H. Rohrer	透射电子显微镜 扫描隧道显微镜
1988	化学	德国 戴森霍弗 Johann Deisenhofer 德国 休伯 Robert Huber 德国 米歇尔 Hartmut Michel	光合反应中心(第一个膜蛋白)的晶体结构研究

年份	学科	获奖者		获奖原因
1994	物理	加拿大	布罗克豪斯 B. N. Brockhouse	中子谱学
		美国	沙尔 C. G. Shull	中子衍射
1997	化学	美国	博耶 Boyer	发现“能量分子”三磷酸腺苷的形成过程
		英国	沃克 John E. Walker	发现细胞中的跨膜钠－钾ATP 酶
		丹麦	斯科 Jens Skog	
2003	化学	美国	阿格雷 Peter Agre	离子通道的结构和机理研究
		美国	麦金农 Roderick MacKinnon	
2006	化学	美国	科恩伯格 Roger D. Kornberg	真核转录的分子机理
2009	化学	美国	拉马克里希南 Venkatraman Ramakrishnan	细菌核糖体结构和功能的研究
		以色列	尤纳斯 Ada Yonath	
		美国	施泰茨 Thomas Steitz	

从历史上看,德国、英国、美国、法国、俄国、荷兰、瑞典等物理、化学学科及 X 射线科研做得好的国家都在晶体学相关领域做出过开创性工作。德国的慕尼黑大学、柏林大学、马普研究所等,英国的曼彻斯特大学、剑桥大学、牛津大学、剑桥的卡文迪许实验室(现在为 MRC 实验室的部分)等,美国的加州理工学院、哈佛大学、哥伦比亚大学、纽约州立大学布法罗分校 Hauptman—Woodward 医学研究所以及斯坦福大学等都在晶体学相关领域做出过非常出色的工作。除上述老牌欧美科技强国外,近 60 年来在晶体学相关领域发展很快的国家是日本、澳大利亚、加拿大、以色列和中国等国,特别是在生物大分子结构研究方面进展很快。

中国晶体学科发展的历史可以追溯到 20 世纪 40 年代前后,我国早期结构化学与金属化学学者如 30 年代中期在英国的曼彻斯特大学师从 X 射线晶体学鼻祖——布拉格父子的陆学善、余瑞璜,四五十年代在加州理工学院师从当时美国著名晶体学家 Linus Pauling 的卢嘉锡、唐有祺等人,以及早期留学瑞典著名实验室的郭可信等人。他们归国服务后,开启了我国晶体结构与结构化学研究工作的先河,教育培养出我国晶体学工作者的骨干力量。我国晶体学工作者从五六十年代起就开始做出出色工作,特别值得一提的是 50 年代师从唐有祺教授于北京大学化学系毕业的范海福先生,早在 60 年代就已经提出直接法中沿用至今的方程,独创性地提出了应用直接法解析晶体结构的算法。现已 70 多岁的范海福院士至今仍是直接法研究的国际领军人物。更为著名的晶体学工作成果可以说是我国从 60 年代起就开始进行的蛋白激素—胰岛素的晶体结构解析。我国科学工作者在 20 世纪 70 年代初解析出我国第一个蛋白质晶体结构——胰岛素晶体结构,是当时我国乃至于世界上蛋白质结构研究取得的非常重要成果之一,在国内外产生重要影响,是我国结构生物学的发端。随后梁栋材院士领导的小组一度得到过当时世界上最高分辨率的胰岛素晶体结构。80 年代中期,我国中科院生物物理所与福建物构所合作还解析出天花粉蛋白质晶体结构;中科院沈阳金属研究所的郭可信院士研究组(包括叶恒强院士、张泽院士、王大能教授、邹晓冬教授等后来在国内外取得优异成果的科学家)在八九十

年代几乎与美国研究组同步发现并详细研究了急冷金属合金中的准晶体相,准晶概念的提出丰富和发展了晶体学知识及内涵,国内外准晶体相的研究最终使得国际晶体学联合会(IUCr)的相关委员会给出物质晶态的重新定义,是晶体学及固体物理学中里程碑式的进展;由卢嘉锡院士领导和培育的福建物构所许多晶体学研究小组几十年来也取得令人瞩目的科研成果,出现黄金陵教授、梁敬魁院士、陈创天院士、吴新涛院士、洪茂椿院士等一大批杰出晶体学家;现任中国晶体学会晶体生长与表征专业委员会主任的山东大学王继扬教授也在功能晶体生长领域做出了出色工作;南京大学物理系教授,中国晶体学会前理事长闵乃本院士在非线形光学晶体材料方面作出国际水平贡献,近些年来在国际顶级杂志上发表了一系列重要文章,在2006年度国家科学技术奖励大会上,闵乃本院士领衔完成的“介电体超晶格材料的设计、制备、性能和应用”获国家自然科学奖一等奖。

晶体学研究发展到现在,在晶体学理论及结构解析方法与软件方面日趋成熟与完善。除了传统的晶体学(如矿物学等领域)发现及描述性研究以外,现代晶体学研究大都需要晶体生长,基本可以分成两类:①是以功能性小分子(或者离子)晶体生长及应用为主的各种新型材料科学,这里是以得到大量适用的功能晶体材料为目标;②以解析复杂大分子结构为主的结构生物学,这种晶体生长完全是人为的艺术,仅仅是为了得到晶格中的大分子原子水平的三维结构。

下面就生物大分子晶体学研究,功能分子晶体研究,非线性光学与激光晶体材料研究,多(粉)晶衍射研究,电子显微学研究以及晶体学相关仪器设备的发展等几个主要方面予以较为详细介绍,更加具体的内容可参见相关专题报告。

二、学科发展趋势与主要创新成果

(一)生物大分子晶体学(蛋白晶体学)

生物大分子晶体学(简称蛋白晶体学)主要是应用人工或者天然生长出的生物大分子晶体(主要由蛋白质及蛋白质与其他如核酸等生物大分子组成)进行原子分辨率水平的三维结构分析研究。蛋白晶体学研究生命基本物质的精确三维结构及其与生物功能的关系,它是晶体学与生物学相交叉的科学领域。近年来,这一学科呈现出迅速发展的态势,通过X射线晶体学测定的生物大分子(包括蛋白质、核酸及其复合物)的精确三维结构的数量已超过5万(PDB数据库的统计)。可以说,以精确原子水平三维结构为基础揭示重要生命活动规律的研究已达到前所未有的深度和广度。几乎每一个重要生物大分子及其复合物精确三维结构的阐明都会揭示一项基本的结构—功能相关机理,其范围已涉及大多数重要的生命活动及一些疾病的发生和与此密切相关的基于三维结构的药物研发。这使得蛋白晶体学的发展进入一个新时期,其主要标志是,晶体结构分析与其他功能生物学研究紧密结合形成一个重要的前沿科学领域——结构生物学。结构生物学是基于生命物质的精确三维结构及其运动阐明和理解生命活动规律和生命现象本质的科学。

近些年来,随着结构基因组学等技术的发展,一些相对简易和低成本的结构解析方法(如MAD,SAD)的成熟,使蛋白晶体学正广泛应用于生命科学研究的各个领域,精确测

定的各类生物大分子的数量每年正以指数速率增长,这将大大推动我们对生命活动的认识 and 了解逐步进入一个以精确三维结构为基础的新层次。结构生物学的最主要研究对象是作为生命主要成分的蛋白质及其复合物,最新的基因组测序数据表明,人类含有 2 万多种独立蛋白质序列,目前地球上所有物种基因组测序得到的不同蛋白质序列已经超过 1000 万种。然而,构成这些不同蛋白序列的三维结构折叠类型仅有 1000 种多一点(最近几年已经不再有新的折叠类型出现),由于序列不同源蛋白质折叠问题的不可预测性,对于大多数蛋白质三维结构的获得仍然需要实验方法,即主要采取蛋白晶体学的方法得到。蛋白质研究作为我国及国际上的热点学科已经具有很长的历史,近 100 年来,化学、物理方面的科学家们强有力地推动了蛋白质科学的发展,据不完全统计,已经有 50 多位科学家因为蛋白质或与蛋白质结构与功能相关的工作获得诺贝尔奖,表 2 列举了 100 多年来一些与蛋白质的结构与功能研究相关的诺贝尔奖的分布情况。

表 2 与生物大分子结构特别是蛋白质研究相关的部分诺贝尔奖获得者名单

年份	学科	获奖者		获奖原因
1901	物理	德国	伦琴 Wilhelm Conrad Röntgen	X 射线的发现
1914	物理	德国	劳埃 Max von Laue	晶体的 X 射线衍射
1915	物理	英国	亨利·布拉格 Henry Bragg	晶体结构的 X 射线分析及解析
		英国	劳伦斯·布拉格 Lawrence Bragg	
1926	化学	瑞典	斯维德伯格 Theodor Svedberg	超速离心分析蛋白质结构
1946	化学	美国	萨姆纳 James B. Sumner	发现结晶蛋白酶,制备活性状态的酶和病毒蛋白质
		美国	诺思罗普 John H. Northrop	
		美国	斯坦利 Wendell Meredith Stanley	
1948	化学	瑞典	梯塞留斯 Arne Wilhelm Kaurin Tiselius	发明电泳方法分析蛋白质
1954	化学	美国	鲍林 Linus Carl Pauling	化学键的本质及蛋白质结构
1958	化学	英国	桑格 Frederick Sanger	发明蛋白质测序方法
1962	化学	英国	肯德鲁 John Charles Kendrew	蛋白质(肌红蛋白/血红蛋白)的晶体结构测定
		英国	帕鲁兹 Max Ferdinand Perutz	
1962	生理医学	英国	克里克 Francis H. C. Crick	DNA 的双螺旋结构的提出
		美国	沃森 James Watson	
		英国	威尔金斯 Maurice H. F. Wilkins	
1964	化学	英国	霍奇金 Dorothy Crowfoot Hodgkin	青霉素、维生素 B ₁₂ 等生物分子的晶体结构测定

续表

年份	学科	获奖者	获奖原因
1972	化学	美国 安芬森 Christian Borhmer Anfinsen 美国 摩雷 Stanford Moore 美国 斯坦 William H. Stein	蛋白质折叠的基本原则 研究酶化学的基本理论
1978	化学	英国 米切尔 Peter D. Mitchell	生物系统中能量转移过程
1980	化学	英国 桑格 Frederick Sanger 美国 伯格 Paul Berg 美国 吉尔伯特 Walter Gilbert	建立 DNA 一级结构的化学和 生物分析法
1982	化学	英国 克卢格 Aaron Klug	电镜测定生物大分子结构
1985	化学	美国 霍普特曼 Herbert Hauptman 美国 卡尔勒 Jerome Karle	直接法解析晶体结构
1986	物理	德国 鲁斯卡 E. Ruska 德国 宾尼希 G. Binnig 瑞士 罗雷尔 H. Rohrer	透射电子显微镜 扫描隧道显微镜
1988	化学	德国 戴森霍弗 Johann Deisenhofer 德国 休伯 Robert Huber 德国 米歇尔 Hartmut Michel	光合作用反应中心(第一个膜 蛋白)的晶体结构研究
1989	化学	美国 奥尔特曼 Sydney Altman 美国 切赫 Thomas Cech	发现核糖核酸(RNA)催化作 用的研究
1991	化学	瑞士 恩斯特 Richard R. Ernst	傅里叶变换核磁共振波谱
1993	化学	加拿大 史密斯 Michael Smith 美国 穆利斯 Kary Mullis	定点突变 PCR 技术
1997	化学	美国 博耶 Boyer 英国 沃克 John E. Walker 丹麦 斯科 Jens Skog	发现“能量分子”三磷酸腺苷的 形成过程(ATP 酶) 在细胞中首次发现钠—钾 ATP 酶
2002	化学	瑞士 伍斯里奇 Kurt Wüthrich 美国 芬恩 John B. Fenn 日本 田中耕一 Koichi Tanaka	核磁共振光谱学测定生物大分 子三维结构 利用质谱技术研究蛋白质
2003	化学	美国 阿格雷 Peter Agre 美国 麦金农 Roderick MacKinnon	离子通道结构和机理研究
2006	化学	美国 科恩伯格 Roger D. Kornberg	真核转录的分子机理
2009	化学	美国 拉马克里希南 Venkatraman Ramakrishnan 以色列 尤纳斯 Ada Yonath 美国 施泰茨 Thomas Steitz	细菌核糖体结构和功能的研究

注:与表 1 有一定重叠。