

# 中国科学院学部 科学与技术前沿论坛简报 第 109 次

学部工作局学术与文化处 编报  
《中国科学》杂志社

2021 年 2 月 8 日

---

## “新时代科技融合发展”论坛综述

### 一、背景

科学技术发展到当前阶段，愈发凸显出科技融合发展的重要性。科学研究中众多重大科学问题的解决，依赖于先进表征工具等技术的发展；而技术研发领域所面临的各种“卡脖子”问题，同时需要汇聚相关交叉学科的基础研究成果。然而，在实际科学研究和技术研发过程中，由于各个学科和领域之间的界限壁垒和已有的固定思维，相互之间的交流讨论和交叉融合发展并未达到应有的效果。本次论坛以“新时代科技融合发展”为主题，希望通过邀请不同学科和领域的专家学者参加，以少量主题报告和分报告的形式介绍相关领域的进展和瓶颈问题，加以充分的研讨和交流，碰撞出新的科学思想和研发思路，从而促进若干新兴科技领域的形成与发展。

### 二、论坛概况

2020 年 11 月 22~24 日，“新时代科技融合发展”科学与技术前沿论坛在中国科学技术大学举办。本次论坛由中国科学院学部主办，中国科学院学部学术与出版工作委员会、化学部、数学物理学部、生

命科学和医学学部承办，中国科学技术大学和《中国科学》杂志社协办。中国科学院化学部包信和院士、数学物理学部陈和生院士、生命科学和医学学部葛均波院士担任执行主席。60余位专家参加了论坛。

本次论坛聚焦材料科学与转化医学、人工智能与合成科学、原位表征科学与技术3个议题。与会专家就各领域学科交叉与融合发展的机遇、挑战与对策开展了广泛而深入的讨论，对未来发展方向做出了展望。论坛为相关领域的学者搭建了高层次的交流平台，为跨学科发展的决策提供了具有前瞻性与可行性的规划与建议，特别是为在国家层面上实施“科技融合发展”战略进一步凝练了目标，达成了共识。

### 三、报告及研讨

#### （一）议题1：材料科学与转化医学

复旦大学附属中山医院葛均波院士作了题为“心血管介入器械创新的中国机遇和探索”的报告，详细分析了中国心血管疾病现状。他指出，近几年中国医疗市场增速远高于全球水平，医疗器械产业发展具有很广阔的前景。然而，受制于创新能力和研发投入不足以及相关配套政策的欠缺，中国医疗器械产业在全球市场所占份额与发达国家相比仍有较大距离，特别是在具有产业战略高度的持续科技创新能力建设方面落差巨大。为打破困境，葛均波院士发起了中国心血管医生创新俱乐部，通过构建集培训、传播、孵化、投资于一体的心血管产业生态系统，打造了以医生为核心的创新链，培养了具备创新、研发能力的创新型人才，俱乐部也在冠脉介入诊断及治疗器械、结构性心脏病相关器械、心血管影像学、高血压与神经调节器械以及心衰治疗器械原创方面取得了成功。他以 Xinsorb 降解乳酸支架解决传统药物支架导致的内皮化不全和致死性血栓为例，强调了生物医用材料创新对解决心血管介入器械瓶颈问题所起的关键作用。报告最后指出，创新生态圈已初步构建，未来还需要在国家政策支持下建立医疗器械创新平台。

中国科学院理化技术研究所江雷院士作了题为“仿生超亲润体系——量子限域超流：能量转化，化学反应与生物信息传递”的报告，系统阐述了电荷、浸润性、结构的协同作用对离子定向运输的调控规律。报告从电鳗为何产生高电压而不使自己受伤这一自然现象，引出了限域粒子运输的有序性和高通量这一科学问题。随后，从电子超导、液氮超流现象（两个原子进入引力区）、水分子移动的有序高通量（两个分子进入引力区）和离子通道的离子传输（电荷相互作用下同种离子进入引力区），归纳得到超低阻力物质运输的共性：同类粒子进入引力区。这一假说可用于解释锂离子电池快速充放电的本质和二维离子超流状态。报告还阐述了离子分子的量子态为生物信息传输的载体：最早的神经营载体是霍奇金发现的膜电位，但其发现的膜电位传播速率太低，并不是信息传播的速率；因此，应该用离子超流神经传导机理来解释。报告指出，未来量子离子信息技术将代替电子信息技术，通过设计超浸润催化界面体系，实现有序定向运输、量子限域催化等，最终实现量子化学化工，对未来化学工业产生重大影响。

国家纳米科学中心赵宇亮院士作了题为“纳米药物：药物递送纳米机器”的报告，以纳米机器在疾病早期诊断、预防和治疗等方面发挥日益重要的作用为背景，阐述了纳米药物技术的微观基础、设计理念和发展历程，使听众对纳米药物研究有了清晰和全面的认识。他介绍了纳米材料与机器人技术相结合在药物输运方面的最新进展，对药物递送纳米机器的原理做了详述，着重解释了 DNA 纳米机器的开启和检测原理，以及如何实现抑制肿瘤肺转移和长期免疫记忆等重要功能。报告概述了纳米机器在栓塞血管再通和组织修复等医学应用中的成功案例。介绍了纳米机器人对肿瘤微环境的调控，从微环境靶向、响应、重塑、多靶点调控等四个方面实现肿瘤微环境重塑，达到改善肿瘤治疗效果的目标。展望了 DNA 纳米机器在体内输运的挑战，认为递送机制的研究将对下一代药物递送纳米机器起到关键的指导作

用。

中国科学院长春应用化学研究所陈学思院士作了题为“生物可降解聚合物及其应用”的报告。报告首先介绍了该团队在聚合物催化剂设计及其产业化推广的两个实例：(1) 高活性、高立体选择性的席夫碱铝多核催化剂用于丙交酯手性开环聚合，并通过分子筛实现了从乳酸到丙交酯的一步合成，目前已与企业合作建成 1.5 万吨/年的生产线；(2) 多中心复配催化剂用于 $\epsilon$ -己内酯开环聚合，目前处在工艺优化阶段，有望取代国外同类催化剂，实现国产化。报告重点介绍了聚乳酸和聚氨基酸两类可降解高分子在医用材料方面的创新应用。在聚乳酸方面，陈学思院士团队发明了羟基磷灰石接枝低聚乳酸技术，实现了羟基磷灰石与聚乳酸的共混，在此基础上利用自增强加工技术得到了高结晶度、高模量的骨钉和骨板。此外，该团队合成的聚乳酸材料被应用于面部填充、生物胶和防粘连膜等医用领域。在聚氨基酸方面，他们用聚谷氨酸接枝聚乙二醇负载顺铂纳米药物，在肿瘤治疗方面取得了较好的动物实验效果；在聚谷氨酸载体上键合一些血管阻断剂(如 CA4)，也取得了显著的抗肿瘤效果；将聚氨基酸用作核酸载体，制成基因转染试剂，有望在 3~5 年内实现基因转染试剂国产化。

中国科学技术大学薛天教授作了题为“实现哺乳动物裸眼红外光感知和红外图像视觉能力”的报告。感知觉是生命的基础，同时也限定了我们认知的边界。而视觉是人类最重要的感知觉，75%以上的信息输入是由视觉得到的。人类肉眼可感知的可见光波长在 400~700 nm 之间，而超过 700 nm 的红外光广泛存在于自然界中，对其探测感知将帮助我们获取更多的环境信息。薛天教授团队通过将一种上转换纳米材料导入动物视网膜中的策略，实现了裸眼红外图像视觉感知，突破了自然界赋予动物的视觉感知物理极限。这项技术还可以调节吸收和发射光谱，并应用于感光光谱范围缺陷的色盲疾病，为哺乳动物视觉修复和增强提供了可能性。报告指出，新材料与生命科学研究的结

合，有望实现跨层次（微观、介观、宏观）调整生命体的机能。

研讨由中国科学技术大学附属第一医院刘连新教授主持。

**(1) 关于化学反应的量子限域超流效应的探讨。**自然界的酶催化反应，也是有序化的分子超流过程。例如，当酶要合成化合物 AB 时，就把 A 和 B 等反应物组合到一起，有序排列，进而降低反应的活化能，实现常温反应。如何理解生命体的化学合成普遍在常温下即可实现？如果我们把化学键断开看成是桥断裂，那么由生活经验可知，断开一座桥可以靠强力（爆炸、洪水或者地震），也可以靠共振（大风吹）。酶催化反应则是依靠外场激发的化学键共振来实现温和条件下断键。值得关注的是，化学键共振所需的能量在 THz 波段。以 ATP 分子供能机制为例，ATP 在体温、水环境下水解导致磷氧键断裂，放出 1 个 34 THz 光子，这个能量正好对应于水窗口下碳氧键、磷氧键振动吸收峰，可激活离子通道的运动。

**(2) 关于传统医学和药物运输的探讨。**传统医学认为，人体内传输体系除了血液循环系统，还包括血管外肌肉间的间质。国家纳米科学中心韩冬研究员发现，输药如果通过间质而不是血管，可以避免肝脏，减少毒副作用，而且可以有针对性地定向递药。对间质运输的研究如果能和体内其他非血管通道更好地关联或一并考虑，将拓宽我们对人体内物质运输系统的认知，并有利于药物运输的设计。这个问题也是中国传统医学和前沿科技之间的最好结合。用纳米颗粒在活体内示踪，在传统的生理学、解剖学以外找到运输的通道，可以验证经络是否存在。经络（脉络）可以从两个角度去探索。其一，脑内淋巴系统是一套独立的脉络系统，这是以前没有发现过的。其二，神经系统遍布全身各个内脏器官。以前认为只有肌肉、心脏被神经所控制，现在发现，全身所有的脏器包括脂肪都有密集的神系统连接，这就使器官之间可以通过神经系统互相影响。比如，神经系统里的脑肠轴是肠道影响脑的媒介。

**(3) 关于材料科学与转化医学的探讨。**医学正处在从群体化走向个体化的变革时代。人类对疾病定义和药物机制的认识，与基础科学的发展水平息息相关。因此，基础学科对医学研究的突破起到了关键的支撑作用。例如，胰岛素是 I 型糖尿病的特效药，对它的研究催生了三次诺贝尔奖。然而一个世纪以来，胰岛素用药办法，除了延长作用时间和起效快等技术改进，并无实质变化。药物递送纳米机器的出现和发展，可能对糖尿病治疗方案的突破带来契机。如果医用材料科学的研究成果可以更加紧密地与临床研究相结合，必将对两方面都产生重要的推动作用。

## **(二) 议题 2：人工智能与合成科学**

中国科学院上海药物研究所蒋华良院士作了题为“**基于人工智能的药物研究**”的报告。利用已有的大量药物数据，使用人工智能、大数据技术建立的药物筛选模型，可高效地辅助药物设计工作。蒋华良院士团队构建了基于多任务神经网络的药物激酶谱预测模型，系统评价化合物的活性谱，提高了化合物的选择性，降低了潜在的毒副作用。同时，他们还实现了药物自动化设计、基于图神经网络的药物分子结构表示。此外，对于药物作用机制、靶标发现，他们创建了可预测药物作用靶点的药物脸谱库；对于化学反应预测，他们通过深度学习预测 Suzuki-Miyaura 偶联反应的产率，而基于 AI 的 DEL 库解码和数据分析缩短了药物筛选的项目周期，用于设计并合成 COVID-19 新药。报告指出，人工智能在药物研究中的重点集中在靶标发现和药物先导物的优化上，克服数据技术壁垒、实现合法数据共享、提高数据质量是目前研究所面临的挑战；未来的研究方向则是人工智能与临床数据结合，预测临床准确性，用于提升临床试验的效率。

北京大数据研究院鄂维南院士作了题为“**机器学习与分子模拟**”的报告，系统地阐述了如何把机器学习方法有效地应用到分子模拟的各个层面。一个可靠的基于物理方法的机器学习模型，需要具有高精

度、高效率和可移植性，并在满足物理限制的同时不能有太多的人工干预。他介绍了在满足上述条件的情况下如何基于密度泛函产生分子动力学模型，如何基于分子动力学产生粗粒化分子动力学模型。针对使用密度泛函数据集带来的误差，他介绍了基于量子力学对密度泛函模型的拟合，另外展示了如何利用机器学习拟合量子力学模型。在拟合了模型后，还开发了优化的算法，并把模型生成和自动优化两部分算法结合，开发了能够进行高性能计算的软件。最后，他提到还可以开发专门的硬件，将传统算法、机器学习、高性能计算和硬件四者结合，可以对实验化学产生有意义的帮助。

中国科学技术大学罗毅教授作了题为“机器学习在谱学中的应用”的报告。分子动态过程的结构测定是理解其性质的钥匙，也是化学领域的一个关键科学问题。发展快速响应并实时探测分子动态结构的光谱技术，是当前的重要科学机遇。谱学信号的理论解读和在此基础上的化学结构反演，是分子光谱实时探测技术的核心要素。报告介绍了一种基于数据驱动的机器学习方法，突破了传统光谱模拟与结构测定的计算化学瓶颈，用于预测金属衬底表面的分子吸附构型与其表面增强拉曼光谱以及蛋白质紫外、红外谱学响应与结构变化之间的构效关系，并且建立了相应的谱学数据库，力求实现快速有效的分子构象和谱学响应之间的双向预测，即从结构预测光谱信号和从实验光谱反演分子构象，阐明分子间/分子内相互作用影响谱学响应的物理化学机制。人工智能与光谱计算的结合，既呼应了生命科学与生物化学研究的重大科学问题，又吸取了计算机和信息学技术的前沿成果，将发展出原创的谱学预测和结构反演方法与软件，谱写分子光谱领域一个新颖且前景广阔的方向。

复旦大学刘智攀教授作了题为“从机器学习计算模拟到人工智能化学”的报告。人工智能技术结合大数据已经成为了当前科学发展的新工具。通过行业软件的大力发展、机器人技术的引入，人工智能技

术能进一步降低科学研究的门槛，显著提高常规时间工作效率。对于是否能更高效地发现新现象、规律、引发重大科学变革等，仍是一个需要继续讨论的热门话题。报告介绍了人工智能技术的一些常见方法和最新前沿技术，举例说明了人工智能在理论计算模拟领域的应用，包括建立反应大数据、机器学习全局势函数方法、复杂催化结构预测和复杂反应预测等，着重分析了其中的关键点。立足于化学领域，进一步指出了几个未来有望大规模应用人工智能的重要领域，包括合成化学、材料设计、生物化学和实验谱学等。

英国格拉斯哥大学 **Leroy Cronin** 教授作了题为“**Chemputers as a Chemical Processing Unit: CPU**”的报告，介绍了他在化学合成自动化方面的工作。其实实验室构建了名为 **Chemputer** 的化学计算机，通过模仿冯诺依曼机，其具有中央处理器、物理存储、数据存储、物理 I/O 模块以及 I/O 模块。相对于 DNA 合成机器、肽合成机器等传统“化学机器人”，**Chemputer** 可解决普遍性的化学问题并可进行通用性的编程操作。**Chemputer** 首先阅读文献数据，将自然语言表述的合成过程翻译为标准化的 XDL 格式的代码，经过人工检查修正后，产生合成设备运行所需要的操作图。合成设备具有六大模块：清洗、反应、双相萃取、蒸发、产物溶解、结晶过滤。通过操作图，合成设备运行相应模块，最终得到产物。目前人类已知的分子仅有 2 亿，而宇宙中可能存在超过  $10^{100}$  个分子（10 步反应即可合成得到）。对这些分子的探索受到合成步数的限制，**Lerory** 教授期望使用 **Chemputer** 对这庞大的化学空间进行自动化探索，这将为药物发现打开新的世界。

研讨由中国科学院上海有机化学研究所唐勇院士主持。

(1) 关于合成以及催化方面数据的收集和机器学习在化学领域应用的讨论。从合成化学的角度来看，我们没有数据，或者说数据使用起来十分困难，未来数据作为标准引入人工智能的方式去学习、去挖掘、去结合图文识别等功能，只靠学术界的力量是远远不够的，需



要国家层面的支持。还有就是引入机器学习需要解决的问题，现阶段机器学习在化学方面的应用，成功的案例比较少。对于解决基础的问题来说，从分子的角度直接借鉴机器学习已有的对分子的描述还是不够的，这种对分子的描述没有实际意义，模型的可信度比较差。因此，我们要从根本入手，重视对分子及其语言本身的关注。

**(2) 关于 AI 数据处理的讨论。**数据是支撑 AI 的关键性因素，我们收集的数据就是数据，没有人去鉴别，缺少对数据进行分析、建模以及应用的人才，需要尽快培养，把数据变成有用的数据。

**(3) 关于注重 AI 数据库与合成反应相结合的讨论。**我们现在所做的合成化学对功能重视不够，很少去研究性能，将来怎样应用于实际是需要思考的问题。从数据库角度来说，有机合成数据库规律性很强，基本与官能团相关，因此，我们需要建立一个为指导怎么合成提供大量相关数据的数据库，来满足 AI 的需求。未来可能从某一点突破，用人工智能的方法指导合成反应。

### **(三) 议题 3：原位表征科学与技术**

中国科学院高能物理研究所陈和生院士作了题为“中国散裂中子源和交叉前沿研究”的报告。大科学装置是国家科技创新体系的核心单元，是综合实力的标志，应对国内外高度开放，开展广泛的国际合作。中子散射通过测量中子被样品的原子核散射后的方向和能量分布，获取物质结构和运动的信息。中子探针与同步辐射互为补充，应用广泛，它能够探测物质磁性；能探测原子核位置，对轻元素和同位素敏感；能探测物质结构的动态过程；能对大的工程试样进行原位无损检测；能对化学反应中的催化剂进行原位表征。特别是在催化原位研究方面，中子探针优势巨大：中子衍射用于原位检测催化剂结构的动态变化，中子准弹性散射用于研究气体分子在催化剂孔道的扩散，中子非弹性散射谱用于含氢物种的识别，而中子成像可以用于介观尺度工作状态的催化剂成像。中子散射作为其他表征技术的必要补充，可为

正确认识催化过程中的催化剂结构变化、活性中心生成以及演化、中间物种的识别、时间和空间上多组分协同效应等方面提供重要信息。散裂中子源提供的中子脉冲时间结构好、强度高、能谱宽，是中子散射研究和应用的先进工具，为工程材料、能源、国家安全等国家重大需求提供独一无二的平台。中国散裂中子源是我国“十二五”期间重点建设的最大的大科学装置，落户广东省东莞市，经过6年半的建设，于2018年3月按计划建成，8月通过国家验收，对用户开放，实现稳定高效的运行，获得大批优秀科研成果。二期脉冲中子通量将达到国际先进水平，功率将提升到500 KW，支持更小样品和更高时间动态的实验，支持非弹性中子散射实验，实现更高的信噪比和分辨率，提升实验效率。基于散裂中子源的重大科技基础设施种类和数量已经居于国际前列，将有力支持我国的前沿基础和工程科学研究。

中国科学技术大学杜江峰院士作了题为“量子计算与精密测量”的报告，讲述了量子计算的发展历程。报告首先回顾了物理学对三次工业革命的深刻影响：第一次工业革命（蒸汽时代）由经典力学和热力学推动，第二次工业革命（电气时代）由电磁学和电动力学推动，第三次工业革命（信息时代）由电子学、计算科学和量子力学推动。当今的产业革新，则有可能由正在进行中的以量子信息和量子计算为标志的第二次量子革命推动。量子计算是一个没有热耗散的可逆过程，相较于经典计算，是真正意义上的并行计算，因此量子计算的超级计算能力为人工智能的发展提供了革命性工具，能够指数加速学习能力和处理速度，轻松应对大数据时代的挑战。量子精密测量的目标是对纳米级别的微观物质进行单分子磁共振谱测量，不仅能够提供纳米分辨率的空间定位信息，还可以进一步解析出单个分子的结构信息和构象变化。这些变革性技术能够突破信息和物质科学技术的经典极限，为多个学科的前沿研究带来全新的可能性，促进科学与技术的交叉融合。希望在多学科交叉和联合攻关下，中国能在量子技术上实现超越。

厦门大学田中群院士作了题为“探讨纳米尺度的分子振动光谱与成像技术的前沿”的报告。纳米乃至亚纳米分辨的分子光谱和化学成像技术是研究物质科学的重要工具，报告介绍了原位、非原位及工况表征之间的区别。原位表征目前仍然是占主导地位的纳米体系表征方法，报告讨论了如何提高原位空间分辨率，从而提高检测的灵敏度。关于非原位表征，报告以冷冻电子显微镜为例，介绍了将其用于电池材料，得到金属锂负极的原子分辨率图像和界面结构的研究。原位表征近期发展非常迅速，特别是原位液体池的出现使得原位研究液体中的电化学体系成为可能。报告还介绍了实现化学键空间分辨率的针尖增强拉曼光谱在材料表面的灵敏度，探讨了智能算法和高速高光谱成像技术的发展。

英国卢瑟福实验室 **Stewart Parker** 博士作了题为“**Inelastic Neutron Scattering Studies of Catalysts**”的报告，介绍了非弹性中子散射在两个不同体系中的应用。第一个是 **ZSM-5** 催化甲醇转化为碳氢化合物的反应体系。甲醇可转化为烯烃或汽油，遵循“烃池”反应机理。在实验中，他使用色谱-质谱联动检测反应物及产物，并用非弹性中子散射谱、热重分析、漫反射傅里叶变换红外光谱法以及比表面法分析催化剂。特别是有着高灵敏度的中子散射表征技术，帮助他获得了反应机理中活性中间物质的指纹谱，对厘清反应中间体发挥了关键作用。在对不同温度和持续时间的转化反应表征分析后，他对甲醇制烃反应得出结论：大于四甲基取代的苯以及多环芳烃作为活性中间物出现在分子筛中，并且它们的组成与温度无关。第二个是氢在铂催化剂上的吸附。他结合中子散射表征、第一性原理晶格动力学的计算和分子动力学模拟，清楚地给出了氢在铂表面吸附位点的类型和结构特点。他还总结了一个成功的非弹性中子散射实验需要的要素，包括样品环境、分光仪类型、理论计算以及非中子表征设备。最后，他指出中子散射表征在研究催化过程中有独特的优势。它不仅能提供与材料中氢相关

的性质，还能提供完整的中红外光谱。除此之外，中子散射与第一性原理的结合使人们对材料有更深入的理解。

中国科学技术大学封东来教授作了题为“**原位同步辐射在催化中的应用、挑战与机遇**”的报告。报告提出目前催化研究的困境：高通量-试错方法工作量大且低效，机器学习可预测新数据，但准确性不足。同步辐射技术可以揭示真实的催化过程，包括活性相和活性位点、反应路径、工况下失活机制，实现原位动态观察催化过程，从分子、原子层面研究机理，进而指导催化剂合成。报告介绍了国内外原位表征技术在催化中应用的实例，并指出当前面临的挑战：难以确定真实活性相和活性位点，难以动态观察反应过程和中间体，高真空测试环境无法实现工况下的测量。报告最后展望了指标先进、运行在低能量区、基于衍射极限储存环的第四代同步辐射光源给催化领域带来的机遇。

中国科学技术大学包信和院士作了题为“**催化科学研究的机遇和挑战**”的报告，指出催化科学的发展目标是精准调控化学反应的活性和选择性。催化的本质是能态调控，过去人们研制催化剂主要手段是试错法。现在，借助理论计算和表征技术，我们对催化过程有了更具体的认识。尤其是表征技术的好坏严重影响到对催化反应的“观察”和认识。化学反应发生对应的时间和空间尺度极其精细，目前已有的表征技术远不能在同样的时间和空间尺度上“观察”化学反应，且实际工业中的化学反应存在很多不可控因素。因此，更加精确的表征手段仍是未来化学发展的关键因素。随着计算机信息技术的进步，利用大数据加机器学习的方法，也可能成为未来催化研究人员的重要工具。面对挑战，在未来的催化研究中，应着眼于化学反应受到环境或外界手段施加的限制时带来的新的变化（如限域催化），自旋调控或量子隧穿效应也可能给催化带来新的突破。在关注催化反应本身的过程中，催化基本理论和概念的发展对人们认识催化反应也非常重要。为此，就需要充分认识和理解学科交叉融合的重要性，更大限度地运用现代

科学和技术的优秀成果，促进对催化剂和催化作用本质的认识，实现催化理论和概念的创新。

研讨由中国科学技术大学俞书宏院士主持。

(1) 关于自旋对光催化过程影响的讨论。自旋引发光催化主要通过两种途径：第一种是当一个分子逐渐向催化剂靠近，由于二者的自旋恰好相互匹配，所以能够直接发生吸附过程；另一种是分子在靠近的过程中，发生自旋翻转来迎合催化剂表面电子的自旋情况。而在实际的催化过程中，二者难以区分。其中最典型的例子是生成三重态  $O_2$  的催化反应。

(2) 关于原位表征技术的讨论。

(i) 当把粒子束聚焦到非常小的尺寸后，它的能量也急剧上升，因此可能对样品表面产生损伤，在这种情况下应该如何对该位置发生的吸附反应进行研究？有两种情况，第一种是聚焦，这种情况本身确实存在一定危险性，因此具有相应的尺寸限制，不能无限缩小聚焦尺寸（如从 30 到 5 nm），否则将引发其他问题。可以通过充入更厚的气氛来调节到达样品表面的能量大小，但与此同时灵敏度也随之下降。另一种情况是不需要聚焦的相干散射，它是对整个颗粒信息的重构，因此保证达到微米量级即可。

(ii) 在透射电子显微镜的使用过程中，一个相对成熟的体系有能力承受高能电子或者光子流短时间内的照射。我们不能只局限于该过程对表面造成的损伤，而是可以反过来利用这个引入电子或光子的过程，关注其是否带来了新的原来无法得到的化学反应。比如 CO 的活化问题，在这样特殊的条件下，它更倾向于选择另一条反应路径，从而实现数量级层面的提升。并且，对正、反两面都需要更加谨慎、系统地进行分析。

(iii) 高温高压条件对于理论计算的限制和挑战巨大。因为实际计算的是物质在  $T = 0\text{ K}$  条件下的本征性质，然而，可能存在某些不

稳定但具有高反应活性的位点,难以通过理论计算对其进行结构优化。希望计算的环境模拟能够尽量接近实际条件。

(iv) 关于如何区分弱相互作用(与周围环境交互所带来的协同效应;长程的、去局域化的)与其他强相互作用(化学键)?如何准确描述环境与活性组分间的协同作用?目前,这些问题仍是很大的挑战。这种弱相互作用相比于化学键而言较弱,但非常重要。而今,缺乏相应的技术手段对其进行表征,所以未来需要多领域相互配合,为更深层次、更系统地理解化学反应提供帮助。可以把关注点放在对弱相互作用(或者分子的构象)特别敏感的能量波段,比如核磁共振波谱,它能提供更多有效的信息。目前的难点在于如何提升核磁的检测灵敏度,当这个问题得到解决后,核磁所能提供的信息将远远多于红外光谱和拉曼光谱。但是,核磁却不具备原位表征的特性,并且解决气体与固体之间次级相互作用的问题也是一个难点。后续是否可以把几种技术相结合从而发展出新的表征手段?此外,核磁受到转速的限制,提升空间不大。即使将灵敏度提高,对应的检测时间则会大大延长,并且还要考虑材料电子结构本身的弛豫与信号衰减。因此,需要在时间与空间二者之间合理取舍。

(v) 材料科学的进步能为仪器检测带来巨大的革命性发展。是否可以从设备中的关键材料的角度入手?自然界中的材料,其介电常数的实数部分可以为负,这为合成等离激元材料提供了可能性;然而天然材料中,磁导率的实部始终为正,所以核磁中百兆级频段的磁场不可能很强。但是近几十年来,通过设计特定的微纳结构,能够实现人工合成磁导率实部为负、虚部为正的 material。这些新材料(双负材料)能够增强局域的磁场,是否可以运用到仪器设计中?将样品放置在这种能够聚焦磁场的材料中(类似于表面增强拉曼的原理),从而实现特定频段的磁场增强,提高检测灵敏度。

**(3) 关于生命与催化的关系的讨论。**在生命体系中,很多过程

从化学角度来看是否一定需要催化剂？是否一定要求在非常温和的条件下才能发生如此高效的反应？程序化自组装反应的驱动力到底是什么？人工合成的材料与自然界天然产生的材料相比显得相形见绌，譬如人体骨骼突出的力学强度与其组装的复杂性，都牵扯到某种未知的、无法用现有的化学理论解释的高级机制，可能还与外场有关。再比如自然界中生长的树木，木材中的纤维素在纳米化后高度结晶，而单凭化学合成的方法却很难实现。因此，一定存在还不为我们所知的催化过程。另外，催化反应活化能的能垒产生的原因也不明了，现有的说法都是基于电子的传递，即电子间相互作用与成键，而实际是否存在其他原因？另外，仅仅是在无机体系模拟生物体内发生的复杂催化反应，是很难将其复刻还原的。

**(4) 关于催化过程理论模拟的讨论。**理论要与实际密切结合，理论模拟的目的是解决实际问题。复杂体系中发生的所有反应是无法被完全考虑在内的，因此在理论模拟的基础上反推的模型只有能很好地契合实际才是有意义的。但就目前来说，仅仅通过理论模拟来解决一个实际的催化反应问题依旧面临重重困难。要做理论模拟，最好选择一个非常简单的体系；如果是大分子，它本身会发生何种变化都是未知数，不确定性太大，所以很难准确描述。

**(5) 关于协同催化的讨论。**多位点导致的多路径酶催化反应效率非常高，如果在此基础上又是耦合反应，则反应速率常数还会呈指数性的提高，这在无机纳米催化中是较为罕见的。无机纳米催化中是否也存在多路径呢？另一个关键点是多路径之间会发生相互干涉（电子经过不同的通道会发生量子干涉），因此多条并行的反应路径之间是非经典的、量子的。但这种特殊情况只在态叠加的区域才出现。

## 四、共识和建议

本次论坛邀请了来自数学、物理、化学、材料科学、生命科学、医学等不同领域的专家围绕“新时代科技融合发展”主题进行了深入

探讨，就材料科学与转化医学、人工智能与合成科学、原位表征科学与技术等三个以化学为中心的前沿交叉领域的发展目标、重要研究方向以及存在的关键科学问题等达成以下共识，并提出了相关建议：

**材料科学与转化医学。**在理工医交叉融合的“新医学”发展浪潮中，现代临床医学技术与材料科学的深度融合将是非常重要的一个趋势。一方面，需要加强临床研究与新医用材料的结合，用实验室研发的新技术新材料支持医学走向精准诊断和个性化医疗；另一方面，在材料科学领域，需要在跨尺度（分子、细胞、组织、器官、人体）框架下理解材料与生命体的相互作用机制，帮助医用材料向复合型、生物活性型、智能型等新模态转变。

**人工智能与合成科学。**化学是创造新物质的学科。人类物质文明积累的海量化学和材料数据，为数据驱动的人工智能技术在化学中的应用提供了前所未有的机遇。人工智能算法应用于化学和材料研究，也正在加速新药开发、催化剂筛选、能源和环境材料设计。两个领域的深度合作，将助力化学研究与应用走向智能化和精准化，符合人类可持续发展战略的要求。主要挑战有：如何将种类多样、标准不一的化学和材料数据转化为计算机程序可以学习和存储的数据；如何让人工智能技术学习化学和材料知识并获得预测能力；如何将人工智能技术与合成化学现有研究范式相结合，促进新反应和新物质的发现，加速新药前期开发；如何运用人工智能技术揭示复杂体系的化学反应机理。上述问题均需要从战略高度来推动解决。论坛专家一致认为，应组织开展数据标准的确定与国家数据体系的建立，加快推动人工智能在化学研究中的应用。同时加强化学、材料、信息、计算机等相关学科交叉复合型人才培养和扶持力度。

**原位表征科学与技术。**催化居于化学工业的中心地位。化学工业转向小型化、定制化和精准化路线，依赖于对化学反应过程的精准控制和对催化剂构效关系的清晰理解。原位表征科学与技术（如中子散



射、同步辐射和电化学原位光谱技术) 为在分子水平理解催化机理和构效关系提供了宝贵的信息, 然而由于催化体系结构和环境因素的复杂性, 还难以做到以真实反应条件下的原位测量来揭示催化剂动态变化时与反应物种的相互作用, 进而指导催化反应体系的优化。论坛专家一致认为, 原位表征一方面需要努力实现工况条件下对反应的观察和测量, 另一方面需要和理论计算、数据科学相结合, 借助计算机模拟, 在多尺度层面上揭示催化剂的构效关系。未来, 原位表征科学与技术需要加强与数学、物理、化学、材料、电子、信息学科的交叉与融合, 促进催化概念、理论和方案的创新。

(作者: 罗毅, 中国科学技术大学教授; 包信和, 中国科学院院士, 中国科学技术大学教授; 陈和生, 中国科学院院士, 中国科学院高能物理研究所研究员; 葛均波, 中国科学院院士, 复旦大学附属中山医院教授)

联系方式: 中国科学院学部工作局学术与文化处, 010-59358366