

“十五”国家重点图书

化学进展丛书

化学学科进展

张礼和 主编



化学工业出版社
化学与应用化学出版中心

· 北 京 ·

(京) 新登字 039 号

图书在版编目 (CIP) 数据

化学学科进展/张礼和主编. —北京: 化学工业出版社, 2005.6

(化学进展丛书)

ISBN 7-5025-7366-6

I. 化… II. 张… III. 化学-研究-进展-世界
IV. 06-1

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2005) 第 063011 号

“十五”国家重点图书

化学进展丛书

化学学科进展

张礼和 主编

责任编辑: 梁虹 成荣霞

文字编辑: 李玥

责任校对: 陶燕华

封面设计: 郑小红

*

化学工业出版社 出版发行
化学与应用化学出版中心

(北京市朝阳区惠新里3号 邮政编码 100029)

购书咨询: (010) 64982530

(010) 64918013

购书传真: (010) 64982630

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

*

新华书店北京发行所经销

大厂聚鑫印刷有限责任公司印刷

三河市东柳装订厂装订

开本 720mm×1000mm 1/16 印张 28 字数 557 千字

2005 年 8 月第 1 版 2006 年 3 月北京第 2 次印刷

ISBN 7-5025-7366-6

定 价: 65.00 元

版权所有 违者必究

该书如有缺页、倒页、脱页者, 本社发行部负责退换

前 言

近年来，国家对基础研究给予了极大关怀并加大了投入，促进了我国科学技术的快速发展。就国家自然科学基金对化学学科的投入来说，从 1999 年的 0.9042 亿元增加到 2004 年的 3.0346 亿元。尤其是进入 21 世纪，随着基础研究投入的增加、人才队伍的建设以及各方面措施的配合，我国化学科学（化学与化工学科）基础研究取得了长足的进步。根据美国《化学文摘》收录的论文统计资料显示，我国发表化学学术论文从 1989 年占全世界化学论文总数的 3.7%，上升到 2003 年化学总论文数的 10.0%；SCI 论文在 1994 年至 2004 年 10 年期间成为继美国、日本和德国之后的第四位。据 2003 年中国科技论文统计结果，2003 年化学科学被国际引用的 SCI 论文数占全国所有学科被引用的 SCI 论文篇数的 33%，被引用总次数占全国所有学科被引用的总次数的 35%。

化学科学除了在论文数量上有较大进展外，在论文的质量上也有了较大的提高。以国际化学领域顶尖学术期刊“J. Am. Chem. Soc.”（《美国化学会志》）和“Angew. Chem. Int. Ed.”（《德国应用化学》）为例，我国大陆化学工作者在从 1999 年在“J. Am. Chem. Soc.”上发表 6 篇论文增加到 2004 年的 65 篇；从 1999 年在“Angew. Chem. Int. Ed.”上发表 5 篇论文增加到 2004 年的 60 篇，发展势头良好。2004 年我国有 2 篇论文 3 次被“Science Watch”选为化学热点论文。中国化学科学基础研究在近十年里取得的进展已经引起世界化学界的广泛关注。

化学科学作为一门实用科学在国民经济中起着重要作用，而知识产权是国家科技竞争力的一个重要标志。我国化学科学界从 1995 年申请中国专利 237 件到 2003 年申请 6302 件，有了一个较大的发展，说明我国化学化工研究人员越来越重视科技成果的转化，重视知识产权的保护。但是，我们也必须清醒地看到，我国化学界在国际上申请的专利还很少，如 2003 年申请的美国专利只有 112 件（美国化学界申请专利为 10896 件），甚至比我国台湾地区还少（127 件）。特别在一些国际热点领域如纳米科技的研究方面，在纳米器件以及纳米技术在生命科学中的应用等方面的研究还很薄弱。

化学在自身发展的同时特别加强了研究生命、材料、信息、能源、环境等领域提出的科学问题，开展交叉学科和新兴学科的研究，充分发挥化学中心科学的作用。本书从我国化学科学基础研究近年来所取得的进展为立足点，来看国际化学科学发展的趋势，展望未来化学科学的发展前景，突出了新兴学科如绿色化学、化学生物学、纳米化学、超分子化学等学科进展的描述和展望。作者大多是我国化学基础研究的一线研究人员和国家自然科学基金委员会的学科项目主任，他们对本学科

的基础研究有较深刻的了解。由于每个学科有自己的特点和发展的不平衡，每章的长短有所不同，其中如超分子化学、纳米化学、绿色化学、化学生物学可能在不同的学科进展中有不同的侧重。

目前，全国科技界正在制定科技发展中长远规划和“十一五”学科发展战略与优先资助领域，希望本书的出版能为上述工作提供参考。本书编辑过程中，国家自然科学基金委员会化学科学部咨询专家委员会以及我国化学、化工界的科学研究人员对本书内容和相关材料曾做过多次研讨，他们对我国化学科学的发展做出了贡献，并对今后化学学科的发展提出了重要建议，在此向他们表示衷心感谢。国家自然科学基金委员会化学科学部梁文平副主任在组织编辑、收集资料等方面为本书出版做了大量工作，化学科学部各学科主任及综合处的同志也都做出了巨大努力，在此一并表示感谢。

张礼和

2005 年 3 月

目 录

第 1 章 新世纪化学科学发展战略	梁文平, 唐晋, 张礼和, 王夔	1
1.1 化学界目前存在的困惑剖析		2
1.2 化学学科发展与化学分支学科重组的思考		3
1.3 化学与其他学科的交叉前沿和突破口的思考		3
1.4 化学未来新发展的契机		4
1.5 原始创新是化学学科发展的灵魂		5
1.6 化学科学与人类安全的关系		6
1.7 21 世纪化学学科发展的方向		7
1.7.1 寻求结构多样性的研究与功能研究结合		7
1.7.2 加强复杂化学体系的研究		8
1.7.3 重视化学信息学和高效计算机信息处理在化学中的应用		8
1.7.4 新实验方法的建立和方法学研究		9
1.7.5 跟踪、分析、模拟化学反应过程		10
参考文献		10
第 2 章 21 世纪的化学是研究泛分子的科学	徐光宪	12
2.1 一门科学的定义至少有三个属性		12
2.2 21 世纪化学的定义和内涵		12
2.2.1 化学的一维定义		12
2.2.2 化学的二维定义		13
2.2.3 化学的三维定义		14
2.2.4 化学的四维定义		14
2.3 21 世纪化学研究的六大趋势		14
2.3.1 更加重视国家目标, 更加重视不同学科之间的交叉和融合		14
2.3.2 理论和实验更加密切结合		14
2.3.3 在研究方法和手段上, 更加重视尺度效应		14
2.3.4 合成化学的新方法层出不穷		15
2.3.5 分析化学已发展成为分析科学		15
2.4 21 世纪化学的四大难题 (中长期)		15
2.4.1 化学的第一根本规律——化学反应理论和定律		16
2.4.2 化学的第二根本规律——结构和性能的定量关系		16
2.4.3 纳米尺度的基本规律		17
2.4.4 活分子运动的基本规律		18
2.5 21 世纪化学的 11 个突破口 (10~20 年)		18

2.6 20 世纪化学的盲点	19
参考文献	21
第 3 章 无机化学进展	
..... 洪茂椿, 高恩庆, 严纯华, 高松, 郭子建, 陈接胜, 谢毅, 陈荣	22
3.1 超分子化学进展	22
3.1.1 晶体工程	22
3.1.2 配位聚合物	23
3.1.3 金属纳米分子	28
3.2 光电功能配合物分子固体的研究进展	30
3.2.1 稀土配合物电致发光材料及器件的研究进展	30
3.2.2 过渡金属配合物发光材料研究	33
3.2.3 手性及非中心对称配位聚合物的组装及功能	35
3.2.4 导电配合物及三阶非线性光学和光限制材料	36
3.3 磁分子材料研究进展	37
3.3.1 分子内自旋载体之间相互作用及其机理的实验和理论研究	37
3.3.2 三维有序分子磁体 (尤其是高相变温度的分子磁体)	38
3.3.3 低维分子磁体 (包括单分子磁体及单链磁体)	41
3.3.4 具有复合功能的分子磁性材料	41
3.3.5 总结与展望	43
3.4 生物无机化学	43
3.4.1 金属蛋白的突变、结构及性质研究	43
3.4.2 金属酶模拟	44
3.4.3 金属及其配合物与生物大分子的相互作用和识别	45
3.4.4 金属离子生物效应的化学基础	46
3.4.5 无机药物化学	47
3.4.6 生物矿化	48
3.4.7 生物无机化学的发展趋势	49
3.5 无机固体材料	49
3.5.1 固体导电材料	50
3.5.2 无机磁性材料	51
3.5.3 无机光学材料	52
3.5.4 固体传感材料	53
3.5.5 微孔与介孔材料	54
3.6 纳米结构的化学合成	56
3.6.1 纳米结构和纳米科技简介	56
3.6.2 纳米结构的化学合成进展	57
3.6.3 纳米结构研究和纳米科技前景展望	63
参考文献	63

第4章 有机化学进展

..... 陆熙炎, 麻生明, 席振峰, 黄培强, 蒋华良, 席真,
张德青, 裴坚, 姚祝军, 丁奎岭, 刘中立, 于德泉,
庾石山, 王东, 翟宏斌, 杜灿屏, 陈拥军 75

4.1 有机合成化学	76
4.1.1 有机合成的化学效率 (一瓶反应方法学)	77
4.1.2 多样性导向的有机合成	80
4.1.3 反应控制	81
4.1.4 反应原料	83
4.2 金属有机化学	85
4.2.1 引言	85
4.2.2 学科现状与问题	86
4.2.3 学科发展趋势	101
4.2.4 应重视的领域和方向	101
4.2.5 综述	102
4.3 不对称催化	102
4.3.1 引言	102
4.3.2 不对称催化研究的发展现状	103
4.3.3 不对称催化研究的发展趋势与一些具有挑战性的研究课题	113
4.4 物理有机化学	114
4.5 天然产物合成	117
4.5.1 天然产物合成化学的目标分子	118
4.5.2 天然产物合成的艺术性、高效率 and 实用性	120
4.5.3 以天然产物合成化学为桥梁的学科交叉	123
4.5.4 天然产物全合成的后续研究与类天然产物化学	125
4.5.5 我国的天然产物合成化学	126
4.5.6 展望	129
4.6 天然产物化学	129
4.6.1 引言	129
4.6.2 国际天然产物化学的发展趋势	131
4.6.3 我国天然产物化学的现状与问题	144
4.6.4 应重视的研究领域和方向	145
4.7 绿色化学	146
4.7.1 以绿色化学的原理审视和发展有机合成方法学	147
4.7.2 新的或非传统的“洁净”反应介质的开发利用	150
4.7.3 替代有毒、有害的化学品	152
4.8 农药化学	153
4.8.1 引言	153

4.8.2	农药研究的现状及发展趋势	154
4.8.3	应重视的研究领域与方向	157
4.8.4	综述	159
4.9	药物化学与药物设计	160
4.9.1	引言	160
4.9.2	药物化学进展	160
4.9.3	药物设计进展	166
4.9.4	药物化学与药物设计的发展趋势及应重视的研究方向	168
4.10	有机新材料化学	172
4.10.1	有机发光材料	174
4.10.2	有机场效应晶体管材料	175
	参考文献	179

第5章 物理化学进展 王鸿飞, 杨俊林 201

5.1	正确认识化学和物理化学	201
5.1.1	化学面临的学科声望问题	201
5.1.2	物理化学: 消失于“无处不在”中的学科	204
5.1.3	物理化学和物理化学家能做什么	205
5.2	物理化学学科的成长过程及基本内容	206
5.2.1	要么是物理化学, 要么是核物理	206
5.2.2	物理化学起源于欧洲, 成长于美国	207
5.2.3	物理化学是大国和强国的基础学科	209
5.2.4	物理化学的核心内容	210
5.3	物理化学学科前沿与发展趋势的回顾	212
5.4	物理化学的生命力和创新特点	214
5.5	物理化学前沿动态、研究重点、相关领域和增长点	217
5.6	物理化学学科近二十年来的重要进展	223
5.7	展望	226
	参考文献	228

第6章 高分子科学 董建华 230

6.1	引言	230
6.2	高分子合成化学	233
6.2.1	活性自由基聚合	234
6.2.2	超支化和树枝状高分子	235
6.2.3	新型液晶高分子合成	236
6.2.4	旋光高分子	237
6.2.5	有机金属催化烯烃聚合反应	237
6.2.6	微波技术辅助合成	241
6.2.7	环状高分子合成	241

6.2.8	高分子合成新技术	242
6.2.9	生物可降解高分子合成	243
6.2.10	酶催化聚合与微生物合成	244
6.2.11	刚性棒状高分子	247
6.3	高分子物理与高分子物理化学	247
6.3.1	高分子凝聚态物理	248
6.3.2	理论高分子物理	256
6.4	光、电、磁活性高分子	262
6.4.1	有机与高分子电致发光国内外动态	263
6.4.2	国家自然科学基金项目资助下取得的研究重要进展	264
6.4.3	光电磁活性高分子的新方向	268
6.5	生物医用高分子与大分子化学生物学	281
6.5.1	发展历史回顾	281
6.5.2	高分子科学与生命科学的桥梁	282
6.5.3	高分子金属配合物(络合物)研究	283
6.5.4	聚电解质与生物大分子	283
6.5.5	旋光聚合物	284
6.5.6	受生物启发或模拟生物体系的高分子	285
6.5.7	抗菌高分子	285
6.5.8	高分子纳米纤维固载酶	286
6.5.9	医用高分子	287
6.5.10	受到国际关注的几项中国学者的研究成果	289
6.5.11	高分子“温度计”	290
6.5.12	界面相互作用研究新方法	290
6.5.13	单一活化同时多重释放的超支化高分子	291
6.5.14	血液净化高分子材料	291
6.5.15	综述	291
6.6	超分子聚合物与高分子组装	292
6.6.1	超分子聚合物	292
6.6.2	高级有序结构构筑	293
6.6.3	层状构筑与层间化学反应	295
6.6.4	超支化聚合物组装形成宏观尺度管	295
6.6.5	嵌段共聚物的自组装	296
6.6.6	综述	296
6.7	高分子纳米微结构	297
6.7.1	高分子纳米纤维	297
6.7.2	纳米尺度聚合物“铅笔”	298
6.7.3	高分子纳米管	298
6.7.4	柔软的聚电解质纳米管	299

6.7.5	高分子纳米线	300
6.7.6	纳米复合材料	300
6.7.7	中空微胶囊	303
6.7.8	纳米尺度多层交替复合结构	306
6.7.9	仿荷花叶纳米微结构	306
6.7.10	高分子纳米图案化	306
6.8	高分子加工	306
6.8.1	高分子反应加工	307
6.8.2	双向拉伸	309
6.8.3	高压混合技术	309
6.8.4	流变学研究	309
6.8.5	计算机辅助橡胶加工新方法	309
6.8.6	电缆绝缘材料加工新途径、新技术	310
6.8.7	聚丙烯细旦纤维加工	311
6.8.8	用于环保领域的聚烯烃中空纤维膜加工技术	311
6.8.9	聚合物动态塑化成型	312
6.8.10	纳米多层有序结构	312
	参考文献	313

第7章 分析化学进展

	 鞠焱先, 刘虎威, 张新荣, 潘远江, 刘买利, 庄乾坤	316
7.1	引言	316
7.2	电分析化学与生物传感	317
7.2.1	生物膜电分析化学	317
7.2.2	蛋白质电化学与纳米电分析化学	318
7.2.3	超分子电分析化学	320
7.2.4	电化学免疫分析与免疫传感器	321
7.2.5	DNA 电化学分析与序列识别	323
7.2.6	电致发光分析	323
7.2.7	凝胶膜生物传感器与酶促反应的电分析化学	325
7.3	色谱和毛细管电泳	326
7.3.1	高效液相色谱	326
7.3.2	毛细管电泳	328
7.3.3	气相色谱	329
7.3.4	样品处理	330
7.3.5	其他	330
7.4	光谱分析与光谱探针	331
7.4.1	单分子与单细胞的光谱分析	331
7.4.2	生物大分子的光谱探针	333
7.4.3	纳米材料的光谱分析	335

7.4.4	光化学传感器	337
7.4.5	光谱指纹图谱与复杂物质分析	339
7.4.6	光谱高通量分析	340
7.4.7	光谱联用技术与元素形态分析	341
7.4.8	对我国光谱分析未来发展战略的几点思考	342
7.5	现代质谱分析技术	343
7.5.1	新型离子化技术	343
7.5.2	质谱在生物大分子研究中的应用	346
7.5.3	质谱在组合化学研究中的应用	347
7.5.4	小结与展望	349
7.6	核磁共振波谱技术	350
7.6.1	生物分子的液体 NMR 研究进展	351
7.6.2	基于液体 NMR 的代谢组学研究	356
7.6.3	固体 NMR 的研究进展	358
7.6.4	其他	360
7.7	化学计量学与化学信息学	360
7.8	综述	362
	参考文献	363

第 8 章 环境化学学科进展

	 刘景富, 江桂斌, 朱利中, 周启星, 王晓蓉, 朱彤, 王子健, 孔繁祥, 陆贻通, 叶常明, 王春霞	370
8.1	引言	370
8.2	环境分析化学	371
8.2.1	研究对象	371
8.2.2	分析技术	373
8.2.3	样品分析	377
8.2.4	发展趋势	381
8.3	环境污染化学	382
8.3.1	大气环境化学	382
8.3.2	水环境化学	392
8.3.3	土壤环境化学	396
8.4	污染生态化学进展	402
8.4.1	环境污染对陆地生态系统的影响	403
8.4.2	环境污染对水生生态系统的影响	406
8.4.3	大气污染生态化学	409
8.4.4	环境污染的分子毒理机制	411
8.4.5	今后研究展望	414
	参考文献	415

第 9 章 化学工程学科的发展战略 孙宏伟 417

9.1 引言 417

9.2 历史回顾 418

9.2.1 石油化工 419

9.2.2 制药工业 420

9.3 世界主要国家的发展战略 421

9.3.1 美国的发展战略 421

9.3.2 欧洲的发展战略 422

9.3.3 日本的发展战略 422

9.4 我国过程工业的现状和问题 423

9.5 我国化学工程学科的发展战略 425

9.5.1 发展思路 425

9.5.2 战略目标 426

9.6 优先发展的研究方向 427

9.7 采取的措施和建议 428

9.8 展望 429

参考文献..... 430

第 1 章 新世纪化学科学发展战略^①

梁文平^a，唐 晋^a，张礼和^{a,b}，王夔^b

(^a国家自然科学基金委员会化学科学部；^b北京大学医学部药学院)

在过去的 100 多年里，化学作为一门核心、实用、创造性科学^[1,2]，已经为人类认识物质世界和人类的文明进步做出了巨大的贡献。化学寻求结构多样性和分子多样性，合成制备了数以千万计的化学物质，发展了化学合成理论和技术，为阐明生命的起源、发现生物活性物质、新材料以及新药物的设计合成奠定了理论和实验基础。化学研究物质之间的变化规律，阐明各类化学反应的机理，从真实时空的水平上认识物质转化的化学过程。化学创立了研究物质结构和形态的理论、方法和实验手段，认识了物质的结构与性能之间的关系和规律，为设计具有各种特殊功能的化学品提供了有效的方法和手段。

面对生命科学、材料科学、信息科学等其他学科迅猛发展的挑战和人类对认识和改造自然提出的新要求，化学在不断开拓新的研究领域和思路的同时，不断地创造出新的物质和品种来满足人民的物质文化生活，造福国家，造福人类。当前，资源的有效开发利用、环境保护与治理、社会和经济的可持续发展、人口与健康 and 人类安全、高新材料的开发和应用等，向我国的科学工作者提出一系列重大的挑战性难题，迫切需要化学家在更深更高层次上进行化学的基础和应用基础研究，探索新现象，提出新理论，创建新方法，并从学科自身发展和为国家目标服务两个方面不断提出新的思路 and 战略设想，以适应 21 世纪科学发展的需求。

进入 20 世纪 90 年代以来，国家自然科学基金委化学科学部就注意到化学学科内部的发展与来自外部的需求之间的距离，注意到化学在自然科学体系中的地位与作用的变化，必须重新考虑学科建设问题。在“九五”计划制定之初，经过反复讨论，就开展了对优先资助领域的研究和调整，提出了重视学科交叉，淡化二级学科的原则，引起了化学界的广泛的讨论。在过去的 5 年中逐渐得到广大化学界的共识。20 世纪末，在长期酝酿后又提出了几个新的发展领域，组织过多次讨论，提出要开展分子以上层次化学研究的创新思想，引起了又一轮的化学界的讨论。通过这一过程，吸取了经验。为了探索、研讨与展望化学发展趋势、发展战略及十年或更长远化学发展前景，使化学这一传统学科成为知识创新和技术创新的源头，国家自然科学基金委员会化学科学部在几年来组织专家研讨和参与有关化学学科发展战

① 本章内容曾在《中国基础科学》2000 年第 5 期发表过，现做了部分改动。

略问题,尤其是化学学科发展战略研讨会第 128 次香山会议^[3]和大陆、台湾、香港两岸三地香港 21 世纪化学发展前景讨论会,使化学界逐渐对我国化学学科的现状分析、存在的问题的根源和未来发展战略形成基本共识。

1.1 化学界目前存在的困惑剖析

浸沉在 20 世纪化学所创造的辉煌之中的化学家自信在合成制备新分子新材料、控制反应过程以及获取物质的组成结构信息和构-性-效关系方面有无限的潜力。但是,就在化学家继续抱着创造新物质、新材料为人类的生存和生存质量的提高做出新的贡献的时候,他们却感觉化学的作用和地位似乎被淡化了。似乎化学从认识、控制和改变客观世界的核心科学以及引导其他学科前进的牵头学科中退后了,这就是化学界目前存在的困惑。这里有客观和主观两方面的原因。

从客观上讲,首先是化学学科和技术的进步使一部分化学研究方法自动化、计算机化。各种合成仪和分析用结构测定用的仪器以及各种计算机软件的出现使人误认为分析与合成化学这两大手段已经不是科学而是技术了。其次,19 世纪末 20 世纪初物质科学的一系列研究成果(从 1900 年发表量子理论起)决定了物质科学的大方向和基础理论研究的主流:寻求物质世界的微观和统一解。物理学成为 20 世纪前半叶的带头学科,也使化学研究的理论、观点和方法趋于物理化,期望在量子化学基础上寻求所有化学过程的统一理论。其后,生物科学从化学获取关于物质结构和性质关系的概念和研究方法,在分子层次突破后,进入基因为中心的研究领域和从原来研究生物和生物分子变成创造新生物和新生物分子的科学。因此,20 世纪后期的生物科学成为带头学科。这时化学的一部分分化成为生物化学,而化学没能及时在生物科学研究中定位,推动生命体系中的研究而有所突破。还有一个客观原因是在创造新的肥料、农药、医药、材料方面以及解决工业农业生产和环境中的问题时,化学研究的原理、机理和方法处于上游,必须经过其他科学技术才能转化为可资利用的物质和可运作的方法。

从主观原因看,首先是迄今为止化学研究的主流仍以创造新分子新材料为目标,因而过多地注意建立新合成方法和获得新型结构,而对分子的功能研究重视不够。另外,过多重视细微的、结构的、本质的微观研究,较少注意快速发展的科学技术对化学理论、观点和方法提出的大量新问题。使我们的理论研究没能跟上需要。此外,在我国还有一些原因,如化学工业不够发达,创造有自主知识产权的产品的意识不够强;在学科交叉融合中,化学先是没有抓住机会,其后又没有能够找到起主导作用的研究方向和领域;化学作为精细学科,在研究生物、环境、材料等现实问题时缺少必要的想像力。正是由于化学学科存在的上述现状导致了化学学科的重要性在表现上的下降。从事化学研究的人员由于生物和数理基础与现代科学技术发展的要求有一定的差距,使得进入材料学科、生命科学或其他学科往往力不从心。

1.2 化学学科发展与化学分支学科重组的思考

近十年中,国家自然科学基金会化学科学部曾经组织多次专题调研和讨论,1999年组织了专家咨询组和与中国科学院化学部共同组成的“2015”化学学科发展远景规划软课题组,以香山会议等多种形式征求科学界对化学学科发展、重组的建议和意见,取得了基本共识;随着科学技术的迅猛发展,化学要从传统的只注重研究原子和分子的反应和变化规律和按无机化学、有机化学、物理化学、分析化学、高分子化学来划分二级学科框框中解放出来,向整体化多层次发展。化学可以由原子层次、分子片层次、分子层次、超分子层次、多分子聚集态层次等不同层次来划分研究对象。由此形成原子层次的化学、分子片层次的化学、分子层次的化学、超分子层次的化学、宏观聚集态化学、介观聚集态化学、复杂体系的化学等。化学界内部应互动调整,更好地交叉、重组,将不同学科的理论、方法、思想和研究方法融入化学。综合上述分析,化学学科可以从研究内容和方法来划分形成新的二级学科,如合成化学(合成方法学、手性合成、模板合成等)、分离化学(萃取化学、离子交换、色层分离等)、分析化学(电分析化学、光和波谱分析化学、化学计量学、在线原位分析等)、物理化学(化学热力学、结构化学、催化化学、表面/界面化学、超临界化学等)、理论化学(计算化学、量子化学、化学统计学、非线性化学等)等。根据将现代数学、物理、信息方法融入化学,赋予化学更多的生命活力和创造力的原则,也可以从学科交叉来重新划分,如与生命科学交叉的化学生物学,与材料科学交叉的纳米(材料)化学,与资源和环境科学交叉的绿色化学,与数学、信息和生命科学交叉的化学信息学等。随之而来对化学科学的定义也有必要重新考虑。香山会议提出了一个很有参考价值的定义,即化学是主要研究从原子、分子片、分子、超分子到分子和原子的各种不同尺度和不同复杂程度的聚集态和组装态的合成和反应、分离和分析、结构和形态、物理性能和生物活性及其规律和应用的自然科学^[4]。

1.3 化学与其他学科的交叉前沿和突破口的思考

从目前国际化学发展的趋势和热点来看,化学科学的前沿和热点集中在^[5,6]:①以可持续发展为目标的绿色化学;②化学反应动态学和理论化学;③在研究生物活性及光电磁物理功能与结构和化学性质的关系的基础上合成功能化合物;④生命体系中的化学过程;⑤非常规条件下的化学行为;⑥人类健康相关的分析方法和超快速、超微量、在位、活体分析和检测手段;⑦分子以上层次化学与纳米化学以及化学反应中的尺度效应等七个方面。

有三个领域的内容值得研究。第一,什么是化学信息学?是否应该使化学信息

学发展成为一个新的二级学科？第二，最新出现的所谓化学生物学，它与生物化学有何不同？香山会议曾认为化学生物学应该成为化学发展的一个重要领域，并预期很可能成为化学科学发展的一个新的增长点。第三，关于化学中的理论问题，值得注意的有相干控制的化学，化学中的非线性问题和手性（类手性）对称性问题，分子自复制中的理论问题，遗产密码如何控制自复制化学过程的问题以及纳米凝聚相的化学活性问题等。会议认为，理论化学和化学生物学可能是化学发展将要出现的新突破口，而绿色化学将成为 21 世纪人类安全、生态经济和工业的关键。

在对化学反应的理解方面，现代科学技术的发展使我们有可能阐明化学反应的全过程，包括介于反应物与生成物之间的不稳定结构排列。化学将会利用现代科学技术手段揭示化学变化的瞬态面貌，阐明决定化学反应速度的各种因素和各种反应机理。现在化学科学已具有新的研究手段，能够及时地观察最快的化学反应过程，对反应的位能面进行理论计算，在微观的水平上考察化学变化，追踪分子内和分子间的能量转移。

21 世纪化学科学的研究层次将会拓宽，分子间在不同层次上的相互作用将成为化学家关注的重点之一。虽然分子间的作用力如氢键和范德华力等是化学中的基本概念，但这些弱作用力的本质，这些弱作用力对分子聚集的影响等问题，还有待解决。在化学界，已经有了一个基本的共识，注重分子间的弱相互作用研究，将会开辟一个全新的化学研究空间，给化学科学带来新的发展机遇，同时对材料科学和生命科学的发展有重要意义。

生命体系中的化学问题研究仍将是科学研究的前沿。值得注意的是，以利用化学理论、研究方法和手段来探索生物医学问题的化学生物学正在形成。可以预测，化学生物学将成为未来 20 年或更长一些时间内的一个重要前沿学科方向之一。

近年来，纳米化学和分子纳米技术越来越受到世界各国科技界的关注。纳米化学的发展使人们对纳米物质本性的认识有了深入了解的可能，这将对发现新的纳米材料，开发具有特殊性能的纳米材料，如纳米磁性材料、纳米陶瓷材料、纳米催化剂、纳米信息材料、纳米润滑材料等，以及开辟新的应用途径起到巨大的推动作用。

自 20 世纪 90 年代以来，绿色化学得到普遍关注。绿色化学的主体思想是采用无毒、无害的原料和溶剂，利用新化学反应建立新合成路线和工艺，达到高选择性、生产环境友好的产品，并且经济合理。绿色化学是与生态环境协调发展的、更高境界的化学，它要求化学家重新考虑化学问题，从源头上消除任何污染^[7]。这是 21 世纪赋予化学家们的一项重要任务。

1.4 化学未来新发展的契机

化学界普遍认为，化学正酝酿着重要进展。这是由于：①各相关科学（主要是

生物学和材料科学)与化学在大量问题上相遇,化学家开始发现其中的化学基础问题,而相关学科的科学家也意识到有些根本问题需要化学解决;②可持续发展的战略向化学科学提出了大量化学基础问题,国民经济的需求和化学学科自身发展的需求也已经结合成为推动21世纪化学学科发展的动力;③化学已经在理论和方法上有了相当的积累成果。但是必须把握下列几点原则,才能使化学科学有更大发展:微观研究与宏观研究结合;注重多层次、多尺度的研究;研究要由复杂到简单,由简单到复杂,不断升华;注重静态与动态(过程)研究的结合;寻找其他领域中必须化学解决而化学还未能解决的基本问题。

1.5 原始创新是化学学科发展的灵魂

基础研究是人类文明进步的动力,是科技与经济进步的源泉和后盾,是新技术、新发明的先导,也是培养人才的摇篮。基础研究的核心在于创新,而创新就要允许失败。要努力营造一个有利于激励原始创新的良好环境,推动化学源头的创新,取得基础研究的突破,加快发展我国的化学基础研究的发展。要在坚持运用竞争机制、择优支持的同时,营造一个开放的、宽松的环境,以充分尊重和保护科学家的兴趣和首创精神,使不同学术思想、观点、学派之间能进行平等的竞争,鼓励科学工作者在学术上树立敢为人先的意识。要提倡对不同学科、不同类型的研究工作采用不同的评估标准,不搞一刀切。要坚持以质取胜的原则,不简单地以论文数量的多寡分高低。要允许失败,不能急功近利,克服浮躁情绪,争取重大突破。拥有原创性研究成果、拥有中国自有知识产权是化学界和整个中国科学界的最重要的任务。应该扎实地做原始创新性工作,并在开展国家重大需求的研究的同时,予以自由基础研究一席之地,使创造性的基础成果更多一些。

原始创新是科研的灵魂,但是科学的创新不可能脱离原有研究基础,而且也有不同模式和水平。既有思想或思路上的突破,也有方法学上的革命。思路上的创新中或是原有研究思路的延伸和扩展、或与原有方向相反、或为两种思路的衔接和交叉等不同模式。方法学上的革命曾经树立了许多科学的里程碑。组合化学就是反向思维加上方法学革命(摆脱有单一目标的定向合成技术和各个化合物分别筛选的方法)的结果。

我国一位古人曾做过一首诗中提到四条创新精神,这或许对我们考虑研究工作的创新有些启发。这位诗人说:“诗有四种高妙。一曰理高妙,二曰意高妙,三曰想高妙,四曰自然高妙。碍而实通,曰理高妙;出意外,曰意高妙;写出幽微,如清潭见底,曰想高妙;非奇非怪,剥落文采,知其妙而不知其所以妙,曰自然高妙。”如果我们计划中的工作或是本来路线已经是通的,或是结果是可以预期的,或者计划的研究深度不够“幽微彻底”,或者预计的结果并不高妙到不易解释,那么我们的工作是否缺少创新的思路呢?