

# 中国科学院学部 科学与技术前沿论坛简报 第 115 次

学部工作局学术与文化处  
《中国科学》杂志社 编报

2021 年 8 月 25 日

---

## “面向 2035 的分子科学前沿”论坛综述

### 一、背景

分子科学研究物质在分子尺度的组成与结构、反应与机制、性质与功能，是化学科学的基础和核心，与材料、生命、信息、环境、能源等密切交叉和相互渗透。分子科学在人类认识自然、改造世界、提高生活质量和健康水平、促进其他学科发展、推动社会进步等方面已经发挥并且将继续发挥巨大的、不可替代的作用。分子科学将为新一代电子信息、绿色能源等领域的发展提供物质基础，深刻地影响着战略新兴产业、国防和日常生活中的方方面面。在分子科学迈向分子精准创制和多级次调控新阶段的战略机遇期，从前瞻性、战略性、基础性来考虑，迫切需要跨学科集中探讨相关领域的重点发展方向、关键技术和突破点等问题，提出学科的战略发展建议，推动我国分子科学与相关领域的跨越式发展，促进在相关领域取得新突破和原创性成果，抢占分子科学研究的创新高地，引领分子科学的发展。

### 二、论坛概况

2021 年 4 月 12~13 日，“面向 2035 的分子科学前沿”科学与技术

前沿论坛在北京召开。论坛由中国科学院学部主办，中国科学院化学学部和学部学术与出版工作委员会承办，中国科学院化学研究所和《中国科学》杂志社协办。中国科学院院士、中国科学院化学研究所朱道本研究员和李玉良研究员为论坛共同召集人。

会议邀请多个学科的专家学者与会，对分子科学的前沿方向和关键技术等进行深入而广泛的讨论，围绕绿色合成化学、分子纳米材料与器件、多尺度催化化学、化学储能与能量转化、分子科学前沿交叉领域 5 个主题，从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等层面进行深入的交流探讨。

### 三、报告及研讨

中国科学院院士、中国科学院化学研究所朱道本研究员作了题为“面向 2035 的分子科学前沿”的主题报告。他表示，现阶段是分子科学迈向分子精准创制和多级次调控新阶段的战略机遇期，未来十年，分子科学将呈现以基础研究为核心、学科交叉为驱动、与工业产业高度融合贯通、满足国家重大需求的螺旋上升发展态势。

报告提出，面向 2035，我国分子科学的发展需要从前瞻性、战略性、基础性出发，瞄准分子精准合成、多级次分子组装和理性分子设计，在绿色合成、分子/纳米/量子材料与器件、多尺度组装与催化、化学储能与能量转化、分子医学、分子的环境效应等若干前沿领域实现深度交叉与融合，催生变革性战略新兴产业。

#### 主题一：绿色合成与多尺度催化化学

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丁奎岭研究员作了题为“基于  $\text{CO}_2$  为原料的甲醇与 DMF 制备——从分子催化剂设计到工程化实现”的报告，提出  $\text{CO}_2$  将成为 21 世纪除化石燃料以外最重要的碳资源。报告介绍了全新的从二氧化碳到甲醇、同时联产乙二醇的反应及在此基础上实现的以二氧化碳、氢气和二甲胺为原料的二甲基甲酰胺（DMF）合成及其千吨级的工程化示范，以

及工艺包设计和工业应用推进情况。报告指出，二氧化碳转化仍是未来催化领域的重要挑战，开展基于全球平台的能源领域的国际合作有助于进一步推动该领域发展。

中国科学院院士、四川大学冯小明教授作了题为“**新型手性配体的发现为分子创造提供新的高效途径**”的报告，介绍了手性双氮氧配体的发现与应用，提出实现手性物质的精准和绿色创造是手性物质化学学科发展的必然趋势。报告指出，手性物质与不对称催化需要从以下几个方向进行推进：（1）开展手性配体或催化剂理性设计的研究；（2）开展简单底物的高选择性不对称催化研究；（3）开展提高复杂结构化学合成的效率的研究；（4）开展手性产生、传递、放大和调控的机制的研究。

中国科学院院士、中国科学院上海有机化学研究所唐勇研究员作了题为“**分子智造-未来的合成化学？**”的报告，介绍了高活性的催化剂在聚合烯烃功能化、高性能化和差异化聚烯烃合成中的应用，提出了可循环聚烯烃材料的领域发展目标。报告指出，加强基础研究，加强科研和产业合作，有助于推动重大的科研成果和变革性的技术成果。

中国科学院院士、中国科学院化学研究所韩布兴研究员作了题为“**绿色化学及绿色碳科学**”的报告，介绍了高效转化利用生物质资源和利用 CO<sub>2</sub> 的结构特点制备高端化学品和材料的研究进展，提出 CO<sub>2</sub> 转化过程中存在的热力学和动力学难题及可能的解决途径，提出使用生物质结构制备新化学品和材料的发展目标。

中国科学院院士、清华大学杨万泰教授作了题为“**烯烃资源与聚合分子科学**”的报告，介绍了烯烃配位聚合催化剂及其进展，提出开发混合烯烃聚合的绿色新技术，发展以各种烯烃为原料新绿色产业链的目标。

中国科学院院士、吉林大学/清华大学张希教授作了题为“**超分子聚合物化学**”的报告，介绍了利用超分子单体的共价聚合构建超分子

聚合物的制备策略。提出了利用超分子聚合物材料优异的力学性质和可循环再生性能制备超分子塑料、橡胶、纤维等动态可再生材料的应用前景。

中国科学院院士、厦门大学田中群教授作了题为“从物理化学角度探讨催组装——分子科学研究的新方向？”的报告，介绍了催组装的理论基础和关键表征技术的构建。指出催组装发展需加强以下领域的研究：（1）结合理论化学和理论生物学构建的组装理论研究；（2）精准、高效的理论计算与模拟方法对分子间弱相互作用进行准确描述的研究；（3）复杂的组装体系的催组装策略研究。

中国科学院院士、华东理工大学田禾教授作了题为“动态组装智能材料与化学回收”的报告，介绍了动态组装材料的多级组装、功能调控策略。提出了动态组装智能材料的未来发展方向：（1）材料仿生物性（记忆、自我复制、可修复、可纠错）合成；（2）材料合成的精确调控；（3）组装发光材料、耗散驱动组装材料的制备；（4）生命体系中分子的精准识别与控制。

与会专家聚焦高端化工材料“卡脖子”背后的核心分子科学问题，提出加强上下游产业与技术的交叉融合与协同创新，解决当前化工产业“低端过剩、高端不足”的结构性问题，推动材料绿色环保生产过程是中国“新化工”发展的方向。会议中形成以下观点及发展方向：

（1）围绕物质合成与转化，推进各分支的融合交叉，重点突破多尺度催化科学的关键问题，通过催化剂、催化反应和工艺创新，发展精准和智能合成方法，创制具有中国特色的分子结构与独特功能，推进战略产业前沿应用；（2）完善从量子到过程的多尺度理论及方法关联和研究；（3）促进化工过程向小尺度、精准化、可控化、智能化方向发展；（4）聚焦绿色介质和过程、强化基础研究、前沿研究和重大共性关键技术。

## 主题二：化学储能与能量转换

中国科学院院士、中国科学院化学研究所李永舫研究员作了题为“***n*-型共轭聚合物受体光伏材料和全聚合物太阳电池**”的报告。报告指出，有机太阳能电池近年来获得广泛关注并取得迅猛发展，特别是我国科学家主导的非富勒烯受体材料推动了领域性突破，在柔性电池、半透明电池、室内使用的太阳能电池等方面展现了广阔的应用前景。尽管如此，有机光伏材料的持续发展和产业化进程仍然面临诸多问题，需围绕高效率-高稳定性-低成本的黄金三角关系开展重点攻关，主要包括：（1）精准调控给受体匹配性推动效率的持续提升；（2）发展低成本有机光伏材料，开发柔性器件的大面积制备技术；（3）开发高电导的柔性透明电极材料；（4）加速发展柔性器件的隔水隔氧封装材料和技术，提升器件的稳定性。

中国科学院院士、中国科学院大连化学物理研究所李灿研究员作了题为“**绿色氢能和液态阳光，碳达峰和碳中和的战略路径**”的报告。报告指出碳中和的主要策略包括：（1）化石能源的高效、清洁转化，逐步用非化石能源替代化石能源；（2）使用可再生能源，实现绿色、零碳排放。报告介绍了科研人员通过设计制备分解水（光）电催化剂和高选择性的二氧化碳加氢制甲醇催化剂，利用太阳能等可再生能源将水和二氧化碳转化为甲醇燃料，实现了能量的储运。解决了可再生能源储能和转化问题、液体燃料合成问题，同时达到二氧化碳减排的目的。

中国科学院院士、中国石油大学徐春明教授作了题为“**石油分子表征与工程基础**”的报告，介绍了复合离子液体催化碳四烷基化、超临界技术制备高性能针状焦等石油分子，提出了石油化工行业高效绿色转化的发展方向。报告指出，现阶段，石油分子工程发展面临的挑战包括：（1）石油复杂体系的分子表征；（2）石油加工复杂系统过程模型的建立；（3）石油复杂体系特征分子分离。

中国科学院院士、南开大学陈军教授作了题为“**锂电池有机电极**

材料分子科学与工程”的报告，指出大力发展新能源是国家重大战略，新能源科技必将推动多行业融通发展。报告介绍了有机羰基材料作为锂电池材料的发展前景，指出有机羰基锂电池电极材料发展中面临分子优化设计和提高体积能量密度等挑战。

中国科学院院士、厦门大学孙世刚教授作了题为“电化学能源过程微观结构和分子层次研究”的报告。报告介绍了利用原位/工况谱学和显微成像方法，从原子分子层次深入研究电化学能源过程的方法。报告指出，基于大科学装置的原位/工况研究将在分子科学的创新发展中发挥重要作用。

与会专家围绕加强分子科学研究软硬件等的建设，增强我国在能源、国家安全等关键领域的自主可控能力的问题开展讨论。提出在坚持绿色和环境友好的理念下，以发展绿色化工，创新绿色工艺，实现低碳化、绿色化与可持续发展为目标，面向绿色和可持续能源需求，开展以下方向的研究：（1）发展煤转化以及油/煤/气融合转化制液体燃料和化学品的新路线和新方法，突破以甲醇、氨、合成气为平台化合物的能源化学品合成技术；（2）发展生物质能高效转化与利用、太阳能高效利用、电化学储能、可再生能源制氢、氢能与燃料电池、 $H_2$ 与 $CO_2$ 合成制低碳醇/燃料等；（3）聚焦绿色介质和过程强化基础研究、前沿研究和重大共性关键技术。

### 主题三：分子/纳米材料与器件

中国科学院院士、吉林大学于吉红教授作了题为“凝聚态化学的建设”的报告。通过介绍在以原子、分子为基本粒子的凝聚态层次去研究物质的组成、结构、性能以及相互转化的研究方法，提出凝聚态构筑化学（合成、制备、组装、自组织、自组装）中的前沿科学问题，报告指出凝聚态物质化学反应理论的建设中表征技术与方法亟待加强。

中国科学院院士、复旦大学赵东元教授作了题为“界面组装合成

多级结构功能介孔材料”的报告，介绍了基于界面组装调控策略发展的多层、核壳、片层等多级非对称功能介孔材料的制备方法，展望了介孔材料在催化、吸附、分离、光电转化与存储及生物医药等领域的应用前景。

中国科学院院士、北京大学刘忠范教授作了题为“石墨烯材料，制备决定未来”的报告。介绍了石墨烯材料的发展现状及应用，提出石墨烯材料的发展中需要：（1）打破研究思维的局限性，融合工程思维和产业思维；（2）探索石墨烯的“杀手铜级”应用；（3）加强针对性的基础研究，寻求制备技术上的突破，打造核心竞争力。

中国科学院院士、中国科学院金属研究所成会明研究员作了题为“六元环基元无机材料：定义与展望”的报告。介绍了高质量氧化石墨烯和石墨烯以及其他二维材料微片、单晶、薄膜及三维网络结构宏观体的优势及潜在应用，展望了石墨烯等二维材料在复合材料、能量存储与转换、光电器件和生物传感器等领域的应用前景与挑战。

中国科学院院士、华南理工大学/北京大学高松教授作了题为“**Spin Manipulation in Molecules and Solid**”的报告。针对团簇分子磁体各向异性难以调控的问题和挑战，提出了增强单离子磁体单轴各向异性的调控策略。

中国科学院院士、中国科学技术大学杨金龙教授作了题为“自旋电子学分子材料设计与器件发展”的报告。探讨了有机分子薄膜自旋器件、单分子自旋器件等各类功能性的分子自旋电子学材料设计合成。总结了发展中遇到的理论方法的精度、速度、适用体系大小不足，理论模型过于理想等亟待解决的问题。

与会专家讨论后，提出分子/纳米材料与器件应重点解决以下问题及发展方向，主要包括：（1）结合智能化学和大数据的发展，注重精准创制材料新体系，精细调控材料的结构和性能；（2）利用多种表征技术，深入探究新一代材料和独创性体系的分子基础、原理和规律；

(3) 瞄准国家重大需求，支撑特色资源的深度利用；探索材料的光、电、磁、热等新物性及其功能应用；(4) 强化理论和技术的驱动作用，发展先进理论方法和表征手段，深入探究分子、原子、电子的作用机制、原理和规律；(5) 抓住人工智能、大科学装置等对化学基础研究带来的突破机遇，认识化学反应、化学组装过程的本质，实现调控化学过程能力的飞跃。

#### 主题四：分子科学前沿交叉领域

中国科学院院士、香港科技大学唐本忠教授作了题为“**Aggregate: from Molecules, beyond Molecules**”的报告。介绍了聚集诱导发光(AIE)材料在光电(设计高效的固态发光材料、有机发光二极管)、化学传感(环境污染、食品科学检测)以及生命科学领域的应用及发展前景。报告指出，着重探索、融合理论与机制研究，前瞻部署分子材料研究是分子科学领域的发展方向。

中国科学院院士、中国科学院理化技术研究所江雷研究员作了题为“**生物信息及生化反应的量子态**”的报告。介绍了智能超浸润界面到二元协同材料体系转化研究动态和研究前景，并就相关仿生界面及智能材料的设计与制备提出了建设性的设想与建议。报告指出，我国分子科学研究面临巨大挑战，主要表现在我国学者提出的原创性概念和方向较少，无人区领域探索布局明显不足。报告提出分子科学研究可以通过向自然界学习，获取灵感并提炼科学问题，从基础理解走向创新应用的思路。

中国科学院院士、中国科学技术大学俞书宏教授作了题为“**仿生材料的设计合成与未来**”的报告。介绍了仿生分子模板对无机微纳材料的晶化、生长及形貌与结构的调控作用和规律，建立了人工仿生合成珍珠母、仿生聚合物木材、超弹性抗疲劳材料等多级结构材料的合成方法，提出了跨尺度合成仿生材料广阔的应用前景。报告提出，未来仿生工程材料的研究方向包括：(1) 可靠的合成制备技术、化学工



程及加工工艺技术支撑的研究；(2) 宏量制备及节约化的生产实现；  
(3) 应用领域的拓展，多领域的协作研究。

中国科学院院士、北京大学张锦教授作了题为“**石墨炔：一种新的碳同素异形体**”的报告。石墨炔是具有中国自主知识产权的新型碳材料，围绕如何获得大面积高结晶度的单层/少层石墨炔的挑战性问题，报告介绍了石墨炔结构控制制备技术的主要进展，为石墨炔带隙和迁移率等本征性质的研究奠定了良好的基础，也探索了石墨炔的相关应用。报告指出，未来碳材料要在做新型碳材料、找新型碳材料、用好新材料三个方向开展工作。

中国科学院院士、国家纳米科学中心赵宇亮研究员作了题为“**体内药物智能输运纳米机器人**”的报告。从国家战略需求出发，讨论了智能纳米机器人的设计原则与发展趋势，根据基础和应用两方面面临的挑战，分析了智能纳米机器研究中的关键科学问题和未来发展方向，为加速我国智能纳米机器药物的研究和商业化进程，提出以下研究发展建议：(1) 进一步促进多学科交叉融合，推动医用纳米材料监管、科研和产业领域的国际交流合作；(2) 构建医用纳米技术产业生态圈；(3) 监管机构与纳米医药行业从业者共同完善关于医用纳米材料产品的技术要求。

中国科学院院士、中国科学院大连化学物理研究所张东辉院士作了题为“**面向分子科学的机器学习方法发展**”的报告。对面向化学的机器学习发展背景进行简要回顾，并介绍了机器学习在分子科学中的应用，展望了基于机器学习的高精度反应分子力场的发展前景。报告指出基础理论、测量装备与化学软件支撑能力的提升将大幅加速我国自主创新的进程。

中国科学院院士、中国科学院生态环境研究中心江桂斌研究员作了题为“**分子环境科学研究的若干前沿问题**”的报告。分析了社会的主要环境问题和由环境恶化而引起的健康问题。环境污染导致的健康

问题是人类未来发展面临的重大挑战之一，其影响的时间和范围将是空前的、长期的和广泛的。由于其综合性和复杂性，学科交叉、优势互补、联合攻关十分重要。报告指出，只有环境、化学、生命科学、医学、公共卫生等多个学科合作，发挥交叉学科共同研究的特点，共同致力于环境与健康方面的研究，才能攻坚克难，更好地造福于人类。

中国科学院院士、中国科学院大学附属肿瘤医院谭蔚泓教授作了题为“分子医学助力健康中国”的报告。报告指出，实施“健康中国战略”是我国的基本国策。发展健康产业，推动健康中国建设是科技工作者义不容辞的责任。现代医学已经进入分子医学时代，分子水平上的精准诊断与靶向治疗是当代医学发展的必然。核酸适体这类新型的分子探针可特异性地识别与疾病紧密相关的靶标的核酸分子，有可能在疾病诊断、治疗、机理研究，制药，预防等领域有所突破。他提出以临床问题为导向，研究所与医院紧密结合，充分运用大数据与人工智能，开展个体化医疗。

中国科学院院士、上海交通大学樊春海教授作了题为“框架核酸：从分子创造到智能制造”的报告。介绍了实验室在利用框架核酸开展纳米构筑、单分子分析和纳米机器人方面的工作，提出基于 DNA 分子的大数据存储是框架核酸发展的新方向。

与会专家讨论后，提出分子科学前沿交叉领域的发展方向包括：  
(1) 发展高灵敏度、高选择性、高信息量、快速、简便、原位、经济的化学分析方法；(2) 研发微型化、自动化、数字化、智能化、信息化的分析仪器，为化学、生命科学、环境科学、食品科学、材料科学、国家安全等提供关键方法和技术支撑；(3) 以分子医学为导向，发展分子探针和生物相容反应，为揭示生命过程的本质和规律提供物质和工具；(4) 重点关注神经、免疫等系统的分子机制以及生物体不同层次之间的化学通讯机制；(5) 发展有效的生物大分子合成与化学修饰方法，催生新一代的生物合成化学和合成生物学；(6) 加强新靶标功

能干预与成药性确证，开发新药物载体材料，创新药物发现途径；(7) 针对全球环境保护的关键问题，研究污染物的表征、环境过程与微观机制、生态与健康效应及防治原理等，并将理论研究成果应用于环境保护实践，进一步加强对生态文明战略实施的支撑作用。

#### 四、共识和建议

经过深入研讨，本次会议形成了以下几点建议：

**(1) 科学引导，建立有利于原始创新的科研环境。**立足未来 10 年取得深刻影响的重大科学突破，汇聚自下而上的原创思想的碰撞，加强前瞻研究和战略研判，部署自上而下的战略导向，主导制定若干方向的发展路线图，引导我国化学科研工作者寻找原创突破点，促进具有国际重大影响力的基础研究成果的产出。

**(2) 顶层设计，重视支撑条件的自主化能力建设。**关注基础研究对技术和工程的实质性支撑，以国家重大需求与市场导向为牵引，探索贯通产学研的创新模式，通过顶层设计、重点布局，在关键领域实现基础研究中“卡脖子”现象背后的科学问题，加强分子科学研究的软硬件等建设，增强我国在能源、国家安全等关键领域的自主可控能力。

**(3) 交叉融合，驱动学科和产业发展。**建立高水平研发平台，促进分子科学与化工的交叉融合，聚焦高端化工材料“卡脖子”背后的核心分子科学问题，加强上下游产业与技术的交叉融合与协同创新，推进高端材料、器件、装备及控制等技术集成，着力解决当前化工产业“低端过剩、高端不足”的结构性问题，让材料生产过程更加安全环保，催生中国“新化工”。

**(4) 优化配置，坚持有所为有所不为。**面向未来时代特征和学科发展趋势，加强优势方向、扶持薄弱方向、促进前沿方向、鼓励交叉合作，统筹规划、重点布局，实现面向未来的资源优化配置，通过国家和地方科研项目加强引导，坚持有所为有所不为，集中高水平科

研力量，强化科研领域与产业界协作，攻坚克难，争取做出引领性的创新成果。

**(5) 稳定支持，加大基础研究投入。**基础研究作为战略资源对待，重视其源头创新、技术储备、知识积累和人才培养等基础功能，持续加强分子科学原创性基础研究的投入和支持；针对基础研究人员实行长效激励与保障政策，进一步完善鼓励创新的容错机制、稳定支持的保障机制，营造潜心研究的良好环境。

**(6) 重视人才，培养国际顶尖的战略科学家。**以学风作风建设为基础，树立正确的科研价值观。着力培养创新人才和创新团队，让人才计划回归其科学本质。加强国家战略需求的人才部署，夯实人才成长土壤，确保人才队伍平稳衔接，造就若干具有鲜明特色和优势的研究机构和团队，涌现一批具有国际影响力的战略科学家。

（作者：朱道本，李玉良，张德清，中国科学院化学研究所）

致谢：感谢狄重安、郑企雨、魏妍波、姚晶晶、刘力瑶对论坛报告的记录和梳理。

联系方式：中国科学院学部工作局学术与文化处，010-59358366