



国家出版基金项目
NATIONAL PUBLICATION FOUNDATION

“十三五”国家重点
出版物出版规划项目

当代化学化工学术精品丛书
分子科学前沿
总主编 席振峰 张德清

Progress of Chemical Measurements

化学测量学进展

邵元华 毛兰群 主编



 华东理工大学出版社
EAST CHINA UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY PRESS

非外借



国家出版基金项目
NATIONAL PUBLICATION FOUNDATION

“十三五”国家重点
出版物出版规划项目

当代化学化工学术精品丛书
分子科学前沿
总主编 席振峰 张德清

Progress of Chemical Measurements

化学测量学进展

邵元华 毛兰群 主编

 华东理工大学出版社
EAST CHINA UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY PRESS

· 上海 ·

图书在版编目(CIP)数据

化学测量学进展 / 邵元华, 毛兰群主编. —上海 :
华东理工大学出版社, 2022.7

ISBN 978 - 7 - 5628 - 6750 - 0

I. ①化… II. ①邵… ②毛… III. ①化学物质 -
测量 IV. ①TB99

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2022)第 059465 号

内容提要

化学测量学是在原分析化学的基础上发展起来的,是国家自然科学基金委员会化学科学部与时俱进地提出的新的支持领域,是对原分析化学的拓展。本书简单概括了北京分子科学国家研究中心这几十年来有关化学测量学相关研究的主要进展与研究成果。全书共分 8 章,详细介绍了化学测量学基础、基于分子光谱分析的化学测量学、基于电化学的化学测量学、微纳分离与分析、质谱分析、基于核磁共振波谱学的化学测量学、基于扫描探针显微镜的高分辨表面分析技术和大数据分析化学测量学。

本书可作为高等学校分析化学相关专业本科高年级学生、研究生的学习用书,以及教师、科技工作者和企业专业技术人员的参考书,尤其对从事化学测量学研究的科研人员将具有很好的指导意义。

.....
项目统筹 / 马夫娇 韩 婷

责任编辑 / 韩 婷

责任校对 / 石 曼

装帧设计 / 周伟伟

出版发行 / 华东理工大学出版社有限公司

地址:上海市梅陇路 130 号,200237

电话:021 - 64250306

网址:www.ecustpress.cn

邮箱:zongbianban@ecustpress.cn

印 刷 / 上海雅昌艺术印刷有限公司

开 本 / 710 mm × 1000 mm 1/16

印 张 / 16.5

字 数 / 372 千字

版 次 / 2022 年 7 月第 1 版

印 次 / 2022 年 7 月第 1 次

定 价 / 188.00 元
.....

版权所有 侵权必究

MOLECULAR SCIENCES

当代化学化工学术精品丛书·分子科学前沿

丛书编委会

学术顾问 包信和 中国科学院院士

丁奎岭 中国科学院院士

总主编 席振峰 中国科学院院士

张德清 中国科学院化学研究所,研究员

执行主编 王 树 中国科学院化学研究所,研究员

编委 (按姓氏笔画排列)

王春儒 毛兰群 朱道本 刘春立 严纯华 李玉良 吴海臣

宋卫国 张文雄 张 锦 陈 鹏 邵元华 范青华 郑卫军

郑俊荣 宛新华 赵 江 侯小琳 骆智训 郭治军 彭海琳

葛茂发 谢金川 裴 坚 戴雄新

MOLECULAR SCIENCES

化学测量学进展

编委会

主 编 邵元华 毛兰群

编委会 (按姓氏笔画排序)

马会民 刘小云 吴 凯 吴海臣 陈 义 邵学广 金长文
赵美萍 聂宗秀 夏 斌 黄岩谊

总序一

分子科学是化学科学的基础和核心,是与材料、生命、信息、环境、能源等密切交叉和相互渗透的中心科学。当前,分子科学一方面攻坚惰性化学键的选择性活化和精准转化、多层次分子的可控组装、功能体系的精准构筑等重大科学问题,催生新领域和新方向,推动物质科学的跨越发展;另一方面,通过发展物质和能量的绿色转化新方法不断创造新分子和新物质等,为解决卡脖子技术提供创新概念和关键技术,助力解决粮食、资源和环境问题,支撑碳达峰、碳中和国家战略,保障人民生命健康,在满足国家重大战略需求、推动产业变革的方面发挥源头发动机的作用。因此,持续加强对分子科学研究的支持,是建设创新型国家的重大战略需求,具有重大战略意义。

2017年11月,科技部发布“关于批准组建北京分子科学等6个国家研究中心”的通知,依托北京大学和中国科学院化学研究所的北京分子科学国家研究中心就是其中之一。北京分子科学国家研究中心成立以来,围绕分子科学领域的重大科学问题,开展了系列创新性研究,在资源分子高效转化、低维碳材料、稀土功能分子、共轭分子材料与光电器件、可控组装软物质、活体分子探针与化学修饰等重要领域上形成了国际领先的集群优势,极大地推动了我国分子科学领域的发展。同时,该中心发挥基础研究的优势,积极面向国家重大战略需求,加强研究成果的转移转化,为相关产业变革提供了重要的支撑。

北京分子科学国家研究中心主任、北京大学席振峰院士和中国科学院化学研究所张德清研究员组织中心及兄弟高校、科研院所多位专家学者策划、撰写了“分子科学前沿丛书”。丛书紧密围绕分子体系的精准合成与制备、分子的可控组装、分子功能体系的构筑与应用三大领域方向,共9分册,其中“分子科学前沿”部分有5分册,“学科交叉前沿”部分有4分册。丛书系统总结了北京分子科学国家研究中心在分子科学前沿交

叉领域取得的系列创新研究成果,内容系统、全面,代表了国内分子科学前沿交叉研究领域最高水平,具有很高的学术价值。丛书各分册负责人以严谨的治学精神梳理总结研究成果,积极总结和提炼科学规律,极大提升了丛书的学术水平和科学意义。该套丛书被列入“十三五”国家重点图书出版规划,并得到了国家出版基金的大力支持。

我相信,这套丛书的出版必将促进我国分子科学研究取得更多引领性原创研究成果。

包信和

中国科学院院士

中国科学技术大学

总序二

化学是创造新物质的科学,是自然科学的中心学科。作为化学科学发展的新形式与新阶段,分子科学是研究分子的结构、合成、转化与功能的科学。分子科学打破化学二级学科壁垒,促进化学学科内的融合发展,更加强调和促进与材料、生命、能源、环境等学科的深度交叉。

分子科学研究正处于世界科技发展的前沿。近二十年的诺贝尔化学奖既涵盖了催化合成、理论计算、实验表征等化学的核心内容,又涉及生命、能源、材料等领域中的分子科学问题。这充分说明作为传统的基础学科,化学正通过分子科学的形式,从深度上攻坚重大共性基础科学问题,从广度上不断催生新领域和新方向。

分子科学研究直接面向国家重大需求。分子科学通过创造新分子和新物质,为社会可持续发展提供新知识、新技术、新保障,在解决能源与资源的有效开发利用、环境保护与治理、生命健康、国防安全等一系列重大问题中发挥着不可替代的关键作用,助力实现碳达峰碳中和目标。多年来的实践表明,分子科学更是新材料的源泉,是信息技术的物质基础,是人类解决赖以生存的粮食和生活资源问题的重要学科之一,为根本解决环境问题提供方法和手段。

分子科学是我国基础研究的优势领域,而依托北京大学和中国科学院化学研究所的北京分子科学国家研究中心(下文简称“中心”)是我国分子科学研究的中坚力量。近年来,中心围绕分子科学领域的重大科学问题,开展基础性、前瞻性、多学科交叉融合的创新研究,组织和承担了一批国家重要科研任务,面向分子科学国际前沿,取得了一批具有原创性意义的研究成果,创新引领作用凸显。

北京分子科学国家研究中心主任,北京大学席振峰院士和中国科学院化学研究所张德清研究员组织编写了这套“分子科学前沿丛书”。丛书紧密围绕分子体系的精准

合成与制备、分子的可控组装、分子功能体系的构筑与应用三大领域方向,立足分子科学及其学科交叉前沿,包括9个分册:《物质结构与分子动态学研究进展》《分子合成与组装前沿》《无机稀土功能材料进展》《高分子科学前沿》《纳米碳材料前沿》《化学生物学前沿》《有机固体功能材料前沿与进展》《环境放射化学前沿》《化学测量学进展》。该套丛书梳理总结了北京分子科学国家研究中心自成立以来取得的重大创新研究成果,阐述了分子科学及其交叉领域的发展趋势,是国内第一套系统总结分子科学领域最新进展的专业丛书。

该套丛书依托高水平的编写团队,成员均为国内分子科学领域各专业方向上的一流专家,他们以严谨的治学精神,对研究成果进行了系统整理、归纳与总结,保证了编写质量和内容水平。相信该套丛书将对我国分子科学和相关领域的发展起到积极的推动作用,成为分子科学及相关领域的广大科技工作者和学生获取相关知识的重要参考书。

得益于参与丛书编写工作的所有同仁和华东理工大学出版社的共同努力,这套丛书被列入“十三五”国家重点图书出版规划,并得到了国家出版基金的大力支持。正是有了大家在各自专业领域中的倾情奉献和互相配合,才使得这套高水准的学术专著能够顺利出版问世。在此,我向广大读者推荐这套前沿精品著作“分子科学前沿丛书”。



中国科学院院士

上海交通大学/中国科学院上海有机化学研究所

丛书前言

作为化学科学的核心,分子科学是研究分子的结构、合成、转化与功能的科学,是化学科学发展的新形式与新阶段。可以说,20世纪末期化学的主旋律是在分子层次上展开的,化学也开启了以分子科学为核心的发展时代。分子科学为物质科学、生命科学、材料科学等提供了研究对象、理论基础和研究方法,与其他学科密切交叉、相互渗透,极大地促进了其他学科领域的发展。分子科学同时具有显著的应用特征,在满足国家重大需求、推动产业变革等方面发挥源头发动机的作用。分子科学创造的功能分子是新一代材料、信息、能源的物质基础,在航空、航天等领域关键核心技术中不可或缺;分子科学发展高效、绿色物质转化方法,助力解决粮食、资源和环境问题,支撑碳达峰、碳中和国家战略;分子科学为生命过程调控、疾病诊疗提供关键技术和工具,保障人民生命健康。当前,分子科学研究呈现出精准化、多尺度、功能化、绿色化、新范式等特点,从深度上攻坚重大科学问题,从广度上催生新领域和新方向,孕育着推动物质科学跨越发展的重大机遇。

北京大学和中国科学院化学研究所均是我国化学科学研究的优势单位,共同为我国化学事业的发展做出过重要贡献,双方研究领域互补性强,具有多年合作交流的历史渊源,校园和研究所园区仅一墙之隔,具备“天时、地利、人和”的独特合作优势。本世纪初,双方前瞻性、战略性地将研究聚焦于分子科学这一前沿领域,共同筹建了北京分子科学国家实验室。在此基础上,2017年11月科技部批准双方组建北京分子科学国家研究中心。该中心瞄准分子科学前沿交叉领域的重大科学问题,汇聚了众多分子科学研究的杰出和优秀人才,充分发挥综合性和多学科的优势,不断优化校所合作机制,取得了一批创新研究成果,并有力促进了材料、能源、健康、环境等相关领域关键核心技术中的重大科学问题突破和新兴产业发展。

基于上述研究背景,我们组织中心及兄弟高校、科研院所多位专家学者撰写了“分子科学前沿丛书”。丛书从分子体系的合成与制备、分子体系的可控组装和分子体系的功能与应用三个方面,梳理总结中心取得的研究成果,分析分子科学相关领域的发展趋势,计划出版9个分册,包括《物质结构与分子动态学研究进展》《分子合成与组装前沿》《无机稀土功能材料进展》《高分子科学前沿》《纳米碳材料前沿》《化学生物学前沿》《有机固体功能材料前沿与进展》《环境放射化学前沿》《化学测量学进展》。我们希望该套丛书的出版将有力促进我国分子科学领域和相关交叉领域的发展,充分体现北京分子科学国家研究中心在科学理论和知识传播方面的国家功能。

本套丛书是“十三五”国家重点图书出版规划项目“当代化学化工学术精品丛书”的系列之一。丛书既涵盖分子科学领域的基本原理、方法和技术,也总结了分子科学领域的最新研究进展和成果,具有系统性、引领性、前沿性等特点,希望能为分子科学及相关领域的广大科技工作者和学生,以及企业界和政府管理部门提供参考,有力推动我国分子科学及相关交叉领域的发展。

最后,我们衷心感谢积极支持并参加本套丛书编审工作的专家学者、华东理工大学出版社各级领导和编辑,正是大家的认真负责、无私奉献保证了丛书的顺利出版。由于时间、水平等因素限制,丛书难免存在诸多不足,恳请广大读者批评指正!



北京分子科学国家研究中心

序

由邵元华、毛兰群两位教授主编的《化学测量学进展》一书即将出版,在此表示祝贺。该书的出版填补了我国在化学测量学方面的空白。

2017年国家自然科学基金委员会化学科学部根据国内外学科发展的趋势,在原有的分析化学学科的基础上,提出了新的资助领域——化学测量学。化学测量学旨在发展化学相关的测量策略、原理、方法与技术,研制各类分析仪器、装置和相关软件,研制各类检测试剂,以精准获取物质组成、分布、结构与性质的时空变化规律。该资助领域的提出是对于原有分析化学的拓展,使许多与测量学相关的专业人员可以申请该领域的项目。

为了体现国家研究中心的引领作用,并进一步推动我国分子科学研究更好更快地发展,北京分子科学国家研究中心协同华东理工大学出版社出版“分子科学前沿丛书”。本书是该丛书的分册之一,由北京大学邵元华教授和中国科学院化学所毛兰群研究员共同主编,邀请了北京分子科学国家研究中心分析与环境科学研究部学术骨干及部分中心外老师参与撰写。本书主要总结了北京分子科学国家研究中心在化学测量学中一些分支的研究进展,同时介绍了相应分支的基本原理,展望了未来化学测量学可能的发展方向。

感谢各位专家在百忙中参与该书的撰写。希望本书的出版能够展现北京分子科学国家研究中心在化学测量学方面的研究概貌,也能进一步促进我国在化学测量学方面的发展。

中国科学院院士

万立骏

2021年11月16日

前言

化学测量可以有不同的含义。本书将其定义为利用各种科学分支的相关原理及最新进展来测量化学体系信息的一门学问。它能深入分子、原子层次,去测量物质的性质、数量、结构及与此相关的功能等信息。化学测量研究涉及诸多方面,其基本路线应该是:挖掘测量所依据的理论和原理,构造测量的方法和装置,解决实际测量的问题并作反馈和改进。

化学测量学是在原分析化学的基础上发展起来的,是国家自然科学基金委员会化学科学部与时俱进地提出的新的支持领域,是对原分析化学的拓展。其方法学研究大致包括两大内容:一是直接开发理论以发展出测量新方法,二是通过应用来拓展或革新方法。

化学测量学的作用和前途,与教育有莫大的关系。如何把这门学识、功用以及它对社会、对国计民生、对国际交往和国家安全所产生的影响,告之天下,晓以利害,也是一门学问。可惜用功者少,关心者弱。本书或许算是一个开始,一种前瞻。

本书简单概括了北京分子科学国家研究中心这几十年来有关化学测量学相关研究的主要进展与研究成果。为了较全面地概括化学测量学及全书的整体性,我们也邀请了中心以外的学者参与了本书部分章节的撰写。

本书包括化学测量学基础(由陈义、邵元华撰写)、基于分子光谱分析的化学测量学(由马会民、赵美萍负责)、基于电化学的化学测量学(由毛兰群、邵元华负责)、微纳分离与分析(由吴海臣、黄岩谊负责)、质谱分析(由聂宗秀、刘小云负责)、基于核磁共振波谱学的化学测量学(由金长文、夏斌负责)、基于扫描探针显微镜的高分辨表面分析技术(由吴凯负责)和大数据分析化学测量学(由南开大学邵学广负责)等八章。感谢万立骏院士为本书撰写序。

由于化学测量学是一门交叉学科,目前还没有系统的、串联各个部分的基础知识总结。因此以下各章节均或多或少地介绍了其所基于的测量原理及方法与技术,但主要是介绍北京分子科学国家研究中心在该领域的研究进展与成果。期望在不远的将来,中国的有志青年学者能够总结和归纳出化学测量学的基本理论。

本书作为一种尝试,目的之一是抛砖引玉。由于撰写时间仓促、涉及人员较多,难免存在疏漏与不足之处,欢迎同行随时批评指正。

邵元华 毛兰群

2021年6月

Chapter 1

第 1 章 化学测量学基础

陈义¹, 邵元华²

¹中国科学院化学研究所, 北京
分子科学国家研究中心

²北京大学化学与分子工程学院,
北京分子科学国家研究中心

Chapter 2

第 2 章 基于分子光谱分析的 化学测量学

万琼琼¹, 赵美萍², 马会民¹

¹中国科学院化学研究所, 北京
分子科学国家研究中心

²北京大学化学与分子工程学院,
北京分子科学国家研究中心

| | |
|-----------------------|-----|
| 1.1 化学测量学基础 | 003 |
| 参考文献 | 007 |
| 2.1 绪论 | 011 |
| 2.2 光谱分析的基本原理 | 012 |
| 2.3 光谱分类 | 014 |
| 2.4 常见分子光谱分析方法 | 015 |
| 2.4.1 紫外可见分光光度法 | 015 |
| 2.4.2 红外光谱法 | 018 |
| 2.4.3 拉曼光谱法 | 020 |
| 2.4.4 分子荧光光谱法与分子磷光光谱法 | 022 |
| 2.5 光学探针与传感分析 | 026 |
| 2.5.1 光学探针的结构特征与设计策略 | 030 |
| 2.5.2 光学探针的分类 | 034 |
| 2.6 展望 | 047 |
| 参考文献 | 048 |

Chapter 3

第 3 章 基于电化学的化 学测量学

毛兰群¹, 于萍¹, 李美仙², 周恒辉², 邵元华²

¹中国科学院化学研究所, 北京分子科学国家研究中心

²北京大学化学与分子工程学院, 北京分子科学国家研究中心

| | |
|----------------------------------|-----|
| 3.1 绪论 | 053 |
| 3.2 脑化学活体电化学分析主要进展 | 054 |
| 3.2.1 调控电极/脑界面电子转移的活体电化学分析研究进展 | 056 |
| 3.2.2 调控离子传输的神经化学分析研究进展 | 061 |
| 3.2.3 展望 | 069 |
| 3.3 软界面电分析化学主要进展 | 069 |
| 3.3.1 发展可用于探讨软界面的技术与方法 | 070 |
| 3.3.2 液/液界面上电荷转移反应动力学测量及微观界面研究 | 072 |
| 3.3.3 基于液/液界面所发展技术的应用 | 074 |
| 3.4 电化学传感 | 076 |
| 3.4.1 基于碳基材料的电化学传感器 | 076 |
| 3.4.2 基于电致化学发光用于心肌梗死标志物检测的电化学传感器 | 077 |
| 3.4.3 基于纳米二硫化钼的电化学生物传感器 | 078 |
| 3.5 展望 | 080 |
| 参考文献 | 081 |

Chapter 4

第 4 章 微纳分离与分析

郭振鹏¹, 陈义¹, 郭秉元¹, 吴海臣¹, 庞玉宏², 黄岩谊², 康力², 白玉², 刘虎威², 黄嫣嫣¹, 赵睿¹

¹中国科学院化学研究所, 北京分子科学国家研究中心

²北京大学化学与分子工程学院, 北京分子科学国家研究中心

| | |
|---------------------------------|-----|
| 4.1 绪论 | 087 |
| 4.2 微量样品超快分离分析 | 087 |
| 4.2.1 微克级新鲜植物中超痕量赤霉素的定量测定 | 088 |
| 4.2.2 天牛性信息素活体分析方法 | 088 |
| 4.2.3 超快 CE | 089 |
| 4.3 纳米孔单通道分析 | 098 |
| 4.3.1 基于纳米孔单分子技术的 DNA 编码分子构建 | 100 |
| 4.3.2 DNA 编码分子结合免疫技术在抗原分子检测中的应用 | 102 |

| | | |
|------------|----------------------------------|------------|
| 4.3.3 | 利用 DNA 编码分子构建分子信标用于抗体及 DNA 的检测 | 103 |
| 4.3.4 | 基于纳米孔技术构建信号开启、猝灭及比率型 DNA 探针 | 108 |
| 4.4 | 微流控技术 | 110 |
| 4.4.1 | 微流控单细胞核酸的扩增与测序分析 | 111 |
| 4.4.2 | 基于微流控技术的新型高通量 DNA 测序方法 | 115 |
| 4.5 | 脂质组学分析 | 117 |
| 4.5.1 | 脂质组学分析简介 | 117 |
| 4.5.2 | 脂质组学分析的样品制备技术 | 118 |
| 4.5.3 | 气相色谱法和超临界流体色谱法用于脂质组学分析 | 119 |
| 4.5.4 | 高效液相色谱法用于脂质组学分析 | 120 |
| 4.6 | 基于多肽识别的微纳分离与分析 | 121 |
| 4.6.1 | 微纳分离分析与靶向多肽的筛选鉴定 | 121 |
| 4.6.2 | 多肽识别与生物传感 | 123 |
| 4.6.3 | 基于多肽微纳组装体的分析新方法 | 125 |
| 4.7 | 展望 | 127 |
| | 参考文献 | 127 |
| | | |
| 5.1 | 绪论 | 133 |
| 5.1.1 | 引言 | 133 |
| 5.1.2 | 质谱仪的基本原理与构造 | 133 |
| 5.2 | 质谱新方法发展 | 134 |
| 5.2.1 | 疾病生物标志物的质谱检测和成像 | 135 |
| 5.2.2 | 基于 MALDI-TOF-MS 的小分子及纳米载药体系的质谱研究 | 138 |
| 5.2.3 | 完整生物颗粒质谱分析的新技术 | 144 |

Chapter 5

第 5 章 质谱分析

刘小云¹, 聂宗秀²

¹ 北京大学基础医学院

² 中国科学院化学研究所, 北京
分子科学国家研究中心