



2012-2013

*Report on Advances in
Crystallography*

中国科学技术协会 主编
中国晶体学会 编著

学科发展报告

晶体学
学科发展报告

中国科学技术出版社



014033758

07-12
01
2012-2013

2012—2013

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 编著



中国科学技术出版社



北航

C1722136

07-12

01

2012-2013

图书在版编目 (CIP) 数据

2012—2013 晶体学学科发展报告 / 中国科学技术协会主编; 中国晶体学会编著. —北京: 中国科学技术出版社, 2014.2

(中国科协学科发展研究系列报告)

ISBN 978-7-5046-6540-9

I. ① 2… II. ① 中… ② 中… III. ① 晶体学—学科发展—研究报告—中国—2012—2013 IV. ① O7-12

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2014) 第 006355 号

策划编辑	吕建华 赵 晖
责任编辑	高立波
责任校对	凌红霞
责任印制	王 沛
装帧设计	中文天地

出 版	中国科学技术出版社
发 行	科学普及出版社发行部
地 址	北京市海淀区中关村南大街 16 号
邮 编	100081
发行电话	010-62103354
传 真	010-62179148
网 址	http://www.cspbooks.com.cn

开 本	787mm × 1092mm 1/16
字 数	330 千字
印 张	14.25
版 次	2014 年 4 月第 1 版
印 次	2014 年 4 月第 1 次印刷
印 刷	北京市凯鑫彩色印刷有限公司
书 号	ISBN 978-7-5046-6540-9/O · 172
定 价	53.00 元

(凡购买本社图书, 如有缺页、倒页、脱页者, 本社发行部负责调换)

2012—2013

晶体学学科发展报告

REPORT ON ADVANCES IN
CRYSTALLOGRAPHY

首席科学家 高 松

专 家 组

组 长 高 松

成 员 (按姓名拼音排序)

曹 荣	陈小龙	陈小明	丁建平	杜冠华
来鲁华	廖立兵	刘世雄	吕 扬	麦振洪
牛立文	潘 峰	彭练矛	苏成勇	苏晓东
王大成	王继扬	王 牧	王哲明	吴以成
许瑞明	杨 诚	尹大川	于 荣	郑伟涛
朱世富				

学术秘书 陈 冲

序

科技自主创新不仅是我国经济社会发展的核心支撑，也是实现中国梦的动力源泉。要在科技自主创新中赢得先机，科学选择科技发展的重点领域和方向、夯实科学发展的学科基础至关重要。

中国科协立足科学共同体自身优势，动员组织所属全国学会持续开展学科发展研究，自2006年至2012年，共有104个全国学会开展了188次学科发展研究，编辑出版系列学科发展报告155卷，力图集成全国科技界的智慧，通过把握我国相关学科在研究规模、发展态势、学术影响、代表性成果、国际合作等方面的最新进展和发展趋势，为有关决策部门正确安排科技创新战略布局、制定科技创新路线图提供参考。同时因涉及学科众多、内容丰富、信息权威，系列学科发展报告不仅得到我国科技界的关注，得到有关政府部门的重视，也逐步被世界科学界和主要研究机构所关注，显现出持久的学术影响力。

2012年，中国科协组织30个全国学会，分别就本学科或研究领域的发展状况进行系统研究，编写了30卷系列学科发展报告（2012—2013）以及1卷学科发展报告综合卷。从本次出版的学科发展报告可以看出，当前的学科发展更加重视基础理论研究进展和高新技术、创新技术在产业中的应用，更加关注科研体制创新、管理方式创新以及学科人才队伍建设、基础条件建设。学科发展对于提升自主创新能力、营造科技创新环境、激发科技创新活力正在发挥出越来越重要的作用。

此次学科发展研究顺利完成，得益于有关全国学会的高度重视和精心组织，得益于首席科学家的潜心谋划、亲力亲为，得益于各学科研究团队的认真研究、群策群力。在此次学科发展报告付梓之际，我谨向所有参与工作的专家学者表示衷心感谢，对他们严谨的科学态度和甘于奉献的敬业精神致以崇高的敬意！

是为序。

韩启明

2014年2月5日

前言

晶体学是研究晶体的组成、结构与性能三者之间的内在联系以及有关原理、实验技术与应用的一门科学。晶体学涵盖了许多基础理论和实际应用领域,它涉及数学、物理学、化学、地质学、矿物学、材料科学、生物医学、药理学、生物化学、分子生物学、硅酸盐化学、地球化学、金属学等,是学科交叉、学科渗透的一个中心科学,对人们认识世界、科学技术的发展和社会进步具有重要影响。

2012年7月3日,联合国大会通过的第66/284号决议,决定宣布2014年为国际晶体学年。100年来,晶体学科学成就意义非凡,有40余位科学家因其成就直接或间接的和晶体学相关,获得20多项诺贝尔奖,他们的贡献使得晶体学支撑了众多学科。晶体学及其新方法和新光源(同步辐射、自由电子激光器、中子源)的引入和发展,仍持续对科学的发展产生重大影响。2012年8月,我会借西安换届大会之际,启动继续在我国开展晶体学学科发展报告研究项目,这将作为“国际晶体学年在中国”系列活动的重要组成部分,我们希望这部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。

本报告是我会第二次开展晶体学学科发展研究项目,是《2009—2010晶体学学科发展报告》很好的延续。2012年8月以来,成立了以高松理事长为首席科学家的“晶体学学科发展报告”专家组,成员由新一届理事会理事组成,并多次在常务理事会会议上安排撰写工作,2013年3月完成初稿。2013年10月,在北京召开了2012—2013晶体学学科发展研讨会,对修改稿征求意见和建议,10月底完成本报告。

本报告内容基本覆盖了近4年国内晶体学领域的重大进展和成果,综合报告部分简要概述了我国晶体学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。除综合报告外,根据我会专业委员会的情况(药物晶体学专委会2012年新成立),同时保持晶体学学科发展专题报告的延续性,确定了8个专题:基于大型装置的大分子晶体学进展、功能分子晶体研究进展、非线性光学晶体研究进展、激光晶体科学技术发展现状与趋势、多晶(粉晶)衍射研究进展、电子显微学研究进展、药物晶体学研究进展、晶体学研究相关仪器设备及进展,近60位撰稿人参与了专题报告的调研和撰写工作,在此表示衷心的感谢。

由于时间和经验所限,报告内容虽经统稿者及秘书处认真校对,但错误难免,疏漏之处敬请读者批评指正。

最后,我们向关心、支持本报告的专家及同仁,表示衷心的感谢。

中国晶体学会
2013年10月

目 录

序	韩启德
前言	中国晶体学会

综合报告

晶体学学科研究进展和发展趋势	3
一、引言	3
二、我国晶体学近年的最新研究进展和国内外晶体学学科研究进展比较	4
三、结语：晶体学发展趋势及展望	28
参考文献	30

专题报告

基于大型装置的大分子晶体学进展与展望	35
功能分子晶体研究进展	57
非线性光学晶体研究进展	85
激光晶体科学技术发展现状与趋势	101
多晶（粉晶）衍射研究进展	112
电子显微学研究进展	139
药物晶体学研究进展	162
晶体学研究相关仪器设备及进展	174

ABSTRACTS IN ENGLISH

Comprehensive Report

Advances in Crystallography	201
-----------------------------------	-----

Reports on Special Topics

Advances in Biomacromolecular Crystallography	204
Advances in Functional Molecular Crystals	205
Advances in Nonlinear Optical Crystals	206
Advances in Laser Crystals	207
Advances in Powder Diffraction	207
Advances in Electron Microscopy	209
Advances in Drug Crystallography	210
Advances in Crystallographic Instrument	211
索引	212

综合报告

晶体学学科研究进展和发展趋势

一、引言

晶体学作为数学和物理科学在矿物学中的应用在欧洲的产生与发展已经有两三百年的历史了，然而，晶体学作为一门独立的学科真正迅猛地发展及其对现代科学（特别是现代生物学）产生的广泛而深刻的影响则是在 1895 年德国物理学家伦琴发现 X 射线以后，特别是在 1912 年，在德国由劳厄为首的物理学家们发现 X 射线可以被矿物晶体所衍射，揭示了 X 射线的电磁波本质、晶体微观结构的周期性和晶体晶格长度具有与 X 射线波长相当的尺度；很快在英国，布拉格父子将 X 射线衍射方法成功应用于测定 NaCl 的晶体结构，由此开创 X 射线晶体学，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快速发展。2012 年，晶体学家们在全世界范围内纪念 X 射线晶体学的百年华诞，缅怀并回顾劳厄及其具体做出衍射实验的技术员们、理论物理学家爱瓦尔德以及布拉格父子对于开创 X 射线晶体学所作出的创新性杰出贡献，特别是小布拉格（劳伦斯·布拉格）在建立结构化学以后又高瞻远瞩地大力支持蛋白质晶体学研究，并且在开创生物大分子晶体学（蛋白质、核酸及其复合物）方面所作出的巨大贡献。2012 年 7 月 3 日，联合国大会通过的第 66/284 号决议，决定宣布 2014 年为国际晶体学年（IYCr 2014）。并由联合国教育、科学及文化组织与国际晶体学联合会（IUCr）负责主导，推动开展国际晶体学年活动。鼓励所有会员国、联合国系统和所有其他行动者开展各种活动，提高公众对于晶体学重要性的认识，推广新知识，推动晶体学领域的各项发展。中国的晶体学工作者将与国际同行一道，利用这个难得的机会，向全社会普及晶体学及其相关学科的科学知识，传播及弘扬晶体学知识及其所蕴涵的深刻科学思想，指出晶体学发展的美好前景，吸引年轻科学工作者加入到这门富有活力的学科研究中来。

自《2009—2010 晶体学学科发展报告》完成以后，硬 X 射线自由电子激光 XFEL 的实现是国际上在晶体学领域激动人心的进展。XFEL 和同步辐射相比，亮度方面提高近 9 个数量级、脉冲时间显著缩短，并具有很好的相干性。XFEL 具备的上述特点，令其在众多科学领域有着不可估量的应用前景。晶体学家们发展出适用于 XFEL 装置上的探测器设备及收集亚微米

大小的随机取向的微小蛋白质晶体结构解析技术^[1],首次利用X射线自由电子激光装置解析一个新蛋白质结构的工作^[2],被《科学》评选为2012年当年的“十大科学进展”之一。目前,日本、德国以及瑞士等发达国家都在建设X射线自由电子激光设施,中国学者也在努力推动硬X射线自由电子激光装置及科学研究的发展,进一步加强国际合作,提升我国硬X射线自由电子激光技术水平。

本学科报告旨在回顾、总结和科学评价2010—2013年我国晶体学学科的重要发展和成果,着重介绍我国学者在基于大型装置的大分子晶体学、功能分子晶体学、非线性光学晶体材料、激光晶体材料、多(粉)晶衍射、电子显微学、药物晶体学、晶体学研究相关仪器设备等几个方面所获得的重要成果和进展,与国际相关研究领域进展的比较,以及对本学科发展的趋势及展望。

二、我国晶体学近年的最新研究进展和国内外晶体学学科研究进展比较

(一) 基于大型装置的大分子晶体学进展

由于同步辐射光源在蛋白质晶体学中的发展和应用,基因工程技术及重组蛋白生产和提纯、蛋白质结构解析等方面的突破性进展,使得生物大分子及其复合物的晶体结构测定及解析工作也日臻成熟,已经发展成为基础理论及计算方法完善、技术及仪器设备完备的学科。

我国结构生物学领域近几年成果斐然。到2013年10月,美国PDB(protein data bank)的统计,各种大分子的三维结构已达95000。中国结构生物学家的贡献也呈大幅度上升趋势,尤其是膜蛋白。据不完全统计,2010—2013年间发表在CNS(*Cell*、*Nature*、*Science*)的来自中国大陆的结构生物学相关论文约为30篇,大大超过2010年以前中国结构生物学CNS文章的总和,其中清华大学的十多个结构生物学研究组贡献了其中的一半左右;中国结构生物学者在*Nature*子刊、*Cell*子刊、*PNAS*、*Gen & Dev*.等众多著名国际期刊上发表了100多篇高水平学术论文。

1. 我国同步辐射光源对我国结构生物学发展的推动作用

上海同步辐射装置(SSRF):SSRF是国内目前唯一的第三代同步辐射装置,SSRF生物大分子晶体学线站的建立和投入使用,为我国结构生物学研究提供了必要的技术支持,极大地提升了我国结构生物学的整体实力和国际竞争力。SSRF生物大分子晶体学线站的用户已多达50余个单位的160多个课题组,包括国内从事结构生物学研究的主要单位。我国的结构生物学研究正在实现跨越式发展,测定的蛋白质结构数已超过500个,在亚洲地区已占有相当大的比重,用户短时间内已发表论文276篇,在*Nature*、*Science*、*Cell*发表研究论文15篇,*Nature*、*Cell*子刊31篇,影响因子大于9的73篇,很多研究成

果得到了国际认可。

北京同步辐射装置 (BSRF): BSRF 是兼用同步辐射装置。BSRF 在国内最早开展蛋白晶体学应用, 为我国同步辐射在结构生物学方面的应用和发展起到重要作用。目前仍然担负着为国内的科研用户, 特别是北方地区用户的研究支撑任务。BSRF 还注重在方法学上的研究工作, 以提升国内结构生物学研究的技术水平, 同时致力于新一代光源 (包括低发射度的同步辐射装置和 X 射线自由电子激光) 的建设和技术研究。BSRF 近年来将 X 射线小角散射和蛋白质晶体学结合, 对蛋白质的结构和功能关系进行研究, 得到了国际上的认可。BSRF 正在积极推动北京先进光源的建设和在瑞士 X 射线自由电子激光装置上建设衍射 / 散射实验站。

2. 我国蛋白质晶体学研究进展

近年来我国学者在重要膜蛋白的结构与功能、与表观遗传学相关的组蛋白修饰及其与核酸的复合物结构和识别机理、免疫与疾病相关的结构生物学研究、病毒及病原菌的结构与致病机理及机体自身免疫反应相关研究、与细胞凋亡相关的分子机制、信号通路中相关蛋白构象变化的捕捉及信号的传递、生物大分子机器的构造与组装、病毒与病原菌相关结构及药物设计与优化、蛋白质与核酸的相互作用的结构与功能研究、STING 及其与 c-di-GMP 复合物结构和 STING 感受和结合 c-di-GMP 的分子机制、高通量蛋白生产及晶体结构解析技术平台建立等众多方面获得很多重要成果。详细请见专题报告。

3. 展望及对策: 蛋白质晶体学对新一代光源的需求

获取蛋白质晶体是解析结构的必须步骤, 也是瓶颈之一, 尤其是对于超大蛋白质复合物、膜蛋白等更是如此。各种结晶试剂使研究者能够比较容易地获得微米量级的晶体, 而优化生长出尺寸接近 $100\mu\text{m}$ 的晶体变得相当困难。结构生物学者迫切需要能够对微米, 甚至亚微米尺寸的晶体开展衍射实验和解析结构的实验手段。这就要求用于衍射的 X 射线光斑能够聚焦到微米量级, 发散度必须在毫弧度的量级。由于样品体积非常微小, 所以要求入射的光强也非常高。能够满足这种要求的光源只能是高性能的同步辐射装置, 具体而言, 需要发射度小到纳弧度量级的同步辐射光源。目前世界上正在运行的第三代同步辐射光源, 光斑在 $5\mu\text{m}$ 左右, 发射度在 $3 \sim 4 \text{ nmrad}$ 。但是结构生物学的发展, 需要更小的聚焦光斑。目前国际上发达国家都在发展光斑 $1\mu\text{m}$ 左右、发射度小于 1 nmrad 的光源。中国科学院也提出了在北京地区建设发射度在 0.5 nmrad , 进一步可升级到 0.1 nmrad 的北京先进光源的计划。另一方面, 对于应用如此微小的光束线, 对聚焦光学元件、衍射仪机械精度、实验环境的温度及稳定性等要求非常高, 微小样品晶体的装载和定位、样品损伤等技术问题都需要考虑和解决。

X 射线自由电子激光应用于结构生物学的可行性已被证明, 但也面临着很多技术问题, 如样品的操作、衍射数据的收集和处理方法、探测器都存在很多需要攻克的难关。自由电子激光最吸引人的地方还在于它具有不需要晶体即能解析结构的潜力, 这方面也有很

多科学家开展了方法学的研究,但目前还没有成熟的解决方案。

总而言之,在最近的十年,对于同步辐射而言,进一步降低发射度,为结构生物学提供尺寸为微米,甚至亚微米的光斑是一个得到公认的趋势,自由电子激光也显示了在结构生物学中发挥重要作用的前景,但都有很多技术问题需要解决。中国的同步辐射、自由电子激光建设相对滞后,我们应该推动北京先进光源的建设计划,并且积极推动瑞士自由电子激光合作建设的计划,同时致力于发展在这些新一代光源上开展结构解析的方法学研究。只有如此,我们才能够在未来的研究中占有一席之地。

(二) 功能分子晶体研究

现代 X 射线单晶衍射结构测定方法和技术已经能够快速、精确测定小分子化合物的晶体结构。大量的晶体结构测定获得的晶体学数据,为自下而上构筑功能晶态材料提供了重要知识宝库。晶体工程是研究小分子结晶、结构预测、晶体设计、结构与性能调控的科学,其研究对象主要是有机分子、金属配合物、金属有机化合物等。相关化合物的功能涉及物理功能(如光、电、磁、非线性光学性质等)、化学功能(如吸附与分离、催化、手性)、生物功能(如药物晶型、药物缓释等),以及交叉学科功能(如传感、开关);等等。

近年来,我国随着科研投入的增加,在功能分子晶体研究领域,相关研究手段、条件(特别是现代单晶衍射仪器)都迅速得到改善和提高。同时,一大批中青年学者逐步成为研究的主力军。因此,我国在晶体工程相关领域取得了非常突出的成绩,在国际上已经占据一定的地位。例如,我国在微孔配位聚合物、高核簇合物、铁电材料等方面,已经在国际上形成一定的特色。同时,一些学者已经成为国际活跃、有影响的人物。

1. 功能分子晶体研究的最新进展

(1) 多孔配位聚合物晶体工程

多孔配位聚合物具有持久的孔洞,是一类新兴的分子基晶态多孔材料,有着十分多样化的功能,在国际上引起广泛的关注。我国在该领域加入研究的学者和单位日渐增多,如中山大学、吉林大学、福建物构所等。近年来,我国学者在多孔配位聚合物的组装方法、结构调控、吸附、分离、荧光传感、催化等方面均取得重要进展。

设计合成、功能与相关机理是当前多孔配位聚合物框架材料的研究热点。为此,我国学者们采用了多种多样的配体,如羧酸、含氮类配体;刚性/柔性配体;以及各种构筑单元,获得了结构和功能都十分多样化的、类似分子筛的材料,比较系统的研究和报道了它们在 H_2 吸附、 CO_2 吸附、离子交换、溶剂客体吸附和控制、药物载体和缓释、催化等方面的性能和应用。一些多孔配位聚合物框架体系从设计到合成乃至客体吸附的微观机制都已得到阐明。除了上述方面的研究,多孔配位聚合物框架材料的自身的物理化学性质及其与客体的相关耦合也引起学者的关注,如客体相关的荧光/变色性质,可以用于对多种溶剂蒸汽、二氧化碳、危险爆炸物、阴离子等的荧光/变色传感或响应材料或器件。

(2) 无机非线性光学材料晶体工程

我国在非线性光学材料晶体的研究有着很好的传统和积累。近年来,我国学者在多年研发非线性光学材料晶体的基础上,相继提出共同提高阳离子和阴离子基团非线性极化率、引入含孤对电子的离子或易于产生次级姜—泰勒畸变的离子、引入非中心对称的四角锥和四面体基元、平面三角形 BO_3 与 CO_3 互换等等创新的研究思路,研发出了多个系列、涵盖中远红外到紫外区波段的非线性光学材料晶体,包括卤化物、硫属、硼酸盐、碘酸盐、碳酸盐等。这些结果拓宽了无机非线性光学材料的研究领域,为实现新型非线性光学材料的设计合成提供了有益的研究思路,也为获得新型的实用非线性光学晶体的开发打下了很好的基础。

(3) 高核簇合物

多核金属簇合物的合成与结构、结构与性能关系一直是功能分子材料的研究热点,探索这些金属簇合物材料的相关性质和应用是化学家们面临的挑战。我国学者一直关注在这个方面的研究。近年来,多种多核金属簇合物被合成制备,如金属配合物笼状分子、杂杯芳烃大环为配体的快银金属簇和准轮烷、阴离子作为模板的多核银簇、金纳米团簇、立方多金属氧酸盐—有机分子笼、锗—钼—氧簇、磁性金属构筑的大尺寸空腔纳米笼簇等。这些功能分子材料可能应用于活性中间体的捕捉、活性药物小分子的运载传输、光/电化学功能、磁性质等方面。特别是我国学者在稀土—过渡金属簇合物方面的研究,如利用混合阴离子的协同模板作用合成了多个系列的高核稀土—过渡金属簇合物 $\text{Gd}_{36}\text{Ni}_{12}$ 、 $\text{Gd}_{42}\text{M}_{10}$ ($\text{M} = \text{Ni}, \text{Co}$) 等^[3, 4], 具有高的磁热效应。这些富勒烯型的高核金属簇合物引起国内外的广泛关注。

(4) 铁电分子晶体

铁电晶体材料是一类在有限温度下能产生自发电极化,在存储、红外探测、机电转换、光电器件等诸多领域有着重要的应用,是一类先进功能材料。基于分子的铁电晶体的研究,对应于纯粹无机体系如钛酸钡等,能够为铁电材料的应用与开发提供新的思路和素材,具有重要的科学意义和应用前景。我国学者在系统研究分子基铁电体机理的基础上,通过分析晶体学数据库 (CCDC),发现了若干个系列的分子基铁电化合物^[5, 6]。如基于二异丙基胺阳离子的有机盐铁电化合物,很好地满足了分子基铁电体的实用要求:相变温度高、矫顽场低、结构简单、易于制备,其铁电转变温度达到 426K,自发极化达到 $23\mu\text{C}/\text{cm}^2$,可与钛酸钡相媲美,是分子铁电化合物研究的一个突破^[7, 8]。同时,研究者还发现,分子基团的动态行为对于铁电性的产生有着深刻的影响。如基于冠醚——取代苯胺类的主客体化合物中,取代苯胺的甲氧基端在高温相时可以自由摆动,而在低温相时,这种摆动被冻结,从而产生铁电性。同一化合物中,电与磁的共存以及耦合是目前相关研究领域的一大热点和难点,具有重要的理论和应用价值。我国学者已经探索发现若干这类分子基的多铁材料,如基于四溴合铁阴离子的有机盐分子基铁电体^[9],和基于金属—甲酸体系的系列化合物是电有序与磁有序共存的一类很好的模型化合物。一些新型的基于结构中的溶剂/阳离子/氢键系统的动态到静态的运动变化,产生材料晶体独特的介

电/铁电性能,为进一步研究分子基相变化合物提供了参考。

除了以上方面,我国学者在磁性分子晶体、手性多酸化合物、分子催化材料、分子变色材料、超分子晶体工程、金属有机晶体化学、无机分子筛材料等都获得了很好的成果,限于篇幅不一一在此介绍。

2. 国内外比较分析、展望及对策

与国际发展趋势相一致,最近几年我国在多孔配位聚合物的研究中,进一步突出功能化、结构与功能关系研究。我国学者已经取得了一系列创新性、处于国际前沿的研究成果。就非线性光学晶体而言,我国在这一领域的研究具有一定的优势和传统。近两年来国内科学家们在以主族金属簇为单元进行非线性光学晶体等方面已取得一定突破性的进展。在簇合物晶体化合物的研究中,我国在主族金属、过渡金属、过渡金属—稀土杂核等簇合物的研究中,均取得了优良成绩。其中,在高核稀土——过渡金属簇合物方面的研究,更是在国际上形成明显的特色、具有一定的优势。不过,在镍簇合物、锌簇合物及其他过渡金属簇合物方面的研究工作相对偏少。分子基铁电体及多铁材料的合成与研究近年来受到广泛的关注,我国学者发现了不少新的铁电体,在铁电体和多铁材料的寻找、设计、组装和性能研究方面取得具有国际影响的成果。

相对于其他领域,我国在金属有机晶体化学和有机晶体工程领域的队伍比较小。不过,近几年我国在这些领域也取得了相当好的成绩,尤其是在反应与催化方面。但是,在结构与功能相关性研究方面,尤其是有机晶体工程中的结构与功能相关性研究方面,有待进一步的加强。

在过去的两年多里,我国晶体化学工作者在上述研究领域中取得了非常突出的成绩,在国际上已经占据一定的地位。在配位聚合物、金属簇合物、磁性分子晶体、非线性光学晶体、分子铁电晶体、有机分子晶体和金属有机晶体化学等研究中,均取得了具有一定特色和比较明显的进展。总体上,我国在功能晶体化合物及其材料的设计、合成与组装研究中,已经有比较扎实的基础和较大的研究队伍。同时,也应当注意到,我国在结构与性能关系的深层次研究方面与国际发达国家相比,仍然有一些差距。有必要进一步加强功能导向的设计,以及结构与性能关系的研究,为实现此类材料的实用化打下基础。在金属簇合物和光电功能晶体的研究中,应该注意加强分子设计,以实现更好的物理化学性质和性能。此外,我国目前金属有机晶体化学和有机晶体工程的研究队伍相对偏小。

(三) 非线性光学晶体研究

强光通过介质时引起介质极化率的非线性响应,产生和频、差频谐波,这种与强光有关的效应称为非线性光学效应(NLO),具有NLO效应的晶体称为非线性光学晶体。NLO效应类型和研究范围很广,诸如二阶、三阶NLO效应、和光折变效应等,其中最常用的