



中国科学院学部科学与技术前沿论坛

面向 2035 的分子科学前沿 会议手册

主办单位：中国科学院学部

承办单位：中国科学院化学部

中国科学院学部学术与出版工作委员会

中国科学院化学研究所

北京分子科学国家研究中心

协办单位：《中国科学》杂志社

中国·北京

2021 年 4 月 12~13 日

目 录

论坛简介	1
会议须知	6
会议日程	9
代表名单	11
摘要文集	15
主持嘉宾简介	77

论坛简介

中国科学院科学与技术前沿论坛是一项由中国科学院学部主席团统一领导，各学部常委会与学部科普和出版工作委员会共同承办的高层次系列学术活动，主要着眼于科学技术前沿探索、系统评述和前瞻预测。本次科学与技术前沿论坛的主题为“面向 2035 的分子科学前沿”。

分子科学是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、提高人类的生活质量和健康水平、促进其它学科发展、推动社会进步等方面已经发挥并且将继续发挥着巨大的、不可替代的作用。分子科学将为新一代信息电子、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取得原创性成果，抢占分子科学研究的创新高地，引领分子科学的发展。

本次“面向 2035 的分子科学前沿论坛”科学与技术前沿论坛由中国科学院化学研究所朱道本院士、李玉良院士和张德清研究员组织，邀请化学和相关交叉领域的学者，将针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，主要围绕绿色合成化学、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五个主题，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。

召集人简介



朱道本

中国科学院化学研究所，研究员

个人简介

有机化学、物理化学家，原籍浙江杭州。1942 年 8 月出生上海市。中国科学院化学研究所研究员。1965 年毕业于华东化工学院（现华东理工大学）有机工业系有机染料及中间体专业，1965-1968 年为华东化工学院研究生，1997 年当选为中国科学院院士，2009 年当选第三世界科学院院士。

曾任国务院学位委员会学科评审组成员，国家自然科学基金委副主任，国家科技部重大基础研究发展规划专家顾问组副组长，中国科学院化学研究所副所长、所长，中国化学会理事长，中国材料学会副理事长。现任中国科学院学部主席团成员、化学部主任，中国科学院学术委员会成员、基础前沿交叉领域专门委员会副主任。

朱道本院士长期从事分子材料和器件研究，在新型 π 共轭材料的设计与合成、分子结构和物理化学性质的构效关系、有机半导体材料中的电荷传输机制及调控策略、有机功能器件的设计构建及功能开发和集成等领域均取得了具有国际影响力的成果，为分子材料的发展做出了重要贡献。朱道本院士曾获国家自然科学基金二等奖五项（1988、2002、2005、2007 和 2014 年），2012 年获陈嘉庚化学科学奖。



李玉良

中国科学院化学研究所，研究员

个人简介

李玉良，中国科学院化学研究所研究员、中国科学院大学教授、博士生导师，中国科学院院士。曾在荷兰阿姆斯特丹大学化学系、美国 Nortre Dame (圣母) 大学国家放射实验室和香港大学化学系从事研究及合作研究。2002 年、2005 年和 2014 年三次获得国家自然科学二等奖，两次获北京市科学技术奖(自然科学) 一等奖和中国科学院自然科学二等奖一次，2017 获首届全国创新争先奖，2017 年获何梁何利科学与技术进步奖。研究领域为碳基和富碳分子基材料定向、多维、大尺寸聚集态结构和异质结构自组织生长、自组装方法学以及在能源、催化和光电等领域的应用。



张德清

中国科学院化学研究所，研究员

个人简介

中国科学院化学研究所所长，研究员，博士生导师。1987年7月于北京师范大学化学系获得学士学位，1990年7月于中科院化学所获得硕士学位，1996年11月于德国马普学会海德堡医学研究所有机化学研究部获得博士学位(海德堡大学授予)。2002年获得国家杰出青年基金支持。主要从事有机功能分子的设计合成与光电性能研究，在新型共轭分子、大分子和多稳态分子的设计合成及其半导体性能研究，以及新概念分子器件构筑方面取得许多创新成果。担任中国化学会常务理事、中国化学会有机固体专业委员会主任、《化学通报》主编、美国化学会期刊 *ACS Omega* 共同编辑、《中国科学-化学》和 *Acc. Chem. Res.*、*Adv. Mater.* 等学术期刊的编委或顾问编委。

会务组成员

	姓名	单位	电话	邮箱
学术 秘书	狄重安	中国科学院化学研究所	13810097188	dicha@iccas.ac.cn
	刘辉彪	中国科学院化学研究所	13521237218	liuhb@iccas.ac.cn
	张关心	中国科学院化学研究所	15810947517	gxzhang@iccas.ac.cn
中国科学院 学部联系人	彭晴晴	中国科学院学部工作局 数理化学办公室	13401049369	qqpeng@cashq.ac.cn
《中国科 学》杂志社	张学梅	《中国科学：化学》编 辑部	18600653042	zhangxuemei@scichina.org
	孙陆威	《中国科学：化学》编 辑部	13520919242	sunluwei@scichina.org
会务 工作人员	魏妍波	中国科学院化学研究所	13466380130	weiyb@iccas.ac.cn
	姚晶晶	中国科学院化学研究所	13581996047	yaojingjing@iccas.ac.cn
	李勇军	中国科学院化学研究所	13718940989	liyj@iccas.ac.cn
	左自成	中国科学院化学研究所	18614066142	zuozic@iccas.ac.cn
	李诚	中国科学院化学研究所	13811004486	licheng1987@iccas.ac.cn
	张西沙	中国科学院化学研究所	18811529783	zhangxisha@iccas.ac.cn
	刘力瑶	中国科学院化学研究所	13220100165	liuliyao@iccas.ac.cn

会议须知

热烈欢迎各位代表参加中国科学院学部“面向 2035 的分子科学前沿”科学与技术前沿论坛。为保证您在会议期间的工作、生活顺利，请您注意以下事项：

一、报到安排

- 京外专家代表：

报到时间：4 月 11 日，14:00-20:00

报到地点：友谊宾馆贵宾楼前台（北京市海淀区中关村南大街 1 号，电话：010-68498888）。

- 京区专家代表：

报到时间：4 月 12 日，8:00-9:00。

报到地点：中国科学院学术会堂（北京市海淀区中关村北一条 15 号）。

二、用餐安排

4 月 11 日晚餐：友谊宾馆友谊宫自助餐（凭餐券用餐）。

4 月 12-13 日早餐：友谊宾馆贵宾楼专家在贵宾楼凭房卡用餐，其他专家凭房卡在友谊宫用餐。

4 月 12-13 日午餐：中国科学院学术会堂地下一层餐厅。

4 月 12 日晚宴：友谊宾馆宴会厅。

三、会议地点

中国科学院学术会堂

四、接送安排

会议期间将安排大巴车接送京外专家往返于宾馆与会场。京区专家请自行前往学术会堂参会。

友谊宾馆→学术会堂：4 月 12 日与 13 日早 8:20；乘车地点：友

谊宾馆贵宾楼停车场。

学术会堂→友谊宾馆(晚宴): 4 月 12 日 18:10, 4 月 13 日 13:15;
乘车地点: 学术会堂前。

注: 京区专家请自行前往学术会堂参会, 参加 12 日晚宴可统一乘坐会议大巴或自行前往。

五、会议注意事项

会议期间, 参会代表凭会务组制发的证件参加会议活动及用餐, 请妥善保管有关证件。参会代表请在“预留区”就座, 遵守会议时间。会堂内禁止吸烟。

六、特别说明

“科学与技术前沿论坛”是中国科学院学部开展的高层次学术活动, 着眼于科学技术前沿探索、系统评述和前瞻预测。为共同推进我国科技事业的发展, 让学术思想广泛传播, 中国科学院学部将对论坛的报告进行录制并在剪辑加工之后发布到互联网进行传播。现特此声明, 如您对此有异议, 可与会务组工作人员联系, 协商解决。

会议地点及友谊宾馆周边地图

中国科学院学术会堂：北京市海淀区中关村北一条 15 号

北京友谊宾馆：北京市海淀区中关村南大街 1 号



友谊宾馆各楼分布与用餐、乘车地点图



会议日程

4月11日 京外参会人员报到				
4月11日下午 14:00-20:00		酒店报到（友谊宾馆）		
4月11日下午 18:00-21:00		自助晚餐（友谊宾馆）		
4月12日 中国科学院学术会堂				
8:00-9:00		参会人员签到		
9:00-9:30		开幕式 主持人：李玉良 领导致辞：中国科学院化学部主任 朱道本 主题报告（朱道本，面向 2035 的分子科学前沿）		
论坛报告与讨论				
研讨主题：绿色合成与多尺度催化化学				
时间	报告嘉宾	工作单位	报告主题	主持嘉宾
9:30-9:45	丁奎岭	上海交通大学/中国科学院上海有机化学研究所	以 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	万立骏 张洪杰
9:45-10:00	冯小明	四川大学	新型手性配体的发现为分子创造提供新的高效途径	
10:00-10:15	唐勇	中国科学院上海有机化学研究所	分子智造-未来的合成化学？	
10:15-10:30	韩布兴	中国科学院化学研究所	绿色化学及绿色碳科学	
10:30-10:50	主题讨论			
10:50-11:10	茶歇与合影			
研讨主题：绿色合成与多尺度催化化学				
时间	报告嘉宾	工作单位	报告主题	主持嘉宾
11:10-11:25	杨万泰	清华大学	烯烃资源与聚合分子科学	洪茂椿 丁奎岭
11:25-11:40	张希	吉林大学/清华大学	超分子聚合物化学	
11:40-11:55	田中群	厦门大学	“催组装”——分子科学研究的新方向？	
11:55-12:10	田禾	华东理工大学	动态化学前沿与智能材料	
12:10-12:30	主题讨论			
12:30-13:45	午餐与休息			
研讨主题：化学储能与能量转换				
时间	报告嘉宾	工作单位	报告主题	主持嘉宾
13:45-14:00	李永舫	中国科学院化学研究所	<i>n</i> -型共轭聚合物受体光伏材料和全聚合物太阳电池	陈小明 李景虹
14:00-14:15	李灿	中国科学院大连化学物理研究所	可再生能源规模化化学储能：绿色氢能和液态阳光甲醇	
14:15-14:30	徐春明	中国石油大学	石油分子表征与工程基础	
14:30-14:45	陈军	南开大学	锂电池有机电极材料分子科学与工程	
14:45-15:00	孙世刚	厦门大学	电化学能源过程的微观结构和分子层次研究	
15:00-15:25	主题讨论			

面向 2035 的分子科学前沿

15:25-15:55	茶 歇			
研讨主题：分子/纳米材料与器件				
时 间	报告嘉宾	工作单位	报告主题	主持嘉宾
15:55-16:10	于吉红	吉林大学	分子筛在催化、分离和主客体组装方面的新应用	李亚栋 彭孝军
16:10-16:25	赵东元	复旦大学	界面组装合成多级结构功能介孔材料	
16:25-16:40	刘忠范	北京大学	石墨烯材料，制备决定未来	
16:40-16:55	成会明	中国科学院金属研究所	六元环基元无机材料：定义与展望	
16:55-17:10	高 松	华南理工大学/北京大学	Spin Manipulation in Molecules and Solid	
17:10-17:25	杨金龙	中国科学技术大学	自旋电子学分子材料设计与器件发展	
17:25-18:00	主题讨论			
18:10	全体与会嘉宾学术会堂门前乘车前往友谊宾馆			
18:30-21:00	论坛正式晚宴（友谊宾馆宴会厅）			
4 月 13 日 中国科学院学术会堂				
研讨主题：分子科学前沿交叉领域				
时 间	报告嘉宾	工作单位	报告主题	主持嘉宾
9:00-9:15	姚建年	中国科学院化学研究所	“新化学，新化工，新产业”分子科学若干问题思考	席振峰 田中群
9:15-9:30	唐本忠	香港科技大学	Aggregate: from Molecules, beyond Molecules	
9:30-9:45	江 雷	中国科学院理化技术研究所	仿生超浸润体系——量子限域超流：能量转化，化学反应与生物信息传递	
9:45-10:00	俞书宏	中国科学技术大学	仿生材料的设计合成与未来	
10:00-10:15	张 锦	北京大学	石墨炔：一种新的碳同素异形体	
10:15-10:30	张东辉	中国科学院大连化学物理研究所	面向分子科学的机器学习方法发展	
10:30-11:00	茶 歇			
11:00-11:15	江桂斌	中国科学院生态环境研究中心		陈 军 赵进才
11:15-11:30	谭蔚泓	中国科学院大学附属肿瘤医院	分子医学助力健康中国	
11:30-11:45	樊春海	上海交通大学	框架核酸：从分子创造到智能制造	
11:45-12:00	赵宇亮	国家纳米科学中心	微环境靶向与响应的药物智能输运纳米机器	
12:00-12:30	主题讨论			
12:30	闭幕式：朱道本			
12:30-14:00	午餐			
离会				

会议代表名单

序号	姓名	工作单位	职务/职称
论坛报告人（按姓氏笔画排序）			
1	丁奎岭	上海交通大学/中国科学院上海有机化学研究所	教授/研究员
2	于吉红	吉林大学	教授
3	田 禾	华东理工大学	教授
4	田中群	厦门大学	教授
5	冯小明	四川大学	教授
6	成会明	中国科学院金属研究所	研究员
7	刘忠范	北京大学	教授
8	江 雷	中国科学院理化技术研究所	研究员
9	江桂斌	中国科学院生态环境研究中心	研究员
10	孙世刚	厦门大学	教授
11	李 灿	中国科学院大连化学物理研究所	研究员
12	李永舫	中国科学院化学研究所	研究员
13	杨万泰	清华大学/北京化工大学	教授
14	杨金龙	中国科学技术大学	教授
15	张 希	吉林大学/清华大学	教授
16	张 锦	北京大学	教授
17	张东辉	中国科学院大连化学物理研究所	研究员
18	陈 军	南开大学	教授
19	赵东元	复旦大学	教授
20	赵宇亮	国家纳米科学中心	研究员
21	俞书宏	中国科学技术大学	教授
22	姚建年	中国科学院化学研究所	研究员
23	徐春明	中国石油大学	教授
24	高 松	华南理工大学/北京大学	教授
25	唐 勇	中国科学院上海有机化学研究所	研究员
26	唐本忠	香港科技大学	教授
27	韩布兴	中国科学院化学研究所	研究员
28	谭蔚泓	中国科学院附属肿瘤医院	教授
29	樊春海	上海交通大学	教授
主持嘉宾（按姓氏笔画排序）			
30	万立骏	中国科学院化学研究所	研究员
31	朱道本	中国科学院化学研究所	研究员
32	李玉良	中国科学院化学研究所	研究员
33	李亚栋	清华大学	教授
34	李景虹	清华大学	教授
35	张洪杰	清华大学	教授
36	陈小明	中山大学	教授

面向 2035 的分子科学前沿

37	赵进才	中国科学院化学研究所	研究员
38	洪茂椿	中国科学院福建物质结构研究所	研究员
39	席振峰	北京大学	教授
40	彭孝军	大连理工大学	教授
研讨嘉宾（按姓氏笔画排序）			
41	卜显和	南开大学	教授
42	马 丁	北京大学	教授
43	王 丹	中国科学院过程所	研究员
44	王 为	兰州大学	教授
45	王 训	清华大学	教授
46	王 树	中国科学院化学研究所	研究员
47	王利祥	中国科学院长春应化所	研究员
48	王笃金	中国科学院化学研究所	研究员
49	王梅祥	清华大学	教授
50	方晓红	中国科学院化学研究所	研究员
51	帅志刚	清华大学	教授
52	付宏刚	黑龙江大学	教授
53	邢献然	北京科技大学	教授
54	刘冬生	清华大学	教授
55	刘鸣华	中国科学院化学研究所	研究员
56	苏成勇	中山大学	教授
57	李 丹	暨南大学	教授
58	李 彦	北京大学	教授
59	李 振	武汉大学/天津大学	教授
60	李峻柏	中国科学院化学研究所	研究员
61	杨 柏	吉林大学	教授
62	杨国昱	北京理工大学	教授
63	杨俊林	基金委化学学部	研究员
64	来鲁华	北京大学	教授
65	迟力峰	苏州大学	教授
66	张浩力	兰州大学	教授
67	张德清	中国科学院化学研究所	研究员
68	陈 鹏	北京大学	教授
69	陈红征	浙江大学	教授
70	陈拥军	基金委交叉学部	研究员
71	范青华	中国科学院化学研究所	研究员
72	郎建平	苏州大学	教授
73	段 炼	清华大学	教授
74	俞 飏	中国科学院上海有机化学研究所	研究员
75	施章杰	复旦大学	教授
76	姜建壮	北京科技大学	教授
77	秦 勇	四川大学	教授
78	郭玉国	中国科学院化学研究所	研究员

面向 2035 的分子科学前沿

79	曹 荣	中国科学院福建物质结构研究所	研究员
80	崔春明	南开大学	教授
81	鲁统部	天津理工大学	教授
82	游书力	中国科学院上海有机化学研究所	研究员
83	裴 坚	北京大学	教授
84	熊仁根	东南大学	教授
85	薛玉瑞	山东大学	教授
86	魏志祥	国家纳米科学中心	研究员

面向 2035 的分子科学前沿

摘要文集

2021 年 4 月
中国科学院学术会堂

摘要文集目录

以 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	丁奎岭 19
新型手性配体的发现为分子创造提供新的高效途径	冯小明 21
分子智造-未来的合成化学？	唐 勇 23
绿色化学及绿色碳科学	韩布兴 25
烯烃资源与聚合分子科学	杨万泰 27
超分子聚合物化学	张 希 29
“催组装”——分子科学研究的新方向？	田中群 31
动态化学前沿与智能材料	田 禾 33
<i>n</i> -型共轭聚合物受体光伏材料和全聚合物太阳电池	李永舫 35
可再生能源规模化化学储能：绿色氢能和液态阳光甲醇 · 李 灿	37
石油分子表征与工程基础	徐春明 39
锂电池有机电极材料分子科学与工程	陈 军 41
电化学能源过程的微观结构和分子层次研究	孙世刚 43
分子筛在催化、分离和主客体组装方面的新应用	于吉红 45
界面组装合成多级结构功能介孔材料	赵东元 47
石墨烯材料，制备决定未来	刘忠范 49
六元环基元无机材料：定义与展望	成会明 51
Spin Manipulation in Molecules and Solid	高 松 53
自旋电子学分子材料设计与器件发展	杨金龙 55
“新化学，新化工，新产业”分子科学若干问题思考	姚建年 57
Aggregate: from Molecules, beyond Molecules	唐本忠 59
仿生超浸润体系——量子限域超流：能量转化，化学反应与生物信息传递	江 雷 61

仿生材料的设计合成与未来	俞书宏 63
石墨炔：一种新的碳同素异形体	张 锦 65
面向分子科学的机器学习方法发展	张东辉 67
.....	江桂斌 69
分子医学助力健康中国	谭蔚泓 71
框架核酸：从分子创造到智能制造	樊春海 73
微环境靶向与响应的药物智能输运纳米机器.....	赵宇亮 75



丁奎岭

上海交通大学，讲席教授

中国科学院上海有机化学研究所，特聘研究员

个人简介

主要从事基于有机金属催化的不对称反应和绿色化学研究。在 *Angew. Chem. Int. Ed.*, *Acc. Chem. Res.*, *Chem. Eur. J.* 和 *Org. Lett.* 等十多个国际著名化学刊物担任编委、顾问编委、共同主席或副主编，担任 IUPAC 导向有机合成的金属有机化学国际会议（OMCOS）以及金属有机与催化国际会议（OM & Cat）咨委。先后获国家自然科学奖二等奖、Yoshida Prize 和 Humboldt Research Award 等奖励荣誉称号。

以 CO₂ 为原料的甲醇与 DMF 制备： 从分子催化剂设计到工程化实现

丁奎岭

中国科学院上海有机化学研究所、上海交通大学化学化工学院，上海，200032

Email: kding@sioc.ac.cn

实现碳达峰和碳中和，加快推动绿色低碳发展、持续改善生态环境质量，将对中国和世界经济社会带来深刻影响。要实现这一目标，除了政策层面的保障，科学技术的支撑不可或缺，化学应该有所作为。

将CO₂与可再生能源结合，实现CO₂作为碳-1资源的大规模转化与应用，是一条实现化工可持续发展的重要途径。本报告将从CO₂催化转化的分子催化剂设计到催化反应应用以及工程化实践等角度，介绍基于CO₂为原料的甲醇与DMF催化合成新过程。

参考文献

- [1] Han, Z.; Rong, L.; Wu, J.; Zhang, L.; Wang, Z.; Ding, K., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2012**, 51: 13041.
- [2] 丁奎岭, 韩召斌, 中国发明专利, 申请号 2012104033325, 申请日期 2012 年 10 月 19 日; PCT/CN2013/073095, 申请日期 2013 年 3 月 22 日, US9434665B2, 2016/9/6
- [3] Zhang, L.; Han, Z.; Zhao, X.; Wang, Z.; Ding, K., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, 54: 6186.
- [4] 丁奎岭, 张磊, 中国发明专利, 申请号 2015100866259, 申请日期 2015 年 2 月 17 日, PCT/CN2016/072342, 2016 年 1 月 27 日.



冯小明

四川大学，教授

个人简介

四川大学化学学院教授，2013 年当选中国科学院院士，2014 年授予英国皇家化学会会士。任中国化学会常务理事、手性专业委员会主任委员和有机化学学科委员，以及国内外 11 个学术刊物编委或顾问编委。主要从事手性催化剂设计合成、不对称合成及手性药物和具有生物活性化合物的合成研究。设计和建立了手性双氮氧小分子和金属配合物催化剂库，是目前为数不多的“优势手性配体和催化剂”，被称为 **Feng** 催化剂，已由著名试剂公司面向全球销售。利用发展的原创 **Feng** 催化剂，高效高选择性地实现了 60 多类不对称催化反应，包括冠以完成人姓氏的有机人名反应 **Roskamp-Feng** 反应，为重要生理活性手性化合物的合成提供了新方法。以第一作者或通讯作者在国内化学学术刊物上发表 **SCI** 论文 400 余篇，累计 **SCI** 他引 13000 余次，应邀在化学顶级期刊 *Chem. Rev.*、*Acc. Chem. Res.* 等撰写综述 15 篇，参编国内外专著 18 个章节，获授权美国发明专利 1 项、中国发明专利 6 项。获 2010 年国家自然科学二等奖，2009 年和 2019 年教育部自然科学奖一等奖，2018 年未来科学大奖—物质科学奖，2019 年何梁何利基金科学与技术进步奖，2020 年全国创新争先奖章、2020 年陈嘉庚科学奖—化学奖、2020 年全国杰出教学奖、2020 年四川省科技进步杰出贡献奖，以及中国化学会有机合成创造奖、手性化学奖、黄耀曾金属有机化学奖等。

新型手性配体的发现为分子创造提供新的高效途径

冯小明

四川大学 化学学院

四川省成都市武侯区望江路 29 号, 610064

Email: xmfeng@scu.edu.cn

手性物质是医药、农药、信息和材料领域发展的重要物质基础。通过不对称催化获得手性物质是最高效和环境友好的途径,也是相关产业可持续性发展的基础和前沿研究领域。其中,手性配体和手性催化剂是不对称催化的核心。

我们团队发展的一类全新具有柔性骨架的手性双氮氧配体和催化剂,是“优势”手性配体和催化剂研究方面的代表性工作,打破了传统手性配体设计中的刚性骨架要求^[1],在国内外产生了重要影响。手性双氮氧化合物原料价廉易得,合成简便,可修饰性和可调性强,对水和空气不敏感。这类配体可与主族金属和过渡金属以及稀土金属等20多种金属离子配位,形成手性双氮氧金属配合物。X-射线单晶结构显示:手性双氮氧配体的4个氧原子与金属离子配位后,分子内氢键被破坏。离子半径较小的金属,如主族金属、过渡金属和Sc(III),与手性双氮氧配位后以6配位的形式存在;而离子半径较大的镧系金属,则以7或8配位的形式存在。我们运用自主发展的手性催化剂和催化策略,在温和条件下实现了60多类重要的不对称催化反应,获得很高的效率和对映选择性、广泛的底物普适性^[2]。实现了多类新反应,包括在中国本土发展的有机化学反应——“Roskamp-Feng”反应(Feng即冯小明)。手性双氮氧被称为“冯氏催化剂”,现已成为商品化试剂,被国内外多个课题组和公司成功应用,发展的不对称催化方法为重要手性功能分子,特别是手性药物分子的合成提供了高效途径。我们将结合手性双氮氧金属配合物结构及其催化的不对称反应,探讨催化剂对底物活化和反应立体选择性控制模式,为新型优势手性金属配合物的理性和精准设计提供参考。

参考文献

- [1] (a) Yoon, T. P.; Jacobsen, E. N., *Science* **2003**, 299: 1691. (b) Zhou, Q.-L., Ed. *Privileged Chiral Ligands and Catalysts*; Wiley-VCH: Weinheim, Germany, **2011**.
- [2] (a) Liu, X. H.; Lin, L. L.; Feng, X. M., *Acc. Chem. Res.* **2011**, 44: 574. (b) Liu, X. H.; Lin, L. L.; Feng, X. M., *Org. Chem. Front.* **2014**, 1: 298. (c) Liu, X. H.; Zheng, H. F.; Xia, Y.; Lin, L. L.; Feng, X. M., *Acc. Chem. Res.* **2017**, 50: 2621. (d) Liu, X. H.; Dong, S. X.; Lin, L. L.; Feng, X. M., *Chin. J. Chem.* **2018**, 36: 791. (e) Wang, Z.; Liu, X. H.; Feng, X. M., *Aldrichimica Acta* **2020**, 53: 3. (f) Wang, M.-Y.; Li, W., *Chin. J. Chem.* **2021**, DOI: 10.1002/cjoc.202000508.



唐勇

中科院上海有机化学研究所，研究员

个人简介

中国科学院上海有机化学研究所研究员。1964 年 9 月出生于四川井研县，籍贯四川井研。1986 年毕业于四川师范大学化学系，1992 年于中国科学院上海有机化学研究所获硕士学位，1996 年于该所获博士学位。

主要从事金属有机化学和高分子化学研究。针对均相催化领域的选择性控制与催化等核心科学问题，发展了在催化剂的活性中心区域装载配位基团以调控其催化行为的方法，提出了边臂策略设计金属有机催化剂的理念。运用该策略，设计了系列新型手性配体并成功应用于二十余类重要的不对称催化反应；发展了叶立德反应选择性调控的一些新方法；设计了新型单中心聚烯烃催化剂，为聚乙烯多样性链结构的选择性合成提供了高效的途径。研究并阐明了边臂的作用机制和规律，部分基础研究成果实现了转移转化，实现了工业化应用。曾获国家自然科学基金二等奖、中国青年科技奖，全国先进科技工作者等。

分子智造-未来的合成化学?

唐勇*, 李昂

中国科学院上海有机化学研究所

零陵路 345 号, 上海 200032

Email: tangy@sioc.ac.cn

新物质创制是人类社会进步的重要基础, 合成科学为新物质创制提供了核心手段和方法。在过去半个世纪中, 合成科学处于高速发展的黄金时期, 发展经历了从“冲刺登顶”到“思辨维新”的过程。在取得巨大成就的同时, 合成科学的瓶颈日益凸现, 表现在合成化学科学研究范式和技术应用模式的保守性逐渐难以满足新物质特别是功能物质创制的需求。

分子智能制造 (简称“分子智造”) 是将合成科学与人工智能和自动化技术融合, 贯通“结构设计→合成执行→功能实现”全链条的下一代合成科学研究与技术应用的范式。“分子智造”秉承了理想合成的“思考深刻、操作简单、功能精准”的理念, 代表了合成科学发展的变革性机遇。本报告将结合该领域的发展现状, 浅谈我们的一点看法。

参考文献

- [1] Ahneman, D. T.; Estrada, J. G.; Lin, S.; Dreher, S. D.; Doyle, A. G., *Science* **2018**, 360: 186.
- [2] Zahrt, A. F.; Henle, J. J.; Rose, B. T.; Wang, Y.; Darrow, W. T.; Denmark, S. E., *Science* **2019**, 363: 247.
- [3] Coley, C. W.; Green, W. H.; Jensen K. F., *Acc. Chem. Res.* **2018**, 51: 1281.
- [4] Granda, J. M.; Donina, L.; Dragone, V.; Long, D. L.; Cronin, L., *Nature* **2018**, 559: 377.
- [5] Coley, C. W.; Thomas, D. A.; Lummiss, J. A. M.; Jaworski, J. N.; Breen, C. P.; Schultz, V.; Hart, T.; Fishman, J. S.; Rogers, L.; Gao, H.; Hicklin, R. W.; Plehiers, P. P.; Byington, J.; Piotti, J. S.; Green, W. H.; Hart, A. J.; Jamison, T. F.; Jensen, K. F., *Science* **2019**, 365: eaax1566.
- [6] Burger, B.; Maffettone, P. M.; Gusev, V. V.; Aitchison, C. M.; Bai, Y.; Wang, X.; Li, X.; Alston, B. M.; Li, B.; Clowes, R.; Rankin, N.; Harris, B.; Sprick, R. S.; Cooper, A. I., *Nature* **2020**, 583: 237.
- [7] Mikulak-Klucznik, B.; Gołębiowska, P.; Bayly, A. A.; Popik, O.; Klucznik, T.; Szymkuć, S.; Gajewska, E. P.; Dittwald, P.; Staszewska-Krajewska, O.; Beker, W.; Badowski, T.; Scheidt, K. A.; Molga, K.; Mlynarski, J.; Mrksich, M.; Grzybowski, B. A., *Nature* **2020**, 588: 83.
- [8] Molga, K.; Szymkuć, S.; Grzybowski, B. A., *Acc. Chem. Res.* **2021**, doi: 10.1021/acs.accounts.0c007



韩布兴

中国科学院化学研究所，研究员

个人简介

韩布兴，中国科学院化学研究所研究员、华东师范大学特聘教授、英国诺丁汉大学荣誉教授，中国科学院院士、发展中国家科学院院士、英国皇家化学会会士，中国科学院胶体界面与化学热力学重点实验室主任，上海市绿色化学与化工过程绿色化重点实验主任。1982年毕业于河北科技大学(原河北化工学院)化学工程系，1985年在中国科学院长春应用化学研究所获硕士学位，1988年在中国科学院化学研究所获博士学位，1989至1991加拿大Saskatchewan大学做博士后研究。1991-1993任中国科学院化学研究所副研究员，1993年至今任中国科学院化学研究所研究员。

主要从事物理化学与绿色化学的交叉研究，在绿色溶剂体系化学热力学、绿色溶剂在化学反应和材料合成中的应用研究方面取得系统性成果。在 *Science*、*Nat. Commun.*、*Sci. Adv.*、*Angew. Chem. Int. Ed.*、*J. Am. Chem. Soc.*等期刊发表SCI收录论文700余篇，论文被引用30000余次，获国家专利40余件，在重要学术会议做大会报告和邀请报告200余次。作为第一完成人获国家自然科学奖二等奖1项、北京市科学技术奖二等奖1项，获Elsevier出版社*J. Colloid interf. Sci.*期刊终身成就奖，作为非第一完成人获国家和省部级科技进步奖3项。

现任创新中国智库首席科学家、中国化学会常务理事；中国化学会绿色化学专业委员会主任、北京能源与环境学会会长；曾任国际纯粹与应用化学联合会(IUPAC)绿色化学分会主席、IUPAC第三学部领衔委员、中国化学会化学热力学与热分析专业委员会主任等；担任Cell出版社*The Innovation*期刊主编，*Green Chem.*、*Chem. J. Chinese Universities*、《科学通报》、《物理化学学报》期刊副主编，*Chem. Sci.*、*ChemSusChem*、*Curr. Opin. Green Sustain. Chem.*、*J. Supercritical Fluids*、*J. Chem. Thermodyn.*、中国科学(化学)等多种期刊的编委或顾问编委。

绿色化学及绿色碳科学

韩布兴

中国科学院化学研究所

北京市海淀区中关村北一街 2 号, 100190

E-mail: Hanbx@iccas.ac.cn

化学工业为人类文明和社会进步做出了巨大的贡献,具有不可替代的作用,人类社会和经济发展离不开化学工业。然而,在生产化学品、材料和能源产品的过程中,大量原料变成了废弃物和有害物质,并且消耗大量的能源。因此,许多传统的化学工业造成严重的浪费和环境污染,甚至直接导致人身伤亡事故。随着世界人口的不断增加,资源短缺和环境问题日趋严重,如何使化学工业在创造物质财富的同时,保护人类赖以生存的环境,实现可持续发展已成为人类面临的重大问题,也是化学工业面临的挑战。

绿色化学是从源头消除环境污染、具有明确社会需求和科学目标的新兴交叉领域。绿色化学要求在综合考虑环境因素与社会可持续发展的前提下,重新审视传统的化学化工问题。绿色化学的主体思想是采用无毒无害的原料和助剂,通过原子经济性反应以及高效绿色的生产过程,生产绿色产品。绿色化学是化学学科发展的必然趋势,其发展必将推动化学及相关学科的发展以及生产生活方式的变革。近 30 年来,绿色化学发展迅速,在节约原料、保护环境、保障人类健康与安全、促进社会经济可持续发展方面发挥了日益显著的作用,而且将发挥越来越重要的作用。应该指出的是,尽管近年来绿色化学得到了长足发展,但仍处于初始阶段,其内涵、原理、内容和目标仍需要不断的充实和完善,发展绿色化学、推动经济社会可持续发展是一项长期的任务。

碳资源是人类不可缺少的资源。绿色碳科学的关键是研究和优化碳资源加工、能源利用、碳固定、碳循环整个过程中含碳化合物的转化规律和相关工业过程,实现碳资源高效利用和二氧化碳排放最小化。发展绿色碳科学其对于碳资源高效、清洁、循环利用极为重要。

发展绿色化学和绿色碳科学是实现化学工业持续发展的重要途径。此报告将简要介绍绿色化学及绿色碳科学,分析和讨论其发展趋势。



杨万泰

清华大学，教授

北京化工大学材料学院，教授

个人简介

杨万泰，教授，中国科学院院士。1956 年出生于河北成安。1982 年自清华大学化学工程系高分子专业（化七一班）获学士学位，1985 年自北京化工大学高分子系获硕士学位，1996 年自瑞典皇家理工学院聚合物工艺系获博士学位。1985 年起任教于北京化工大学，1998-2005 任聚合物科学系主任，2005-2016 年任材料学院院长。研究方向为高分子化学。2000 年获得国家自然科学基金杰出青年基金，2001 年获得教育部长江学者特聘教授称号，2017 年当选为中国科学院院士。2018 年 9 月起在清华大学化学工程系高分子研究所工作。

烯烃资源与聚合分子科学

杨万泰

清华大学, 北京, 100084

北京化工大学材料学院, 北京, 100029

Email: yangwt@mail.buct.edu.cn

烯烃工业是石油化工产业的核心, 其产品占石化产品的75%以上, 在国民经济中占有重要的地位; 烯烃的聚合化学及技术大都来自于上世纪初页的欧美。如1954年Ziegler - Natta 催化剂(1963年诺贝尔奖)的发现, 可使廉价的乙烯和丙烯经简单聚合方法变成聚乙烯和聚丙烯, 不仅使其成为全球第一和第二大塑料, 并由此带来一个全球烯烃产业链。该产业链从上世纪七十年代开始逐渐进入我国, 并成为我国石化工业的核心支柱产业。进入本世纪以来, 中国烯烃产业得到空前和快速发展, 但带来一系列的新的社会及工业问题, 如废弃烯烃、白色污染等; 这就对聚合分子科学或高分子化学提出了新的挑战。本报告将从资源角度, 简单叙述高分子分子科学发展在材料发展过程中的作用, 并讨论仍然存在一些重大挑战和目前聚合分子科学的前沿和机会。

参考文献

1. 陈冬; 马育红; 赵长稳; 王力; 张先宏; 杨万泰. 自稳定沉淀聚合原理、方法及应用. *中国科学: 化学* **2020**, 50: 732.
2. Liu, Z.; Chen, D.; Zhang, J.; Liao, H.; Chen, Y.; Sun, Y.; Deng, J.; Yang, W. *Research* **2018**, 9370490.
3. Xing, C. M.; Yang, W. T., *Macromol. Rapid Commun.* **2004**, 25: 1568.
4. Xing, C. M.; Yang, W. T., *J Polym Sci Part A: Polym Chem* **2005**, 43: 3760.
5. Xing, C. M.; Yang, W. T., *Macromol. Chem. Phys.* **2006**, 207: 621.



张希

清华大学，教授

吉林大学，校长

个人简介

张希于吉林大学获得分析化学学士学位（1986），高分子化学与物理硕士（1989）和博士学位（1992），导师为沈家骢教授和德国 Mainz 大学 Helmut Ringsdorf 教授。之后，他留校工作，1994 年晋升教授。1999 年教育部长江学者奖励计划特聘教授。自 2003 年，清华大学大学化学系教授。曾任清华大学化学系主任（2008-2014），清华大学学术委员会主任（2014-2018），国家自然科学基金委员会化学部主任（2014-2018），国家自然科学基金委员会副主任（2018）。自 2018 年 12 月，吉林中学校长。兼任中国化学会高分子学科委员会主任，《高分子学报》主编，CCS Chemistry 常务副主编。2007 年当选中国科学院院士，2008 年英国皇家化学会会士，2016 年美国化学会会士，2016 年何梁何利科学与进步奖。他一直从事超分子化学与高分子化学交叉领域的研究，主要包括超分子聚合物，超分子自由基，超分子化疗，超两亲分子，含硒高分子，有序分子膜，单分子力谱。

超分子聚合物化学

张希

清华大学化学系, 北京市, 100084

Email: xi@mail.tsinghua.edu.cn

高分子科学与超分子化学的交叉融通产生了形式多样的超分子聚合物体系。一方面, 分子构筑基元可基于共价键合成得到聚合物, 再自组装得到具有特定结构和功能的超分子聚合物体系; 另一方面, 分子构筑基元可基于非共价键合成超分子聚合物, 再基于多级次自组装形成超分子聚合物体系。巧妙地利用非共价键的动态可逆特性, 能够调控自组装的过程及组装体的结构, 同时赋予超分子聚合物体系特定的功能, 如自适应、自修复、可再生以及刺激响应性等。

尽管超分子聚合物研究取得了长足进步, 但如何可控地制备超分子聚合物仍是巨大的挑战。为解决这一问题, 我们建立了基于主体增强的非共价键的超分子聚合新方法, 可用于组装线型、支化和超支化的超分子聚合物。我们提出了“超分子单体”的新概念, 建立了超分子单体的共价聚合以制备超分子聚合物的新方法, 可控地制备了线型、交联超分子聚合物, 以及超分子微凝胶、超分子水凝胶等可降解的超分子材料。我们还建立了自分类识别驱动和控制的超分子聚合、超分子界面聚合、超分子乳液聚合、超分子催化聚合等几种可控超分子聚合新方法, 丰富了非共价键合成的方法学, 并推动超分子聚合向可控方向发展。最近, 通过超分子单体与共价单体的共聚合, 我们制备了可再生的交联超分子聚脲材料。该材料融合了基于共价高分子材料的力学性能与基于非共价键的超分子聚合物的可回收再加工性质。

超分子聚合物体系的研究仍然有许多重要的问题尚待解决。如, 我们仍无法像自然界创造DNA和蛋白质那样, 精确组装得到高度有序、多层次和多级的超分子聚合物体系; 超分子聚合物体系的结构可预测性和精确性仍然是没有完全解决的问题; 尚缺乏商品化的超分子聚合物材料等。在未来超分子聚合物体系研究中, 我需要注意将理论与实验研究相结合, 将基础研究与应用研究相结合, 利用超分子聚合物体系的研究成果推动社会的进步, 满足人们对美好生活的更高需求。

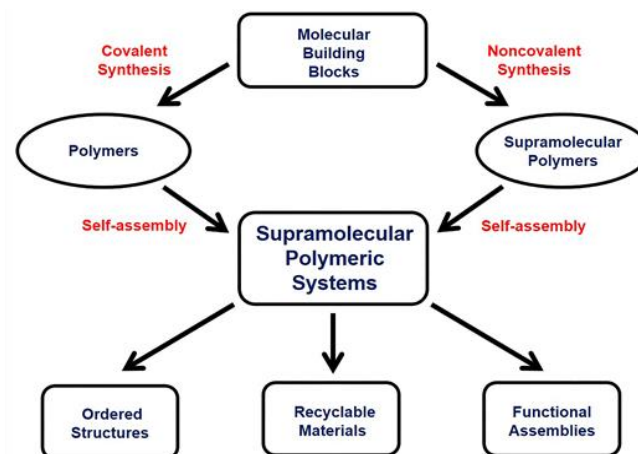


图1. 超分子聚合物体系: 设计、组装和功能

参考文献

- [1] 张希, 王力彦, 徐江飞, 陈道勇, 史林启, 周永丰, 沈志豪. 高分子学报, **2019**, 50: 973.
- [2] Qin, B.; Yin, Z.; Tang, X.; Zhang, S.; Wu, Y.; Xu, J.-F.; Zhang, X., *Progress in Polymer Science* **2020**, 100: 101167.



田中群

厦门大学化学化工学院，教授

个人简介

田中群，物理化学家。作为文革后首批大学生考入厦门大学化学系，1982 年本科毕业后通过国家教委考试，于 1983 年前往英国南安普敦大学化学系，师从英国皇家学会院士 Fleischmann 教授，1987 年获博士学位后即回到厦门大学做博士后，参加固体表面物理化学国家重点实验室的建设。1991 年底被破格提升为教授。1996 年获国家自然科学基金委杰出青年基金，2005 年当选为中国科学院院士，2016 年当选为国际电化学学会主席。现任嘉庚创新实验室主任、厦门大学工程技术学部主任。

主要从事表面（等离激元）增强拉曼光谱、谱学电化学、纳米化学和分子组装等方面的研究。从实验上和理论上深入研究表面增强拉曼散射(SERS)效应及其应用，基本解决了 SERS 领域长期未决的应用瓶颈问题；发展电化学拉曼光谱的实验及理论研究方法和建立有关联用技术和产品，揭示各类界面电化学结构问题；针对分子自组装体系，提出催组装新概念等。1999 年获香港求是科技基金会“杰出青年学者奖”，2012 年获英国皇家化学会法拉第奖章，2013 年被南安普敦大学授予荣誉科学博士并获国际电化学会 Tacussel 奖。2015 年获法国科学院和法国研究院授予法中成就奖，2015 年获得日本日立公司光谱学创新奖，2017 年获美国化学会光谱分析奖，2018 年获中国光谱成就奖，2019 年获国家自然科学基金二等奖。

现为中国科学院化学学部常委、教育部科技委委员、国家基金委化学部咨询委员会委员，现任 Chem. Soc. Rev., 中国科学-化学, J. Raman Spectroscopy 的副主编及 J. Am. Chem. Soc., Chem. Sci., Chem., Matter 等十余个国际刊物的顾问编委。

“催组装”——分子科学研究的新方向？

田中群

厦门大学化学化工学院，固体表面物理化学国家重点实验室

福建省厦门市思明南路 422 号，邮编：361005

Email: zqtian@xmu.edu.cn

分子组装是构成分子以上层次物质世界的重要方式，也是以分子为基元构筑新材料体系和揭示生命现象的重要手段。研究分子组装的多位点弱键协同作用和可控作用方式，可能是分子科学研究中最重要的科学问题之一；发展高效、精准、可控的分子组装手段是分子科学研究中的重要挑战。

我们之前将合成中广泛应用的催化概念拓展至分子组装的研究中，提出用于调控和加速组装过程的催组装(catassembly)新思路。催组装指的是通过加入一类称为“催组剂”(catassembler)的物质，加速组装过程或者协助组装基元选择合适的组装路径而获得目标组装体；催组剂在组装前后不发生变化，也不存在于最后的组装体中。究其功能而言，催组剂之于分子组装，正如催化剂之于化学反应。相较于自组装和其他助组装手段，催组装具有更高效和高度可控的特点。经过数年努力，我们从多个方面对催组装的研究体系、研究方法和理论基础进行了全方位探索，初步建立了一系列的小分子、核酸和蛋白质典型催组装体系，发展了微流控核磁等组装过程表征方法，从超越催化动力学的控制论和信息论的角度对催组装的理论基础进行了初步探索。

在探索催组装这一组装新方法过程中，我们愈发地认识到，分子组装研究需要突破自组装框架的束缚，并且越复杂的组装过程越需要催组装的协助。例如，在生命体这一复杂组装体中，存在着众多的催组装过程。分子伴侣、组装伴侣、组蛋白伴侣、别构因子等催组剂在蛋白质折叠、蛋白质酶体组装、染色质重塑、酶活性调节等过程中发挥着不可替代的作用。深入研究并学习生命体中精准高效的调控手段和机理，发展新颖的人工催组装方法，可能是分子科学发展中的突破口之一。向生命和自然学习，需要探索和建立多层次协同递进的全系统组装的思维框架和研究范式。在组装基元和催组剂的协同设计、组装过程动力学机理的研究方面都需要提出新思路并进而发展分子组装、表征和理论的新方法。

本报告将探讨该方向的一些机遇与挑战。催组装新方法的发展可能是促进分子组装走向更复杂和更具功能性的层级、推进化学与生命科学的学科交叉、促进分子科学研究范式革新的重要突破口之一。

致谢：衷心感谢十年来参加和支持催组装研究的所有老师和同学们。

参考文献

- [1] 王宇, 林海昕, 丁松园, 刘德宇, 陈亮, 雷志超, 范凤茹, 田中群. 中国科学·化学, **2012**, 4, 525.
- [2] Wang, Y.; Lin H.; Chen L.; Ding, S.; Lei, Z.; Liu, D.; Cao, X.; Liang, H.; Jiang, Y.; Tian, Z., *Chem. Soc. Rev.* **2014**, 1: 399.
- [3] Fang, H.; Sun, Y.; Wang, X.; Sharma, M.; Chen, Z.; Cao, X.; Utz, M.; Tian, Z., *Sci. Chi. Chem.* **2018**, 61: 1460.
- [4] Wang, Y.; Sun, Y.; Shi, P.; Sartin, M.; Lin, X.; Zhang, P.; Fang, H.; Tian, Z.; Cao, X., *Chem. Sci.* **2019**, 10: 8076.
- [5] Zhou, X.; Yao, D.; Hua, W.; Huang, N.; Chen, X.; Li, L.; He, M.; Zhang, Y.; Guo, Y.; Xiao, S.; Bian, F.; Liang, H., *Proc. Natl. Acad. Sci.* **2020**, 117: 5617.
- [6] 雷志超, 王忻昌, 瞿航, 李之豪, 周岑, 杨柳林, 曹晓宇, 田中群. 中国科学·化学, **2020**, 12, 1781.



田禾

华东理工大学，教授

个人简介

中国科学院院士、发展中国家科学院 (TWAS) 院士。

现任中国化学会第三十届理事会副理事长、华东理工大学第十一届学术委员会主任委员。ACS Applied Materials & Interfaces 副主编、《中国科学：化学》副主编及多家国际学术刊物的国际编委或顾问编委等。田禾教授主要从事精细化工尤其是功能染料的基础与应用研究，曾获国家自然科学基金二等奖和国家科技进步奖二等奖等多项科技奖励，获 2016 年度法国-中国化学会讲座奖、2019 年度上海市科技功臣奖和 2020 年全国先进工作者。2014 年至 2020 年度田禾在化学领域连续七年均是国际高被引用学者(Web of Science)。

动态化学前沿与智能材料

田禾

华东理工大学化学与分子工程学院
上海市梅陇路 130 号，邮编：200237
Email: tianhe@ecust.edu.cn

未来绿色化学的设计准则之一是使用非共价键代替共价键去制备新材料包括可回收的塑料。那么共价键与非共价键的结合还能发挥什么作用？人们通过功能分子基元，包括机械互锁功能分子机器基元的动态共价键和非共价键的多级组装，创制具有刺激响应、可逆性、自修复的自适应性智能材料，因此，动态组装分子材料是材料化学的前沿研究领域之一。当然可能面临一些挑战：比如，选择性解聚反应、无溶剂过程、可利用的单体定量回收等等。我们实验室通过选择性多层次多作用力组装构建新型纯有机室温磷光材料，提出共组装促进室温磷光（Co-Assembly Promoted Phosphorescence @RT: co-APP@RT）材料构建策略。

参考文献

- [1] Zimmerman, J. B.; Anastas, P. T.; Leitner, W., *Science*, **2020**, 367: 397.
- [2] Zhang, T.; Ma, X.; Wu, H.; Zhu, L. L.; Zhao, Y. L.; Tian, H., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, 59: 11206.
- [3] Worch, J. C.; Dove, A. P., *ACS Macro Lett.* **2020**, 9: 1494-1506
- [4] Deng, Y.; Zhang, Q.; Feringa, B. L.; Tian, H.; Qu, D-H., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, 59: 5278.
- [5] Hermens, J. G. H.; Feringa, B., *Sci. Adv.* **2020**, 6: 0026
- [6] Zhang, Q.; Deng, Y-X.; Geise, G. M.; Feringa, B. L.; Tian, H.; Qu, D-H., *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, 141: 12804.

李永舫



中国科学院化学研究所，研究员

个人简介

1948 年 8 月 10 日出生于重庆，籍贯河南省睢县。1966 届高中、1977 级读大学（华东化工学院抗菌素专业（现华东理工大学生物工程专业）），1979 年提前考取该校物理化学专业研究生，1982 年获硕士学位，1986 年在复旦大学化学系物理化学专业获博士学位。（导师：吴浩青院士）；1986.8. - 1988.8.，中科院化学所 博士后（合作导师：钱人元院士）。1988.9. 博士后出站后留化学所工作，1993 年晋升研究员。2013 年当选中科院院士。现任《高分子通报》主编、《中国科学 化学》副主编、中国化学会监事。

获奖情况：

1. “锂电池电极反应机理—电化学嵌入反应的研究” 1987 年获国家教委科技进步二等奖（排名第二，排名第一是吴浩青院士）。
2. “导电聚吡咯的研究” 1993 年获中国科学院自然科学一等奖；1995 年获国家自然科学基金二等奖（排名第二，排名第一是钱人元院士）。
3. 1998，获人事部授予“中青年有突出贡献专家”称号。
4. “导电聚合物电化学和聚合物发光电化学池的研究” 获 2005 年度北京市科学技术奖一等奖。（排名第一）
5. “带共轭侧链的聚合物给体和茚双加成富勒烯受体光伏材料” 获 2018 年度国家自然科学基金二等奖（排名第一）
6. “胶体量子点的可控合成和高品质 LED 应用研究”，获 2018 年度北京市科学技术二等奖（排名第一）
7. 在近几年的研究生培养和国科大本科生教育教学方面，获 2018 年和 2020 年中科院优秀导师奖、2020 年北京市高等学校教学名师奖、2020 年“化学原理教学中的创新与实践”获中科院教育教学一等奖。2019 年被评为“北京高等学校优秀专业课（基础课）主讲教师”、2019 年“中国科学院朱李月华优秀教师奖”、2019 年度中国科学院大学“唐立新教学名师奖”。

2000 年以来主要从事聚合物太阳能电池光伏材料和器件的研究，已发表研究论文 800 多篇，国内外学术会议大会报告和邀请报告 130 多次。发表论文已被 SCI 他人引用 5 万余次，h-因子 110。

n-型共轭聚合物受体光伏材料和全聚合物太阳能电池

李永舫

中国科学院化学研究所

北京中关村北一街 2 号, 邮编 100190

Email: liyf@iccas.ac.cn

全聚合物太阳能电池 (all-PSCs) 由 *p*-型共轭聚合物 (*p*-CP) 给体和 *n*-型共轭聚合物 (*n*-CP) 受体共混活性层夹在 ITO 透明电极和金属顶电极之间所构成, 除具有一般有机太阳能电池器件结构简单、重量轻、可以制备成柔性和半透明器件等优点外, 还具有形貌和光照稳定性好以及抗弯折性能高等突出特点, 最近成为有机太阳能电池领域的研究热点。

其实 all-PSC 是与基于可溶性 C₆₀ 衍生物 PCBM 的聚合物太阳能电池 1995 年同步发展起来的, 当时使用的 *n*-CP 受体是氰基取代 PPV 衍生物 CN-PPV, 在使用卤钨灯为光源、光强为 20 mW/cm² 光照条件下全聚合物太阳能电池的能量转换效率 (PCE) 为 0.25%^[1]。2007 年, 占肖卫等开发了一种基于茚酰亚胺的 *n*-CP 受体光伏材料, 使用本组开发的带共轭侧链的聚噻吩衍生物给体光伏材料制备的 all-PSC 的 PCE 达到了 1% 左右^[2]。其后的 10 年时间里, all-PSC 使用的受体聚合物基本上都是基于茚酰亚胺和萘酰亚胺的 *n*-型 D-A 共聚物, 其中最具有代表性的是基于萘酰亚胺的 *n*-CP N2200。2016 年, 本组考虑到给体和受体聚合物的吸收互补和能级匹配, 使用宽带隙聚合物 J51 为给体、N2200 为受体, 将 all-PSC 的 PCE 提升到 8.26%, 这是当时全聚合物太阳能电池的最高效率^[3]。

但是, N2200 较弱的吸收系数限制了 all-PSC 短路电流和 PCE 的进一步提升。考虑到 2015 年以来发展的窄带隙小分子受体光伏材料具有很强的吸收和优异的光伏性能, 我们提出了窄带隙小分子受体高分子化的合成策略, 基于小分子受体 IDIC 合成了窄带隙强吸收的聚合物受体 PZ1, 基于 PZ1 的 all-PSC 的 PCE 提升到了 9.19%^[4]。这一小分子受体高分子化制备聚合物受体的策略受到同行的广泛关注和跟进, 随着明星窄带隙小分子受体 Y6 的出现, 最近使用这一策略合成的基于 Y6 的新型聚合物受体的 all-PSC 的效率已经提高到了 12~15% 的水平^[5-7]。

参考文献

- [1] Yu, G.; Heeger, A. J., *J. Appl. Phys.* **1995**, 78: 4510.
- [2] Zhan, X. W.; Tan, Z. A.; Domercq, B.; An, Z.; Zhang, X.; Barlow, S.; Li, Y. F.; Zhu, D. B.; Kippelen, B.; Marder, S. R., *J. Am. Chem. Soc.* **2007**, 129: 7246.
- [3] Gao, L.; Zhang, Z. G.; Xue, L.; Min, J.; Zhang, J.; Wei, Z. X.; Li, Y. F., *Adv. Mater.* **2016**, 28: 1884.
- [4] Zhang, Z. G.; Yang, Y. K.; Yao, J.; Xue, L.; Chen, S.; Li, X.; Morrison, W.; Yang, C.; Li, Y. F., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2017**, 56: 13503.
- [5] Du, J.; Hu, K.; Meng, L.; Angunawela, I.; Zhang, J.; Qin, S.; Liebman-Pelaez, A.; Zhu, C.; Zhang, Z.; Ade, H.; Li, Y. F., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, 59: 15181.
- [6] Zhang, Z. G.; Li, Y. F., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2021**, 60: 4422.
- [7] Peng, F.; An, K.; Zhong, W.; Li, Z.; Ying, L.; Li, N.; Huang, Z.; Zhu, C.; Fan, B.; Huang, F.; Cao, Y., *ACS Energy Lett.* **2020**, 5: 3702.



李灿

中国科学院大连化学物理研究所，研究员

个人简介

2003 年当选中国科学院院士，2005 年当选第三世界科学院院士，2008 年当选欧洲人文和自然科学院外籍院士。曾任催化基础国家重点实验室主任（1998-2014）、中国物理学会光散射委员会主任(2005-2009)、中国化学会催化委员会主任(2005-2012)、中国分子光谱学会主任(2008-2012)、国际催化学会理事会主席（2008-2012），亚太催化学会主席(2013-2017)，及第 16 届国际催化大会（ICC16）主席。

主要从事催化材料、催化反应和催化光谱表征方面的研究，包括绿色催化研究和燃料油超深度脱硫等环境催化研究；多相手性催化研究；DNA 催化研究以及紫外拉曼光谱表征研究等。从 2001 年起，致力于太阳能转化和利用科学研究，包括太阳能光（电）催化分解水、二氧化碳还原等人工光合成研究和新型太阳能电池探索研究等。先后在国际上提出了异相结、双功能助催化剂和晶面间促进光生电荷分离的新概念，在光电催化领域，提出了助催化剂、空穴储存层、界面态能级调控等重要策略，为高效太阳能转化体系构筑提供了科学基础。已培养博士研究生和博士后 160 余人，在国内外学术刊物发表正式论文 800 余篇（总他引次数 32000 余次）。在国际 Elsevier Science B.V.和 Wiley 出版系列中主编专著多部。获得发明专利授权 80 余件。重要国际会议大会邀请报告和主旨报告百余次。

担任 Chemical Communications 副主编及包括 Journal of Catalysis 在内的 12 种国际刊物的编委和国际顾问，“催化学报”共同主编及国内 10 余种刊物编委。被聘为兰州大学、中国科学技术大学、清华大学、北京大学、南京大学、吉林大学、南开大学、大连理工、中山大学、华南理工、东北师大、陕西师大等多所大学兼职教授和/或荣誉教授，皮埃尔玛丽居里大学 2002/2003 年度外聘教授，昆士兰大学荣誉教授，香港浸会大学杰出客座教授等，2018 年起受聘为兰州大学双聘院士。

先后获得中国科学院自然科学二等奖（1993 年），中国科学院青年科学家奖（1993 年），香港求是科技基金杰出青年学者奖（1997 年），中国青年科学家奖（1998 年），国家科技发明二等奖（1999 年），国际催化奖（2004 年，国际催化领域的最高荣誉，四年一次，每次一人），中国科学院杰出科技成就奖（2005 年），何梁何利科学技术进步奖（2005 年），国家自然科学基金二等奖（2011 年），中国催化成就奖（2014），辽宁省自然科学一等奖（2015 年），全国十大科技人才奖（2016 年），日本光化学奖（2017 年），中国光谱成就奖（2018 年），亚太催化成就奖（2019 年）以及国际清洁能源“创新使命领军者”奖（2020 年）等。

可再生能源规模化化学储能：绿色氢能和液态阳光甲醇

李灿

中国科学院大连化学物理研究所

辽宁省大连市沙河口区中山路 457 号, 116023

Email: canli@dicp.ac.cn

人类过度使用化石能源,造成雾霾笼罩、环境恶化、极端气候频发等等危及人类生存发展的严重问题。如何破解这些难题,实现人类社会可持续发展,是21世纪科学技术领域最为关注的研究方向。太阳能清洁无污染、取之不尽、用之不竭,是理想的能源。但如何将太阳能高效转化为人类需求的能源形式则面临巨大挑战。其中将太阳能转化为可储存、可运输的燃料(太阳燃料)被认为是科学界“圣杯”式的难题。人工光合成道法自然光合作用,是合成太阳燃料的重要策略、也是人类保护地球家园、实现生态文明、可持续发展的理想途径,而要实现这一目标,需要道法自然,进行人工光合成,攻克能量转换的相关的光催化、光电催化、电催化和生物催化的一系列难题;本报告简要介绍人工光合成这一领域的最新进展,特别介绍作者团队在可再生能源规模化储能:绿色氢能与液态阳光甲醇领域从基础科学研究走向规模化应用的实践。



徐春明

中国石油大学（北京），教授

个人简介

徐春明教授 1965 年 2 月出生，工学博士，教授，博士生导师，国家杰出青年基金获得者，“全国优秀教师”称号获得者，国家“万人计划”百千万工程领军人才，2019 年当选中国科学院院士。

是国务院学位委员会第六届、第七届学科评议组成员，教育部第六届、第七届科学技术委员会化学化工学部委员。中国化工学会副理事长、中国化学会理事、中国石油大学（北京）学术委员会副主任。曾任《Energy & Fuels》副主编、《SCIENCE CHINA (CHEMISTRY)》和《中国科学（化学）》等编委，担任《化工学报》《燃料化学学报》《Petroleum Science》等杂志编委。出版本科教材 1 本、专著 4 部，发表高水平论文 300 余篇；授权国际发明专利 36 件、中国发明专利 102 件，其中实施转化 48 件。获国家技术发明二等奖 1 项、国家科技进步二等奖 2 项。

石油分子表征与工程基础

徐春明

中国石油大学（北京）
北京昌平府学路 18 号，102200
Email: xcm@cup.edu.cn

我国年消耗原油近7亿吨，石油加工的工艺选择及过程优化存在巨大的经济效益。分子水平上认识石油化学组成，研究化学组成与油品的物理性质及化学性能间的关系，进而开发出基于分子组成的性质预测及化学转化模型，用于原料和产品调合，以及工艺过程的精细优化，在分子工程理念下开发分子炼油技术已经成为石化行业的基本共识^{1,2}。分子炼油的理论和技术在过去十多年中取得了快速发展，但是仍然面临许多挑战。石油复杂体系分子组成的量化表征是分析化学领域的一大难题，基于分子组成的性质预测仍未形成一套完善的理论体系，分离与反应工艺过程的模型化还远未深入到分子层面。坚持分子工程理念是石化行业技术发展的正确方向，学术界和工业界均应以科学的态度积极应对这一机遇和挑战。

该报告从揭示石油分子组成及结构特征、挖掘其与油品物理化学性质及催化转化行为的内在关联入手，推进石油高效清洁转化的理论向分子层次发展；构建了分子层次的物料、性质、分离与转化模型，为优化分离和催化转化过程、调控催化剂设计奠定化学与化工基础。

参考文献

- [1] 徐春明, 张霖宙, 史权, 石油炼化分子管理基础, 2019, 中国科学出版社, 北京.
- [2] 史权, 张霖宙, 赵锁奇, 徐春明, 石油科学通报, 2016, 1(2): 270.



陈军

南开大学，教授

个人简介

南开大学教授、博士生导师、中国科学院院士、发展中国家科学院院士。先进能源材料化学教育部重点实验室主任、南开大学副校长。2003 年获得国家杰出青年科学基金资助；2005 年被聘为教育部长江学者奖励计划特聘教授；2010 年担任国家 973 纳米重大科学研究计划项目首席科学家；2014 年入选中组部“万人计划”科技创新领军人才。从事无机材料与能源化学及高能电池的研究，针对氢、锂、镁等无机材料的化学能/电能储存与转化所存在的反应活性低、动力学缓慢、物质运输和电荷传递受限等科学与技术难题，带领团队开展能量高效储存与转化探索研究，通过化学、纳米和能源的交叉学科研究，探索使用新材料，来提升能量转化效率与能量储存密度，并从这两个方面优化电池效能；在 *Nature Chem.*, *Nature Commun.*, *Sci. Adv.*, *JACS*, *Adv. Mater.*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, *Nano Lett.*, *Acc. Chem. Res.*, *Chem. Soc. Rev.*, *Coord. Chem. Rev.* 等期刊上发表研究论文 500 余篇，SCI 他引 64000 余次，获发明专利授权 35 项，获国家自然科学基金二等奖（2011 年）、天津市自然科学一等奖（2006 年和 2016 年）。



孙世刚

厦门大学，教授

个人简介

1982年毕业于厦门大学化学系，1986年获法国巴黎居里大学授予国家博士学位，曾在法国科学研究中心界面电化学研究所(1986-1987)和厦门大学物理化学博士后科研流动站(1987-1989)做博士后研究。1991年任厦门大学化学化工学院教授至今。现任固体表面物理化学国家重点实验室学术委员会主任，中国化学会副理事长，中国科学院院士，国际电化学会、英国皇家化学会、中国化学会、中国化工学会、中国微米纳米技术学会会士。长期从事电催化、谱学电化学和能源电化学研究。迄今发表SCI收录论文640余篇，他引25000多次，H-因子85 (Google Scholar Data)；获授权发明专利34件(国际专利1件)，主编Elsevier著作1部、化工出版社著作2部，出版科学出版社著作1部。获国家自然科学基金二等奖、教育部自然科学奖一等奖，中国光谱成就奖、中法化学讲座奖、国际车用锂电池协会终身成就奖、国际电化学学会Brian Conway物理电化学奖章等科技奖项。担任国际电化学会会刊(*Electrochimica Acta*)，《化学学报》、《化学教育》等学术期刊副主编，《电化学》主编，和*J Electroanal Chem*, *Func Mater Lett*, *ACS Energy Lett*, *Electrochem Energy Rev*, *National Sci Rev*, *J Solid State Electrochem*, *JMCA*等学术期刊编委。获福建省杰出人民教师，全国优秀科技工作者、国家级教学名师，全国模范教师、全国先进工作者等荣誉。

电化学能源过程的微观结构和分子层次研究

孙世刚

固体表面物理化学国家重点实验室，化学化工学院化学系，厦门大学，厦门 361005

Email: sgsun@xmu.edu.cn

电化学是研究电能与化学能以及电能与物质之间相互转化及其规律的学科，在绿色化工、新能源、高端电子制造等领域发挥着重要作用。电化学的核心科学问题涉及表界面结构和过程。建立发展原位/工况研究方法是从原子和分子层次研究和揭示电化学反应机理和动态变化过程的重要途径。传统电化学方法以电信号作为激励和检测手段，获得电极反应的统计平均信息。其特点是可以准确测定电化学反应中转移的电子数，并定量解析相关的动力学数据。但是局限于仅能得到宏观和唯象的认识。在电信号激励和检测的同时，引入不同能量波段的光子探测电化学体系，可以获得分子水平反应机理和表界面微观结构变化的信息。由此发展的电化学原位/工况谱学方法，极大地推动了电化学研究从宏观到微观，从唯象到分子水平的快速发展。电化学原位/工况谱学方法的关键是需要协调和同步电和光的激励和检测信号，因此需要根据各种光谱的特点，设计和制备相应的原位光谱电化学反应池，以及相应的电子器件和计算机控制软件。

我们团队在长期的科学研究中建立了电化学原位红外光谱 (In situ FTIRS)，电化学核磁共振波谱 (EC-NMR)，电化学X-光衍射谱 (In situ XRD)，在线电化学质谱 (OEMS) 等谱学方法，和原位/工况液相透射电子显微镜等显微成像技术。本文报告运用这些方法对燃料电池、锂离子电池等电化学能量转换和储存体系的表界面过程和反应机理的主要研究结果，以及合作研究化工微观过程的进展。此外，将简要介绍正在研制的国家重大科研仪器设备研制专项“基于可调谐红外激光的能源化学研究大型实验装置”(FELiChEM)。



于吉红

吉林大学化学学院，教授

个人简介

于吉红，吉林大学化学学院教授，中国科学院院士、发展中国家科学院院士、欧洲科学院外籍院士、中国化学会副理事长；现任美国化学会 JACS 执行主编，Accounts of Chemical Research, JACS-Au, Advanced Materials, Chem, Matter, National Science Review, ACS Nano, ACS Central Science 等国际期刊编委/顾问编委。其主要研究方向为分子筛纳米孔材料的设计合成及其在能源、环境及新兴领域的应用。迄今，在包括 Science, Nat. Commun., Sci. Adv., Chem, JACS, Angew Chem. Int. Ed. 等期刊上发表 SCI 检索论文 370 余篇；获授权专利 30 余项；出版著作 7 部。现主持国家重点研发计划、国家自然科学基金重点及重大国际合作研究项目等，是国家自然科学基金委创新研究群体学术带头人、“高等学校学科创新引智计划”基地负责人。曾获得国家自然科学二等奖 2 项，获得国际纯粹与应用化学联合会 (IUPAC) 化学化工杰出女性奖，“全国模范教师”荣誉称号等。

分子筛在催化、分离和主客体组装方面的新应用

李乙 于吉红*

吉林大学化学学院无机合成与制备化学国家重点实验室

长春市前进大街 2699 号

Email: jihong@jlu.edu.cn

分子筛是一种微孔晶体材料,几十年来在化学工业中作为催化剂、吸附剂和离子交换剂发挥了不可替代的作用^[1]。通过调整其孔道结构、活性中心、晶体形态,或负载额外活性物种(金属纳米团簇/单原子),分子筛和分子筛基材料在诸多传统材料无法实现的挑战性催化和分离过程中表现出前所未有的高性能^[2-6]。在此,我们重点介绍近年来分子筛材料在催化、分离及主客体组装等领域的新应用。例如,在不使用石油化工原料的情况下高效催化生产工业上重要的碳氢化合物和含氧化合物(如液体燃料、轻烯烃、芳烃、C1-和C2-氧酸盐)^[7-13],高效分离传统方法难以分离的碳氢混合物(如烯烃与烷烃、炔烃的分离)^[14,15]、主客体组装显著改变客体物种物理性质和结构(如发光团簇、超分子网络等)^[16,17]。最后,我们对未来分子筛材料的发展前景进行了展望,包括合成方法的创新、表征技术的进步、计算技术的融入和跨学科的融合,新兴的应用等,以加快满足化工、能源、环境、生物医用等领域不断增长的需求^[17-21]。

参考文献

- [1] Li, Y.; Li, L.; Yu, J., *Chem* **2017**, 3: 928.
- [2] Zhang, T.; Walsh, A.; Yu, J.; Zhang, P., *Chemical Society Reviews* **2021**, 50: 569.
- [3] Sun, Q.; et al., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, 59: 20183.
- [4] Sun, Q.; Wang, N.; Xu, Q.; Yu, J., *Adv. Mater.* **2020**, 32: 2001818.
- [5] Zhang, J.; et al., *Nature Catalysis* **2018**, 1: 540.
- [6] Bai, R.; Song, Y.; Li, Y.; Yu, J., *Trends in Chemistry* **2019**, 1: 601.
- [7] Yarulina, I.; Chowdhury, A.; Meirer, F.; Weckhuysen, B.; Gascon, J., *Nature Catalysis* **2018**, 1: 398.
- [8] Zhang, Q.; Yu, J.; Corma, A., *Adv. Mater.* **2020**, 32: 2002927.
- [9] Ruddy, D.; et al., *Nature Catalysis* **2019**, 2: 632.
- [10] Wang, N.; Sun, Q.; Yu, J., *Adv. Mater.* **2019**, 31: 1803966.
- [11] Sun, Q.; et al., *Chem* **2017**, 3: 477.
- [12] Jin, Z.; et al., *Science* **2020**, 367: 193.
- [13] Shan, J.; Li, M.; Allard, L.; Lee, S.; Flytzani-Stephanopoulos, M., *Nature* **2017**, 551: 605.
- [14] Kumar, P.; et al., *Nature Materials* **2020**, 19: 443.
- [15] Li, H.; et al., *Science* **2020**, 367: 667.
- [16] Liu, J.; et al., *Sci. Adv.* **2017**, 3: e1603171.
- [17] Grandjean, D.; et al., *Science* **2018**, 361: 686.
- [18] Li, Y.; et al., *Nat. Commun.* **2015**, 6: 5328.
- [19] Kim, B.; Lee, S.; Kim, J., *Sci. Adv.* **2020**, 6: eaax9324.
- [20] Qiao, Y.; et al., *Joule*, **2019**, 3: 2986.
- [21] Li, Y.; Yu, J., *Nature Reviews Materials* **2021**, in press.



赵东元

复旦大学，教授

个人简介

赵东元，1963 年出生于沈阳市。1980 年考入吉林大学化学系，1984 年获得理学学士学位，1987 年获吉林大学化学系理学硕士学位。1990 年获吉林大学和大连化学物理研究所物理化学专业理学博士学位。1993 ~ 1994 年在以色列魏兹曼科学院化学物理系做博士后。1995 ~ 1996 年在美国休斯顿大学化学系做博士后。1996 ~ 1998 年在美国加州大学圣芭芭拉分校材料系和化学系做博士后。1998 年 12 月复旦大学教授；2000 年入选教育部长江“特聘教授”，2007 年被增选为中科院院士。2010 年被增选为第三世界科学院（TWAS）院士。

主要从事功能介孔材料合成、结构和在催化、电池、生物等方向应用的研究工作。发明了 20 余种以复旦大学命名的介孔材料；提出了单元分步组装机理，将无机介孔材料的合成扩展到有机组成体系；提出了“酸碱对”、“界面组装”路线，合成了一系列新型多功能有序介孔材料。在 *Nature*、*Science*、*Nature Materials*、*Nature Chemistry*、*J. Am. Chem. Soc.*、*Angew. Chem.*、*Adv. Mater.* 等国际重要刊物上发表 SCI 论文 750 余篇，获中国专利授权 59 项。论文被引用近 12 万次（ $h\ index = 165$ ）。被 ISI Web of Science 列为近十年 100 名引用率最高的化学家之一（排名 65），被汤森路透社列为全球 2012-2020 化学、材料两个领域高被引科学家；也被列为最具国际影响力的中国科学家。获国家自然科学基金二等奖（2004）；发展中国家科学院 TWAS 化学奖（2008）；国际介观结构材料协会 IMMA 成就奖（2008）；何梁何利科学进步奖（2009）；印度化学会 Rao Award（2013）；世界科学院科学奖 TWAS-Lenovo 科学奖（2016）；中国化学会-化学贡献奖（2017）；中国分子筛成就奖（2017）；国际胶体界面科学 Darsh Wasan Award（2018）；国际 Khwarizmi International Award (KIA)（2019）；Nano Research Award（2020）。曾任国际介观结构材料协会 IMMA 主席，国际沸石协会理事，英国皇家化学会 *Journal of Materials Chemistry* 主编（Editor-in-Chief），现任国际刊物 *ACS Central Science* 编辑、执行编辑，十几种国际重要刊物如：*Journal of The American Chemical Society*、*Joule* 等国际刊物的编委、顾问编委。

界面组装合成多级结构功能介孔材料

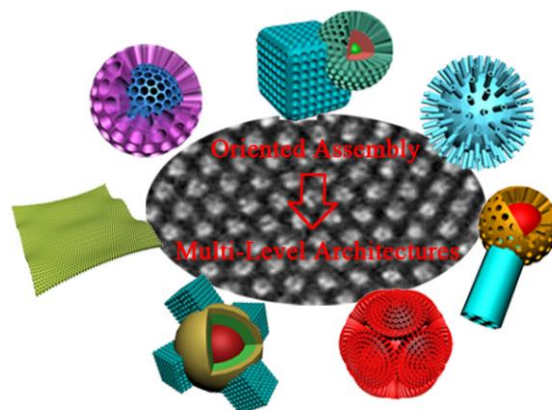
赵东元

复旦大学化学系, 先进材料实验室

上海, 200433

Email: dyzhao@fduan.edu.cn

多级结构功能介孔材料不仅具备高比表面积、孔道尺寸和孔容均一等介孔材料的独特性质, 而且具有无机功能纳米颗粒优异的光、电、磁学等特性, 在众多领域中都有广阔的应用前景。这里, 我们主要阐述近年来在界面组装调控实现取向组装可控合成多级结构功能介孔材料方面的研究进展。基于界面组装调控这一核心思想, 我们发展了一系列合成多级结构功能介孔材料新方法, 包括微乳限域自组装法、液-液界面两相法、挥发驱动定向组装、介孔各向异性生长法、界面驱动定向组装等。利用这些新型合成方法, 能够可控制备一系列新型多级结构功能 SiO_2 、 TiO_2 、聚合物/碳基介孔材料, 如核@壳、蛋黄@壳、多层核壳、三维花束状多级结构等, 还包括双面神、半球、中空单开口、多足状等非对称多级结构。所制备的多级结构功能介孔材料不仅形貌独特、均一, 而且具有可控的介观孔道结构、高比表面积、大的孔容和开放的孔道。正是由于其独特的多级结构及功能性, 使得这些材料在催化、吸附、分离、能源转化与存储、生物医药等领域展现出非常好的应用前景。



图一、界面组装合成多级结构功能介孔材料示意图。

参考文献

- [1] *Nat. Rev. Mater.*, **2016**, 1: 16023; *Acc. Chem. Res.*, **2019**, 52: 2928; *Nat. Rev. Mater.*, **2019**, 4: 775.
[2] *J. Am. Chem. Soc.*, **2008**, 130: 28; *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2010**, 49: 7987; *J. Am. Chem. Soc.*, **2012**, 134: 1186; *Adv. Mater.*, **2013**, 25: 5129; *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2014**, 53: 5366. *J. Am. Chem. Soc.*, **2014**, 136: 15086; *Nano Lett.*, **2014**, 14: 923; *J. Am. Chem. Soc.*, **2015**, 137: 2803; *Nano Lett.*, **2015**, 15: 2186. *Science Adv.*, **2015**, 1: e1500166; *J. Am. Chem. Soc.*, **2015**, 137: 5903; *ACS Central Science*, **2015**, 1: 400; *Nature Chem.*, **2016**, 8: 171; *Adv. Mater.*, **2017**, 29: 1701652; *J. Am. Chem. Soc.*, **2017**, 139: 517; *J. Am. Chem. Soc.*, **2018**, 140: 4135; *J. Am. Chem. Soc.*, **2018**, 140: 10009; *Chem*, **2018**, 4: 2436; *J. Am. Chem. Soc.*, **2019**, 141: 7073; *Nat. Commun.*, **2019**, 10: 4387; *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2020**, 59: 17676; *J. Am. Chem. Soc.*, **2020**, 142: 20359.



刘忠范

北京大学，教授

个人简介

九三学社中央副主席、北京市委主委；全国政协常委、北京市政协副主席。北京石墨烯研究院院长，北京大学博雅讲席教授，北京大学纳米科学与技术研究中心主任。中国化学会副理事长，中国国际科技促进会副会长。

1983年毕业于长春工业大学，1984年留学日本，1990年获东京大学博士，1991—1993年东京大学和国立分子科学研究所博士后。1993年6月回北京大学任教，同年晋升教授。1993年获国家教委跨世纪优秀人才基金资助，1994年获基金委杰出青年科学基金资助，1999年受聘长江学者奖励计划特聘教授，2011年当选中国科学院院士，2013年首批入选中组部“万人计划”杰出人才，2015年当选发展中国家科学院院士。

主要从事纳米碳材料研究，发表学术论文 630 余篇，申请中国发明专利 130 余项。曾任国家攀登计划（B）、973 计划、纳米重大研究计划项目首席科学家、国家自然科学基金“表界面纳米工程学”创新研究群体学术带头人，2008、2017 获国家自然科学基金二等奖，2012 年获中国化学会-阿克苏诺贝尔化学奖、宝钢优秀教师特等奖，2020 年获北京大学“国华杰出学者奖”。

。

石墨烯材料，制备决定未来

刘忠范

北京石墨烯研究院，北京大学纳米科学与技术研究中心

Email: zfliu@pku.edu.cn

石墨烯是碳材料家族的又一个传奇，也是过去十六年来最具代表性的二维新材料，拥有最高的导电率和导热率、以及轻质高强、柔性、透明等无与伦比的特性。2010年10月成为诺贝尔奖材料以后，石墨烯更成为人们关注的热点，在中国掀起了持续至今的石墨烯热。据最新统计数据，中国从事石墨烯相关业务的企业超过一万六千家，全国各地建立的石墨烯产业园29个、研究院54家、产业创新中心8个以及产业联盟12个，遍布全国21个省市。中国发表的石墨烯相关学术论文占全球34%，发明专利全球占比68%，处于遥遥领先地位。

我们从2008年开始进入石墨烯领域，重点关注石墨烯材料的制备方法和杀手铜级应用探索。过去十二年来，在高质量石墨烯薄膜的化学气相沉积生长方法、批量制备技术与装备、超级石墨烯玻璃、超级石墨烯光纤、以及石墨烯基第三代半导体照明器件等诸多方面取得了一系列突破，成为国际上具有代表性的石墨烯研究团队。

为推进石墨烯材料的产业化进程，我们在北京市政府的支持下，成立了北京石墨烯研究院。目前研究院已经全部建成并投入运行使用，研究团队规模达240余人，各项石墨烯材料关键技术研发工作正在全面展开。

本报告将结合我们的研究实践，阐述石墨烯新材料产业的诸多挑战和未来发展趋势。



成会明

中国科学院金属研究所，研究员

清华大学深圳国际研究生院，教授

个人简介

工学博士、教授，中国科学院院士、发展中国家科学院院士。1984年毕业于湖南大学获学士学位，1987、1992年在中科院金属研究所获硕士和博士学位。现任清华大学深圳国际研究生院材料研究院院长、中科院金属所沈阳材料科学国家研究中心先进炭材料研究部主任。主要从事碳纳米管、石墨烯、其他二维材料、能量转换和储存材料等研究。已获得发明专利 150 多项，多项被转移转化。在国内外学术会议上做特邀报告 190 多次，发表论文 770 余篇，H 因子为 135，是化学和材料两个领域国际高被引科学家。曾获国家自然科学基金二等奖三项、国防科技进步二等奖一项、何梁何利科学与技术进步奖、美国 Charles E. Pettinos 奖、德国 Felcht 奖、美国 ACS Nano 讲座奖等。曾任《Carbon》副主编、《新型炭材料》主编，现任《Energy Storage Materials》创刊主编、《Science China Materials》副主编。

六元环基元无机材料：定义与展望

成会明^{1, 2*}、刘岗¹、陈星秋¹、刘碧录²、任文才¹

1 中国科学院金属研究所，沈阳材料科学国家研究中心，沈阳，110016，中国

2 清华大学，深圳国际研究生院，深圳盖姆石墨稀中心，深圳，中国

Email: cheng@imr.ac.cn; hmcheng@sz.tsinghua.edu.cn

在诸多无机材料中，六元环（Six-membered-ring，简称SMR）是很常见的结构基元。拥有这类结构的材料不仅包含石墨烯（graphene）、六方氮化硼（h-BN）、过渡金属硫族化合物等二维材料，还包括Be、Mg、Ti、MgB₂以及Bi₂Se₃等众多三维材料。尽管这些材料中的一部分已经在其各自领域内成为研究前沿，但纵观这些材料的组成和结构，人们很少关注六元环结构基元在其中扮演的重要角色。本文尝试系统总结并分析这类具有六元环结构基元的材料的共性，并讨论其对材料的一些奇特性质和现象起到的关键作用，例如，线性色线关系（狄拉克电子（声子）色散、超导电性和拓扑性质等）。因此，本文将这类具有六元环的材料定义为六元环基元无机材料，并认为它将有可能成为材料科学与工程领域研究和发展的一个新方向和增长点，值得我们从事材料设计、新物性发现到实际工程应用等诸多方面进行深入、系统和广泛的研究，同时我们预期此类材料在下一代信息技术、可再生能源和太空科技等领域具有广泛的应用前景。



高松

华南理工大学，教授

个人简介

高松，教授，中国科学院院士，发展中国家科学院院士。1985、1991 年先后获北京大学化学系化学学士、无机化学博士学位。1988 年起在北京大学任教，1992 和 1999 年分别晋升副教授和教授。1995 至 1997 年，作为洪堡学者，在德国亚琛工业大学无机化学研究所访问研究。2006-2010 年任北京大学化学与分子工程学院院长，2012-2018 年先后任北京大学教务长、副校长和常务副校长。2018 年 10 月起任华南理工大学校长。

2016 年至今兼任中国科学技术协会第九届全国委员会副主席。现任 *Chem. Sci.*, *Acc. Chem. Res.* 顾问编委, *Inorg. Chem. Front.* 主编, *Nat. Sci. Rev.* 副主编。主要从事磁性分子固体、分子纳米磁体和多功能分子材料研究。2006 年、2011 年和 2019 年分别以第一、第四和第二完成人获得国家自然科学二等奖，2013 年获何梁何利科学与技术进步奖。

Spin Manipulation in Molecules and Solid

Song Gao^{a,b*}, Bing-Wu Wang^b, and Shang-Da Jiang^a

^a Institute of Spin Science and Technology (Spin-X), State Key Laboratory of Luminescent Materials, Guangdong-Hong Kong-Macao Joint Laboratory of Optoelectronic and Magnetic Functional Materials and Devices, School of Chemistry and Chemical Engineering, South China University of Technology, Guangzhou 510640, China. Email: gaosong@scut.edu.cn .

^b Beijing National Laboratory of Molecular Sciences, Beijing Key Laboratory of Magnetolectric Materials and Devices, College of Chemistry and Molecular Engineering, Peking University, Beijing 100871, China. Email: gaosong@pku.edu.cn

Magnetism originates from the spin of the unpaired electrons and their interaction with the unquenched orbital momenta. Thanks to the development of quantum mechanics, the magnetic properties are deeply understood. It has been a cut-edge research field to manipulate the spin behavior of paramagnetic centers from chemical and physical approaches.

For the chemical methods, I will introduce the molecular design and trial for single-ion magnet, which behaves strong axial magnetic anisotropy. The magnetic anisotropy of metallic ions results from the crystal field interaction. We have designed the crystal field of axial symmetry as well as low-coordinated environment to realize chemical spin manipulation on transition metal and rare earth ions^[1-4].

With respect to the physical approaches, we performed a pulsed EPR study incorporated with the electric field on a Ce³⁺ doped Yttrium Aluminum Garnet (YAG) crystal. By employing the electric field pulse with variable lengths and strengths, the quantum phase of the rare-earth ion could be quantitatively manipulated. With the optimized operating condition, the bang-bang control, the quantum Zeno effect and the Deutsch-Jozsa algorithm are demonstrated based on this electric field effect^[5-6].

References

- [1] Meng, Y. S.; Jiang, S. D.; Wang, B. W.; Gao, S., *Acc. Chem. Res.* **2016**, 49: 2381.
- [2] Yao, X. N.; Du, J. Z.; Zhang, Y. Q.; Leng, X. B.; Yan, M. W.; Jiang, S. D.; Wang, Z. X.; Ouyang, Z. W.; Deng, L.; Wang, B. W.; Gao, S., *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, 139: 373.
- [3] Meng, Y. S.; Xu, L.; Xiong, J.; Yuan, Q.; Liu, T.; Wang, B. W.; Gao, S., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, 57: 4673.
- [4] Wang, C.; Sun, R.; Chen, Y. F.; Wang, B. W.; Wang, Z. M.; Gao, S., *CCS Chem.* **2020**, 2: 362.
- [5] Liu, Z.; Fang, Y. H.; Qin, S. X.; Wang, Z. M.; Jiang, S. D.; Gao, S., *Natl. Sci. Rev.* **2020**, 7: 1557.
- [6] Sessoli R., *Natl. Sci. Rev.* 2021, 8:nwaa267.

We are grateful to the NSFC, the National Basic Research Program of China for financial support.



杨金龙

中国科学技术大学，教授

个人简介

杨金龙，男，汉族，物理化学家，中国科学院院士，中国科学技术大学副校长。

1966 年 1 月生于江苏盐城，1981 至 1985 年在南京师范大学学习，获学士学位。1985 至 1991 年在中国科学技术大学学习，分获硕士、博士学位。毕业后留校任教。曾在意大利 Padova 大学、Cagliari 大学、国际理论物理中心、香港科技大学、东京大学、香港大学和新加坡国立大学等单位工作和访问。1996 年起任中国科学技术大学教授。1997 年任中国科学院选键化学重点实验室副主任，2004 年任合肥微尺度物质科学国家研究中心理论与计算科学研究部主任，2009 年任化学与材料科学学院执行院长。2017 年 1 月任中国科学技术大学校长助理，2018 年 4 月起任中国科学技术大学副校长，2019 年 11 月当选为中国科学院院士。

杨金龙教授的研究领域为理论和计算化学，一直致力于发展与应用第一性原理计算方法与模型，研究小分子，原子团簇，固体表面与界面和纳米体系的结构和性质，注重和相关实验研究的配合与合作。已发表学术论文五百余篇，论文被引用二万余次。获得国家杰出青年科学基金资助，受聘教育部“长江学者奖励计划”特聘教授，担任基金委创新群体负责人和国家重点研发计划项目首席科学家。应邀担任 *The Journal of Physical Chemistry*、*WIREs Computational Molecular Science* 和物理化学学报的副主编，*Theoretical Chemistry Accounts*、中国科学和化学物理学报的编委。入选美国物理学会（APS）和中国化学会（CCS）的 Fellow。

自旋电子学分子材料设计与器件发展

杨金龙

中国科学技术大学, 合肥微尺度物质科学国家研究中心

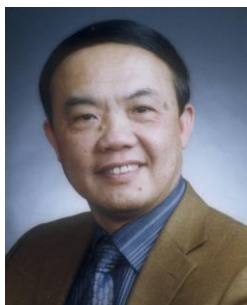
安徽省合肥市金寨路 96 号, 邮编 230026

Email: jlyang@ustc.edu.cn

自旋电子学利用电子自旋进行信息的传递、处理与存储, 比传统微电子学具有运算速度更快, 能耗更低等优势, 被认为是将来发展打破摩尔定律极限的关键信息技术之一。目前自旋电子学应用面临着三大挑战: 自旋的产生和注入, 自旋的长程输运, 以及自旋的调控和探测。这些问题的解决一方面在于设计具有特定性质的自旋电子学材料, 例如双极磁性半导体, 铁磁半金属等, 另一方面在于发展精准的器件构造和测量技术。在本报告中, 我将首先结合自己课题组的研究, 探索如何通过理论计算方法从分子层面对各类功能性的自旋电子学材料进行自下而上的设计^[1-4], 然后对当前实验研究中纳米自旋器件构造和测量技术的发展概况和存在的问题^[5,6]进行交流讨论。

参考文献

- [1] Li, X. X.; Yang, J. L., *Natl. Sci. Rev.* **2016**, 3: 365.
- [2] Li, X. X.; Yang, J. L., *WIREs Comput. Mol. Sci.* **2017**, 7: e1314.
- [3] Li, X. X.; Yang, J. L., *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, 141: 109.
- [4] Li, X. Y.; Li, X. X.; Yang, J. L., *J. Phys. Chem. Lett.* **2020**, 11: 4193.
- [5] Diény, B., et al., *Nat. Electron.* **2020**, 3: 446.
- [6] Coronado, E., *Nat. Rev. Mater.* **2020**, 5: 87.



姚建年

中国科学院化学研究所，研究员

个人简介

姚建年，中国科学院化学研究所，研究员、院士。1953 年生于福建省晋江市。1982 年毕业于福建师范大学化学系，1993 年获日本东京大学工学部博士学位，1995 年到 1999 年任中国科学院感光化学研究所研究员、博士生导师，之后到中国科学院化学研究所工作至今。曾任中国科学院化学研究所副所长、国家自然科学基金委员会副主任，现任中国化学会理事长。长期从事新型光功能材料的基础和应用探索研究，在低维材料、纳米光电子学等方面做出了开创性贡献。2005 年当选中国科学院院士，曾两次获国家自然科学基金二等奖(第一获奖人)，此外还曾获何梁何利基金科学与技术进步奖（2015 年）、中国科学院杰出成就奖（2016 年）。

“新化学，新化工，新产业”分子科学若干问题思考

姚建年

中国科学院化学研究所
北京市海淀区中关村北一街 2 号, 100190
Email: jnyao@iccas.ac.cn

163 年前苯环的发现标志着分子科学的创立。而今分子科学已成为化学学科的核心，国内外以“分子科学”命名的研究中心多达二十余家，国家层面已经布局关于分子科学的研究重点，诸如设立基础研究中心和重点研发计划等。众多研究领域如先进制造、高新材料、生物医药、光电信息都离不开新型功能分子的设计与合成。分子科学在取得巨大成功的同时，仍然有许多基础性课题亟待深入研究，诸如“分子科学重大科学问题在哪里”等急需回答。我认为未来的分子科学应面向“三化”：1) 精准化：具有绿色、原子经济性等特性。2) 功能化：做有用的化学，这样“以功能为导向的合成策略的改变”必然创造新的化工理论、技术和装备，最终催生新的产业。3) 智能化：开发新一代高附加值的新材料、精细化工品等。因此，上述“三新”分子科学若干问题的思考和解答，有助于建立“分子科学（新化学）——分子工程（新化工）——分子水平产业（新产业）”的从基础研究到产业化研究的新范式。



唐本忠

香港科技大学化学系，教授

个人简介

唐本忠教授，1957 年 2 月生，1982 年于华南理工大学获学士学位，1985 年、1988 年先后获日本京都大学硕士、博士学位。曾在多伦多大学化学与药学系从事博士后研究、日本 NEOS 公司中央研究所任高级研究员。1994 年至今历任香港科技大学化学系助理教授、副教授、教授、讲座教授、张鉴泉理学教授，并兼任香港科技大学工学院化学及生物工程学系讲座教授。2006 年受聘为浙江大学“光彪讲座教授”。2009 年当选中国科学院院士。2012 年至今担任华南理工大学-香港科技大学联合实验室主任。2012 年起受聘为华南理工大学双聘院士。2013 年入选英国皇家化学会 Fellow，2015 年担任国家人体组织功能重建工程技术研究中心香港分中心主任，2017 年起受聘为华南理工大学-香港科技大学联合研究院院长。

已发表学术论文 1800 多篇，总引大于 100000 次，h 影响因子为 148。作为项目负责人承担了科研项目 80 余项，其中包括国家杰出青年基金 1 项、国家自然科学基金 4 项、国际合作项目 3 项、国家重点基础研究计划（973 计划）1 项等。在学术会议上作了 400 多场邀请报告，拥有 50 多项专利。现任 ACS 新闻周刊 Noteworthy Chemistry 专栏科学新闻撰稿人，Materials Chemistry Frontier (RSC) 总主编，英国皇家化学学会（RSC）高分子化学丛书主编，Progress in Chemistry 杂志副主编，以及 20 多家国际科学杂志顾问、编委或客座编辑等。

主要从事高分子化学和先进功能材料研究，特别是在聚集诱导发光（Aggregation-Induced Emission, AIE）这一化学和材料前沿领域取得了原创性成果，是 AIE 概念的提出者和研究的引领者。

先后获得多项荣誉及奖励，于 2002 年获得由国家自然科学基金授予的“杰出青年学者”（B 类，海外华裔科学家）称号，2007 年获国家自然科学基金二等奖、Croucher 基金会高级研究员奖、中国化学会王葆仁奖和 Elsevier 杂志社冯新德奖，2012 年获 Science China Chemistry 杰出贡献奖、美国化学学会高分子材料部：科学与工程分会 Macro2012 讲座奖等，2014 年获伊朗国家科技部科学技术研究组织颁发的 Khwarizmi 国际奖和 2015 年获广州市荣誉市民。连续 2014-2019 年当选全球材料和化学领域“高被引科学家”。2016 年，AIE 纳米粒子被《Nature》列为支撑即将来临的纳米光革命的四大纳米材料之一，并是唯一一种由中国科学家原创的新材料；同年，美国 CNBC 电视台以“Year of Cancer”的主题，实况专访唐院士，向全球直播介绍 AIE 荧光探针在识别癌症细胞等领域的应用。荣获 2017 年度何梁何利基金科学与技术进步奖，以第一项目完成人身份凭“聚集诱导发光”项目获得 2017 年度国家自然科学基金一等奖，并获得科技盛典-CCTV2018 年度科技创新人物。

Aggregate: from Molecules, beyond Molecules

Ben Zhong Tang

The Hong Kong University of Science and Technology

Clear water bay, Kowloon, Hong Kong, China, 000000

Email: tangbenz@ust.hk

To understand the Nature, scientists have viewed the world from different angles and built various research frameworks according to the level of inquiry, e.g., macro and micro sciences for studying bulk substances and molecular species, respectively. A philosophical linkage here is the reductionism conjecture, assuming that the former (i.e., a bulk substance) is reducible to the latter (i.e., simpler molecules). The reductionism approach has harvested great success but does not always work well. For example, when molecules are aggregated, the aggregate may show totally different behaviors or properties from its molecular constituents. Some luminogens, for instance, do not emit light upon UV excitation as molecular species, but their aggregates luminescence efficiently. This photophysical effect is known as aggregation-induced emission, which manifests that a new property can emerge at aggregate level. In contrast to reductionism, properties of an aggregate are not necessarily a simple, linear addition of those of its molecular components, but affected in a convoluted fashion by different factors, such as quantity (number of constituents), geometry (size, shape and dimension), morphology (amorphous or crystalline) and interaction (attraction or repulsion). Decipherment of such a complex system calls for the development of aggregology, a new scientific framework for aggregate study. Understanding the operations and interplays of antagonism, synergism, emergentism, multiplicity, etc. in an aggregate system is of great scientific value and has far-reaching technological implications. Aggregology study will generate new laws, rules, models, hypotheses, diagrams, etc. and create new knowledge to boost our comprehension of natural processes and to solve the issues and problems unsolvable by the traditional reductionism approach. The establishment of new fundamental principles and working mechanisms at the aggregate level will enable rational design of novel aggregate systems and judicious development of new advanced materials. It is envisioned that aggregology study will lead to a paradigm shift in research epistemology and methodology and open up new avenues for exploration and innovation at higher levels of structural hierarchy and system complexity.^[1,2]

参考文献

[1] Liu, B.; Tang, B. Z., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, 59: 9788.

[2] Zhao, Z.; Zhang, H.; Lam, J. W. Y.; Tang, B. Z., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, 59: 9888.



江雷

中科院理化所，研究员

个人简介

江雷，中科院理化所研究员，中国科学院院士，第三世界科学院院士，美国工程院外籍院士。江雷院士发现并建立了超浸润界面体系的基本原理并成功将其进行创新应用，取得一系列成就，在世界范围内持续引领该学科的发展，并多次获得重要国际奖励。近期研究为将量子限域超流引入到超浸润体系，并将其应用于能量转换、化学反应和生物信息传递等领域。

仿生超浸润体系——量子限域超流： 能量转化，化学反应与生物信息传递

江雷

中国科学院理化技术研究所
北京市海淀区中关村东路 29 号，100190
Email: jianglei@iccas.ac.cn

生物孔道离子和分子以单链的量子方式快速传输，我们将其定义为“量子限域超流体”。近期研究表明仿生体系也存在量子限域超流现象，例如离子通道和水通道内物质的快速传输。把量子限域超流体引入能源、化学和生物等领域将产生重大影响。在储能和能量转换领域，量子限域超流的概念有助于我们重新认识电池和超级电容器的超快充放电机理，建立制备高性能能源材料的新原理。量子限域超流的化学反应研究将促进界面催化化学理论的发展，实现高反应产率、高选择性和低能耗的集成优化，为化学、化工和合成生物学等领域的未来发展开辟新的道路。量子限域超流的生物信息传递研究将开辟量子离子学的新领域，颠覆对神经科学和脑科学中神经信号传输等问题的理解，拓展生物物理、生物信息学以及生物医学等学科的发展，挑战传统的物质波理论等。

参考文献

- [1] Wen, L.; Zhang, X.; Tian, Y.; Jiang, L., *Sci. China. Mater.* **2018**, 61: 1027.
- [2] Zhang, X.; Liu, H.; Jiang, L., *Adv. Mater.* **2019**, 31: 1804508.
- [3] Liu, S.; Zhang, X.; Jiang, L., *Adv. Mater. Interfaces* **2019**, 6: 1900104.
- [4] Zhang, X.; Jiang, L., *Nano Res.* **2019**, 12: 1219.
- [5] Hao, Y.; Zhang, X.; Jiang, L., *Nanoscale Horiz.* **2019**, 4: 1029.
- [6] Zhang, X.; Antonietti, M.; Jiang, L., *Sci. China Mater.* **2020**, 63: 167.
- [7] Hao, Y.; Pang, S.; Zhang, X.; Jiang, L., *Chem. Sci.* **2020**, 11: 10035.



俞书宏

中国科学技术大学，教授

个人简介

俞书宏，中国科学技术大学化学系教授，国家杰出青年基金获得者，教育部“长江学者奖励计划”长江特聘教授，中国科学院引进国外杰出人才，国家基金委创新研究群体科学基金项目负责人、国家“万人计划”科技领军人才，曾任国家重大科学研究计划项目首席科学家。现任合肥微尺度物质科学国家研究中心纳米材料与化学研究部主任。2019 年当选中国科学院院士。

长期从事无机及复合材料的仿生合成、组装及功能化应用研究。在 *Science*, *Nature Materials*, *Nature Nanotechnology*, *J. Am. Chem. Soc.*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, *Adv. Mater.* 等学术期刊上发表论文 450 余篇。被 SCI 引用 58,191 次，H 因子 134，2014-2020 年连续入选全球高被引作者。以第一完成人两次获国家自然科学二等奖，获安徽省重大科技成就奖、第二届全国创新争先奖章、国际水热-溶剂热联合会 Roy-Somiya 奖章等。担任 *Mater. Chem. Front.* 主编，担任 *Sci. China Mater.*、*EnergyChem*、*eScience*、*Research* 副主编，担任 *Accounts of Chemical Research*、*Advanced Materials*、*Nano Letters*、*Chemistry of Materials*、*ACS Biomaterials Science & Engineering*、*Matter*、*Trends in Chemistry*、*Materials Horizons*、*Nano Research* 等国际顾问编委、执行编委或编委。

仿生材料的设计合成与未来

俞书宏

中国科学技术大学, 合肥微尺度物质科学国家研究中心

合肥市金寨路 96 号, 邮编: 230026

Email: shyu@ustc.edu.cn

人们从自然界获得灵感来设计实用材料和应用系统有着灿烂而悠久的历史。在自然界里, 存在着大量的具有有趣的形貌和结构的生物矿物, 这些矿物通常是由高度组织的有机-无机材料的复合物。诸如珍珠、牡蛎壳、珊瑚、象牙、动物牙齿、细菌中的磁性晶体和人体骨骼, 都是典型的生物组织制造出的生物矿物。运用受生物启发的合成路径来制备多尺度复杂结构功能材料一直是无机化学、纳米科学、材料科学和生命科学等领域的交叉研究前沿的热点。本报告将总结近年来在运用仿生态理念合成一系列仿生无机/有机纳米复合结构材料和宏观尺度组装体材料方面所取得的研究进展, 系统研究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, 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系列多级结构材料的合成方法, 阐释了其生长机理, 发现了无机仿生材料跨尺度合成的新途径, 这类跨尺度合成的仿生材料展现了广阔的应用前景。

参考文献

- [1] Mao, L. B.; Gao, H. L.; Yao, H. B.; Liu, L. Cölfen, H. Liu, G. Chen, S. M. Li, S. K. Yan, Y. X. Liu, Y. Y.; Yu, S. H. *Science* **2016**, 354: 107.
- [2] Yu, S. H.; Cölfen, H.; Tauer, K.; Antonietti, M. *Nat. Mater.* **2005**, 4: 51.
- [3] Yu, Z. L.; Yang, L.; Zhou, L. C.; Ma, Z. Y.; Zhu, Y. B.; Lu, Y. Y.; Qin, B.; Xing, W. Y.; Ma, T.; Li, S. C.; Gao, H. L.; Wu, H. A.; Yu, S. H. *Sci. Adv.* **2018**, 4: aat7223.
- [4] Gao, H. L.; Zhu, Y. B.; Mao, L. B.; Wang, F. C.; Luo, X. S.; Liu, Y. Y.; Lu, Y.; Pan, Z.; Ge, J.; Xu, L.; Shen, W.; Xu, W. H.; Wang, L. J.; Wu, H. A.; Yu, S. H. *Nat. Commun.* **2016**, 7: 12920.
- [5] Ge, J.; Shi, L. A.; Wang, Y. C.; Zhao, H. Y.; Yao, H. B.; Zhu, Y. B.; Zhang, Y.; Zhu, H. W.; Wu, H. A.; Yu, S. H. *Nat. Nanotechnol.* **2017**, 12: 434.
- [6] S. M. Chen, H. L. Gao, Y. B. Zhu, H. B. Yao, L. B. Mao, Q. Y. Song, J. Xia, Z. Pan, Z. He, H. A. Wu and S. H. Yu, *Natl. Sci. Rev.* **2018**, 5: 703.
- [7] Guan, Q. F. Han, Z. M.; Luo, T. T.; Liang, H. W.; Chen, S. M.; Wang, G. S.; Yu, S. H. *Natl. Sci. Rev.* **2019**, 6: 64.
- [8] Guan, Q. F.; Yang, H. B.; Han, Z. M.; Zhou, L. C.; Zhu, Y. B.; Ling, Z. C.; Jiang, H. B.; Wang, P. F.; Ma, T.; Wu, H. A.; Yu, S. H. *Sci. Adv.* **2020**, 6: aaz1114.
- [9] Chen, S. M.; Gao, H. L.; Sun, X. H.; Ma, Z. Y.; Ma, T.; Xia, J.; Zhu, Y. B.; Zhao, R.; Yao, H. B.; Wu, H. A.; Yu, S. H. *Matter* **2019**, 1: 412.
- [10] Song, P.; Qin, H. L.; Gao, H. L.; Cong, H. P.; Yu, S. H. *Nat. Commun.* **2018**, 9: 2974.
- [10] Gao, H. L.; Chen, S. M.; Mao, L. B.; Song, Z. Q.; Yao, H. B.; Cölfen, H.; Luo, X. S.; Zhang, F.; Pan, Z.; Meng, Y. F.; Ni, Y.; Yu, S. H. *Nat. Commun.* **2017**, 8: 287.
- [12] Pan, X. F.; Gao, H. L.; Lu, Y.; Wu, Y. D.; Wang, X. Y.; Pan, Z. Q.; Dong, L.; Song, Y. H.; Cong, H. P.; Yu, S. H. *Nat. Commun.* **2018**, 9: 2786.



张锦

北京大学，教授

个人简介

北京大学博雅讲席教授、国家杰出青年基金获得者、教育部长江学者特聘教授、英国皇家化学学会会士、中组部“万人计划”创新领军人才入选者、中国化学会纳米化学专业委员会副主任和科技部重点研发计划项目负责人。1997 年获兰州大学化学系博士学位。2000 年 5 月到北京大学化学与分子工程学院工作，2006 年晋升为教授，2019 年当选为中国科学院院士。张锦长期从事纳米碳材料的物理化学研究工作，在 *Nature* 和 *Nat. Mater.* 等刊物发表论文 300 余篇，授权专利 30 余项。荣获国家自然科学奖二等奖（两项）、全国优秀博士学位论文指导教师、中国化学会青年化学奖、教育部“新世纪优秀人才资助计划”等和北京大学“十佳”导师等奖励。现任北京大学材料科学与工程学院院长、北京石墨烯研究院副院长、北京市低维碳材料工程技术研究中心主任和国家纳米科学中心副主任（兼）。兼任《*Carbon*》和《物理化学学报》等杂志的编委以及《*Adv. Funct. Mater.*》等杂志的顾问编委。

石墨炔：一种新的碳同素异形体

张锦

北京大学，化学与分子工程学院和材料科学与工程学院，北京 100871

Email: jinzhang@pku.edu.cn

石墨炔是一种新型碳的同素异形体，是由sp和sp²两种杂化形式的碳原子组成的二维层状材料。其独特的纳米级孔隙、二维层状共轭骨架结构及半导体性质等特性，使之在电化学、光催化、非线性光学、电子学等诸多领域有非常广阔的应用前景。制备决定未来，如何获得大面积高结晶度的单层/少层石墨炔仍是目前该领域中最具挑战的问题之一。本报告将主要介绍本课题组在石墨炔结构控制制备方面的主要进展。提出了“单体”限域、“催化剂”限域和“界面”限域等几种方法，实现了大面积三层ABC堆垛石墨炔薄膜的控制制备，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，也探索了其相关应用。

参考文献

- [1] Zhang, J. et. al., *Chem* **2021**, In Press.
- [2] Yin, C.; Li, J. Q.; Li, T. R.; Yu, Y.; Kong, Y.; Gao, P.; Peng, H. L.; Tong, L.M.; Zhang, J., *Adv. Funct. Mater.* **2020**, 30: 2001396
- [3] Zhou, J. Y.; Li, J. Q.; Liu, Z. F.; Zhang, J., *Adv. Mater.* **2019**, 31: 1803758.
- [4] Gao, X.; Zhu, Y. H.; Yi, D.; Zhou, J. Y.; Zhang, S. S.; Yin, C.; Ding, F.; Zhang, S. Q.; Yi, X. H.; Wang, J. Z.; Tong, L. M.; Han, Y.; Liu, Z. F.; Zhang, J., *Sci. Adv.* **2018**, 4: eaat6378.

张东辉



中国科学院大连化学物理研究所，研究员

个人简介

张东辉，1967年1月生于浙江省。中国科学院大连化学物理研究所研究员，分子反应动力学国家重点实验室主任。1989年毕业于复旦大学物理系，1994年于纽约大学获博士学位。2017年当选中国科学院院士。

主要从事化学反应动力学理论研究。发展了多原子反应量子含时波包理论方法，建立了高精度势能面构建方案，将反应动力学的精确理论研究从三原子体系拓展到多原子体系。其量子动力学研究不仅解释实验，并在一定程度实现了预测和检验实验。通过与实验的密切结合，提高了人们对化学反应的认识，推动了反应动力学研究的发展，也使我国在该领域处于国际领先水平。

已发表研究论文 250 余篇，以唯一或共同通讯作者发表了 9 篇 **Science**。曾获国家自然科学二等奖（排名第一），辽宁省自然科学一等奖 2 项，国家自然科学基金杰出青年基金获得者，新加坡杰出青年科学家奖，新加坡国家科学奖，国家自然科学基金海外及港澳青年学者合作研究基金等奖项奖励。

面向分子科学的机器学习方法发展

张东辉

中国科学院大连化学物理研究所
辽宁省大连市中山路 457 号 116023
Email: zhangdh@dicp.ac.cn

利用大数据和机器学习技术,解决化学及相关领域的复杂问题目前已成为化学研究的热点与前沿。从2016年开始,仅在Nature、Science及其子刊就陆续发表了多篇关于人工智能(大数据、机器学习)在化学及相关领域应用的研究论文,文章总体数量呈现出快速上升的趋势。这些最新的研究成果涵盖化学、药物、能源、材料、催化等领域。本次报告将首先回顾最近几年机器学习算法,在一些重要分子科学研究中的成功应用,如预测反应产率^[1]、寻找新的有机合成路径^[2]、计算体系能量^[3]、蛋白质配体相互作用^[4]、分子体系高精度势能面的构造^[5]等。对于机器学习算法中普遍存在的不足,报告将着重强调面向分子科学的机器学习算法需要解决的关键问题,包括精确数据集的生成、具有物理意义描述子的选取以及面向分子科学的针对性算法发展。具体来说,分子科学问题常会面临巨大的相空间,数据集难以全面覆盖,严重限制了机器学习模型的泛化能力。针对各种化学性质,高效的高精度理论计算可作为一个普适的策略,与常规实验测量手段相互补充,建立大数据库,从而为机器学习的有效应用奠定基础。优秀的机器学习模型也十分依赖于描述子的选择。如何突破人工经验,有效地选择有物理意义的描述子是机器学习在分子科学应用中的重大挑战。最后报告将以课题组最近在凝聚相水分子力场发展为例,强调应该针对具体分子科学的物理内涵应用和发展相应的机器学习算法,唯此才能突破单纯依靠经验的拟合局限,摆脱分子构型空间巨大的困境,拓展机器学习的精度和可靠度。可以预言,面向分子科学的机器学习算法,在不远的将来,将得到更大的发展和更好的应用。

参考文献

- [1] Ahneman, D. T.; Estrada, J. G.; Lin, S.; Dreher, S. D.; Doyle, A. G., *Science* **2018**, 360: 186.
- [2] Klucznik, T. *et al.*, *Chem* **2018**, 4: 522.
- [3] Brockherde, F.; Vogt, L.; Li, L.; Tuckerman, M. E.; Burke, K.; Müller, K.-R., *Nat. Commun.* **2017**, 8: 872.
- [4] Wang, C.; Zhang, Y., *J. Comput. Chem.* **2017**, 38: 16.
- [5] Chen, R.; Shao, K.; Fu, B.; Zhang, D. H., *J. Chem. Phys.* **2020**, 152: 204307.



江桂斌

中国科学院生态环境研究中心，研究员

个人简介

中国科学院院士、发展中国家科学院院士。中国科学院生态环境研究中心主任，中国科学院大学资环学院院长，环境化学与生态毒理学国家重点实验室主任，中国分析测试协会理事长，美国化学会 ES&T 杂志副主编。2015-2016 任 Elsevier 杂志 NanoImpact 共同创刊主编。曾任国家 973 顾问组成员，国家纳米重大研究计划专家组成员。现为国家环境咨询委员会委员，国家食品安全风险评估专家委员会委员，国务院食品安全专家委员会成员等。

研究领域涉及化学污染物形态、毒理与健康等。分别参加过我国南极和北极科学考察。曾负责和完成我国环境内分泌干扰物筛选与控制的第一期和第二期 863 项目，负责和完成两期国家 POPs 973 项目，负责和完成我国 POPs 控制第一个国家支撑项目，负责和完成 2 期国家基金委创新群体项目，负责和完成国家基金委重大基金项目“典型持久性有机污染物的环境过程与毒理效应”。目前担任中国科学院战略先导科技专项“环境污染的健康效应”首席科学家和基金委重大研究计划“大气细颗粒污染的毒理与健康效应”专家组组长。

在国外 SCI 收录杂志发表论文 600 余篇，出版中英文专著 10 部。应邀在国内外重要学术会议和著名大学作大会报告或特邀报告 500 余次。先后获得国家杰出青年科学基金、中科院青年科学家奖、长江学者成就奖、安捷伦全球“思想领袖奖”和中国科学院杰出成就奖；两次获得国家自然科学二等奖。



谭蔚泓

中国科学院基础医学与肿瘤研究所，所长

中国科学院附属肿瘤医院，院长

湖南大学，教授

上海交通大学分子医学研究院，院长

个人简介

谭蔚泓，中国科学院院士、发展中国家科学院院士。美国密西根大学 1992 年物理化学博士，中国科学院大学硕士，湖南师范大学学士。现任湖南大学教授，中国科学院基础医学与肿瘤研究所所长，中国科学院大学附属肿瘤医院教授。兼任上海交通大学分子医学研究院院长。曾任美国佛罗里达大学化学系和医学院杰出教授和冠名主任教授 25 年。现任教育部科技委员会委员，中国化学会副理事长，湖南省院士咨询与交流促进会会长等。回国工作以来，先后成立湖南大学生物医学工程中心，生物学院，分子科学与生物医学实验室；在上海交通大学成立分子医学研究院和分子医学研究中心等，开展相关研发工作，推动分子医学的发展。担任美国化学会 *Journal of American Chemical Society*、*CCS Chemistry* 杂志副主编，*ACS Nano*、国家科学评论等国内外杂志编委。

谭蔚泓教授长期致力于生物分析化学，化学生物学和分子医学的前沿研究与临床应用。他提出了系列核酸化学和生物医学应用的新原理和新方法：他首次提出了核酸适体-细胞筛选方法，为核酸适体的生物医学应用奠定了重要的科学和技术基础。他首次制备了核酸适体-药物偶联物，为靶向药物的研发打开了新的途径。他开发了一系列核酸和蛋白的检测技术，利用核酸工程实现了这些疾病标志物的微量临床检测。针对这次新型冠状病毒感染，他带领团队开发了现场快速检测技术与试剂。谭蔚泓教授在 *Science* 等学术刊物上发表学术论文 700 余篇，引用逾 73000 次，H-index 146。2014-2020 连续七年入选全球高被引研究人员名单。研究成果获 2014 年国家自然科学二等奖，2018 年何梁何利基金科学与技术进步奖，2018 年美国化学会“光谱化学分析奖”，2019 年美国 PITTCON 分析化学成就奖、2019 年 Ralph N. Adams 生物分析化学成就奖。2005 年当选美国 AAAS Fellow，2015 年当选中国科学院院士，2016 年当选发展中国家科学院院士。

分子医学助力健康中国

谭蔚泓

中国科学院肿瘤与基础医学研究所
中国科学院大学附属肿瘤医院
湖南大学、上海交通大学分子医学研究
Email: tan@hnu.edu.cn

“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，精准诊断与靶向治疗是当代医学发展的必然。发展分子医学将极大地推动健康中国国家战略的实施。分子医学在分子水平上揭示疾病发生发展的过程和机理，在分子水平上早期和准确诊断疾病，在分子水平上精准治疗疾病和指导康复，并在分子水平上预防预测疾病，达到“圣人不治已病治未病”的愿景。分子医学需要在分子水平上进行分子识别，但此类分子工具在临床应用和研究中一直非常匮乏。最近，科学家们发现了一种新型的分子探针，称之为核酸适体。它是由DNA/RNA单链构成的，可特异性地识别与疾病紧密相关的疾病标志物的核酸分子。基于此，我们首创了以完整细胞为筛选靶标的核酸适体细胞筛选方法，并得到了300多个针对多种疾病的核酸适体探针。本报告将介绍我们在该领域的最新研究进展，讨论核酸适体在诊断、治疗、机理研究，制药，预防等领域的广阔应用前景。

参考文献

- [1] Zhang, P. H.[#]; Gao, D.[#]; An, K.[#]; Shen, Q.; Wang, C.; Zhang, Y. C.; Pan, X. S.; Chen, X. G.; Lyv, Y. F.; Cui, C.; Liang, T.; Duan, X. M.; Liu, J.; Yang, T. L.; Hu, X. X.; Zhu, J. J.; Xu, F.; Tan, W. H., *Nature Chemistry*, **2020**, 381.
- [2] Cui, C.; Liu, Y. L.; Tan, W. H., *Journal of the American Chemical Society*, **2020**, 142: 14234.
- [3] Li, X. W.; Yang, Y.; Zhao, H. Z.; Zhu, T.; Yang, Z. H.; Xu, H. Y.; Fu, Y. Q.; Lin, F.; Pan, X. S.; Li, L.; Cui, C.; Hong, M.; Yang, L.; Wang, K. K.; Tan, W. H., *Journal of the American Chemical Society*, **2020**, 142: 3862.



樊春海

上海交通大学，教授

个人简介

樊春海，上海交通大学王宽诚讲席教授，中国科学院院士。南京大学学士、博士，加州大学圣芭芭拉分校博士后。2004-2018 年任中国科学院上海应用物理研究所研究员，中国科学院特聘研究员。2018 年起任上海交通大学化学化工学院教授，现任转化医学研究院（国家转化医学科学中心）执行院长。

入选美国科学促进会(AAAS)、国际电化学学会(ISE)、美国医学和生物工程院(AIMBE)和英国皇家化学会(RSC)会士，兼任 ACS Applied Materials & Interfaces 副主编，ChemPlusChem 编委会共同主席。已在 Nature 等杂志发表论文 500 余篇，引用>4 万次，H 因子>100，近七年连续入选“全球高被引科学家”。

框架核酸：从分子创造到智能制造

樊春海

上海交通大学转化医学研究院，化学化工学院

Email: fanchunhai@sjtu.edu.cn

分子机器是指分子构成，并在外来能量驱动下产生机械运动而行使特定功能的纳米机器。在生物体内，核酸、蛋白质等生物大分子通过氢键、疏水力等弱相互作用自组装成天然的分子机器，行使了各种生物学功能。而如何通过化学或生物分子的设计、合成、组装来模仿天然分子机器，创制出纳米尺寸、动态驱动、智能识别的人工分子机器，则是分子工程领域的重大科学问题。2016年诺贝尔化学奖授予了分子机器领域的三位先驱：索维奇，司徒塔特和费林加。然而，当前人工分子机器所达到的精巧和多样化程度远不能与天然分子机器相比拟。例如，生物传感是利用生物特异性识别过程来实现生物检测的分析方法。而人工的生物传感器在识别能力、灵敏度、特异性等各方面都远远逊色于生物体内的天然传感器（“分子机器”）。这就促使我们继续向自然学习，用“多元、协同”的理念来制造智能分子机器，或纳米机器人。

DNA纳米技术的蓬勃发展则为制造这样的分子机器提供了新的可能。DNA纳米技术旨在利用DNA分子卓越的自组装和识别能力，将其作为一种纳米材料实现精确的自底向上(bottom-up)的纳米构筑，从而设计各种功能纳米结构。利用自然界赋予DNA分子的自我识别和精确组装能力可以从底向上组装出各种均一性好、结构精巧和功能可设计的框架核酸(Framework Nucleic Acids)结构。相对于通常的无机纳米结构而言，这些框架核酸不仅制备简单、结构可控，而且易于实现精确的生物功能化。尤其是将框架核酸与无机纳米粒子结合起来，可以进一步拓宽分子机器的功能多样性。本报告中将结合本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。

参考文献

- [1] Qu, X.; Wang, S.; Ge, Z.; Wang, J.; Yao, G.; Li, J.; Zuo, X.; Shi, J.; Song, S.; Wang, L.; Li, L.; Pei, H.; Fan, C., *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, 139: 10176.
- [2] Li, J.; Green, A. A.; Yan, H.; Fan, C., *Nature Chem.* **2017**, 9: 1056.
- [3] Liu, X.; Zhang, F.; Jing, X.; Pan, M.; Li, W.; Zhu, B.; Li, J.; Chen, H.; Wang, L.; Lin, J.; Liu, Y.; Zhao, D.; Yan, H.; Fan, C., *Nature* **2018**, 559: 593.
- [4] Chao, J.; Wang, J.; Wang, F.; Ouyang, X.; Kopperger, E.; Liu, H.; Li, Q.; Shi, J.; Wang, L.; Hu, J.; Wang, L.; Huang, W.; Simmel, F. C.; Fan, C., *Nature Mater.* **2019**, 18: 273.
- [5] Yao, G.; Li, J.; Li, Q.; Chen, X.; Liu, X.; Wang, F.; Qu, Z.; Ge, Z.; Narayanan, R. P.; Williams, D.; Pei, H.; Zuo, X.; Wang, L.; Yan, H.; Feringa, B. L.; Fan, C., *Nature Mater.* **2020**, 19: 781.



赵宇亮

国家纳米科学中心，研究员

个人简介

1985 年毕业于四川大学化学系，1989 年到日本原子力研究所进修，1996 年和 1999 年在日本东京都立大学获硕士博士学位后，在日本理化学研究所从事新元素探索的研究工作。2001 年回国，从核物理领域转入纳米科学领域，率先提出纳米生物安全性问题并创建该领域第一个实验室。他解决了复杂生物体系中纳米颗粒超微量分析、内源外源物质区分等难题，所建立的部分分析方法已被 ISO 颁布为国际标准方法；率先揭示了无机和碳纳米材料的体内生物分布图谱、及其生命体内的化学或生物学活性的重要规律，被美国、法国、英国、瑞典、瑞士、韩国、意大利等国际同行在论文中评价为“first”；2004 年开始在国际上率先将纳米安全性的新知识用于肿瘤纳米药物及其体内输运过程的化学生物学原理的研究。回国以后的研究工作已被国际上广泛引用（约 5 万次）。曾两次获国家自然科学奖二等奖，TWAS 化学奖，中国科学院杰出科技成就奖，何梁何利科学与技术进步奖，中国侨界贡献奖，中国毒理学杰出贡献奖，全国优秀科技工作者等。2015 年创建了中国药学会“纳米药物”专业委员会，2011 年创建了中国毒理学会“纳米毒理学”专业委员会。大力推动了纳米生物学和纳米药物等学科交叉前沿领域在我国的起步和发展。

此外，在国外期间与日本同事共同发现 113 号新元素 Nh，成为元素周期表中亚洲国家发现的唯一元素。

微环境靶向与响应的药物智能输运纳米机器

赵宇亮

国家纳米科学中心, 北京市中关村北一条 11 号, 邮编 100190

Email: zhaoyl@nanoctr.cn

药物输运已是药物研发的世界前沿, 例如, 美国和欧洲的 mRNA 新冠疫苗使用的载药系统, 就是脂质体纳米颗粒。药物输运的纳米载药系统不仅能够显著改善传统抗药物的溶解度和循环时间, 而且在介导药物在病灶部位富集、降低药物全身毒性以及增强患者的耐受性等方面, 显示出独特的优势和巨大的潜力。目前已有近 20 种纳米载药系统被批准用于肿瘤临床治疗和新冠疫苗。近年来, 如何突破药物递送技术的瓶颈、发展持续性的治疗策略? 面对肿瘤或新冠肺炎等复杂疾病的异质性或动态进展, 如何实现体内药物输运的智能响应和高效调控?

在对纳米颗粒生物效应与安全性进行近 20 年研究的基础上, 我们在国际上率先提出并发展了“微环境靶向与响应的智能纳米药物输运”这一新的研究方向, 针对肿瘤微环境中的细胞成分以及非细胞成分, 基于不同理化性质的小分子化合物、功能性核酸、抗体和活性蛋白质等不同药物类型, 发展了肿瘤微环境重塑、肿瘤血管阻断和肿瘤相关血小板特异性清除等一系列创新性的药物靶向递送系统。在第一代脂质体纳米药物和第二代无机纳米颗粒、聚合物纳米凝胶和白蛋白纳米药物等病灶控释药物的基础上, 我们提出了第三代生物基组装单元精准构筑的智能纳米药物机器, 作为纳米药物递送系统的新概念。我们研究智能化药物递送纳米机器的组装方法, 如何突破多种生理屏障, 利用配体识别、pH、电荷等微环境响应机制, 通过体内或体外操控, 实现药物的靶向递送和可控释放。以 DNA 纳米机器为例, 首次在活体动物中实现了纳米机器在体内的凝血酶精准递送, 对乳腺癌、原发性肺癌等多种实体瘤进行治疗。最近, 我们利用 DNA 纳米机器联合输运抗原/疫苗佐剂, 基于多靶点的免疫激活效应, 在动物体内取得了良好的抗肿瘤免疫治疗效果。智能纳米载药系统在肿瘤靶向输运方面显示出独特优势, 结合纳米材料独特的光、磁、电、热等性能, 期望实现对体内药物输运的精准操控。

参考文献

- [1] Li, S.; Zhang, Y.; Wang, J.; Zhao, Y.; Ji, T.; Zhao, X.; Ding, Y.; Zhao, X.; Zhao, R.; Li, F.; Yang, X.; Liu, S.; Liu, Z.; Lai, J.; Whittaker, A. K.; Anderson, G. J.; Wei, J.; Nie, G., *Nature Biomed. Eng.* **2017**, 1: 680.
- [2] Li, S.; Jiang, Q.; Liu, S.; Zhang, Y.; Tian, Y.; Song, C.; Wang, J.; Zou, Y.; Anderson, G. J.; Han, J. Y.; Chang, Y.; Liu, Y.; Zhang, C.; Chen, L.; Zhou, G.; Nie, G.; Yan, H.; Ding, B.; Zhao, Y. L., *Nature Biotech.* **2018**, 36: 258.
- [3] Han, X. X.; Li, Y.; Xu, Y.; Zhao, X.; Zhang, Y.; Yang, X.; Wang, Y.; Zhao, R. F.; Anderson, G. J.; Zhao, Y. L.; Nie, G. J., *Nature Commun.*, **2018**, 9: 3390.
- [4] Wang, J.; Li, Y. Y.; Nie, G. J.; Zhao, Y. L., *National Science Review* **2019**, 6: 1107.
- [5] Lu, X. F.; Zhu, Y.; Bai, R.; Wu, Z. S.; Qian W. C.; Yang, L. Y.; Cai, R.; Yan, H.; Li, T.; Pandey, V.; Liu, Y.; Lobie, P. E.; Chen, C. Y.; Zhu, T., *Nature Nanotech.* **2019**, 14: 719.
- [6] Liu, S.; Jiang, Q.; Zhao, X.; Zhao, R.; Wang, Y.; Wang, Y.; Liu, J.; Shang, Y.; Zhao, S.; Wu, T.; Zhang, Y.; Nie, G.; Ding B., *Nature Materials* **2020**, 20: 421.
- [7] Li, S.; Zhang, Y.; Ho, S. H.; Li, B.; Wang, M.; Deng, X.; Yang, N.; Liu, G.; Lu, Z.; Xu, J.; Shi, Q.; Han, J. Y.; Zhang, L.; Wu, Y.; Zhao, Y.; Nie, G., *Nature Biomed. Eng.* **2020**, 4: 732.
- [8] Zhang, Y.; Han, X.; Nie, G., *Nature Protocol* **2021**, 16:405.
- [9] Cao, M. J.; Cai, R.; Zhao, L. N.; Guo, M. Y.; Wang, L. M.; Wang, Y. C.; Zhang, L. L.; Wang, X. F.; Yao, H. D.; Xie, C. Y.; Cong, Y. L.; Guan, Y.; Tao, X. Y.; Wang, Y. L.; Xu, S. X.; Liu, Y.; Zhao, Y. L.; Chen, C. Y. *Nature Nanotech.* **2021**, 16, in press

面向 2035 的分子科学前沿论坛

主持嘉宾简介

2021 年 4 月
中国科学院学术会堂



万立骏

中国科学院化学研究所，研究员

个人简介

中国科学院化学研究所研究员、中国科学院院士、发展中国家科学院院士、分子纳米结构与纳米技术重点实验室主任、中华全国归国华侨联合会第十届主席、党组书记。主要从事扫描探针显微学、电化学和纳米材料科学的研究。发展了化学环境下的扫描探针技术，在表面分子吸附和组装规律、纳米图案化、表面手性研究等方面取得系列成果。致力于能源转化和存储器件的表界面化学、电极材料制备方法和材料结构性能的研究，设计制备了系列高性能纳米金属材料、金属氧化物材料和锂离子电池正负极材料等，并应用于能源和水处理领域。在包括 *Nature Comm.*, *Acc. Chem. Res.*, *PNAS*, *Angew. Chem.*, *JACS* 等学术刊物发表学术论文 300 余篇，科学出版社出版专著“电化学扫描隧道显微术及其应用”。担任 *JACS* 副主编、中国科学-化学主编和 *Acc. Chem. Res.* 等期刊编委。曾获发展中国家科学院化学奖，国家自然科学基金二等奖，北京市科学技术一等奖等奖项。



李亚栋

清华大学，教授

个人简介

清华大学化学系教授、清华大学校学术委员会副主任、中国科学院院士、发展中国家科学院院士。主要从事无机功能纳米材料（无机纳米线、纳米带、纳米管、单分散纳米晶）、贵金属（合金与金属间化合物）纳米晶、团簇、单原子位点催化材料的合成、结构及其性能研究。近年来在单原子位点催化材料的合成、结构及其催化性能研究方面又取得了重要进展，于 2019 年 7 月在北京建立了全球第一家单原子催化科技公司——北京单原子催化科技有限公司，致力于单原子催化技术的研发与应用推广。在国际学术期刊发表论文 300 余篇，包括 *Nature*, *Science*, *Nature Nanotech.*, *Nature Cat.*, *Nature Chem.*, *Nature Comm.*, *PNAS*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, *J. Am. Chem. Soc.*, *Phys. Rev. Lett.*, *Adv. Mater.*, *Nano Lett.*, *Acc. Chem. Res.*, *Chem. Soc. Rev.*, *Chem. Rev.* 等，论文被 SCI 他引 5 万余次。获授权中国发明专利 20 余项，曾获 2001 年、2008 年国家自然科学二等奖。



李景虹

清华大学，教授

个人简介

中国科学院院士、第十二、十三届全国政协委员。清华大学化学系教授，系学术委员会主任，清华大学分析中心主任。1991 年获中国科学技术大学学士学位，1996 年获中科院长春应用化学研究所博士学位。近年来致力于分析化学、化学生物学、纳米电化学及环境能源电化学领域的教学科研工作。以通讯作者在 *Nature Nanotech.*, *Nature Protocol*, *J. Am. Chem. Soc.*, *Angew. Chem.* 等学术刊物上发表 SCI 论文近 400 篇，论文被引用 >50,000 次，H-index 115。2015-2020 年连续入选科睿唯安（汤森路透）全球（化学、材料）高被引科学家。以第一完成人获国家自然科学奖二等奖、教育部自然科学奖一等奖。任 *Chem. Soc. Rev.*, *ACS Sensors*, *Biosensors Bioelectronics*, *Small Methods* 等期刊编委。



张洪杰

清华大学，教授

个人简介

清华大学化学系教授、博士生导师、中国科学院院士、发展中国家科学院院士。担任国家基金委重大项目负责人、中国稀土行业协会理事长。历任中科院长春分院院长、中科院长春应化所党委书记、中科院稀土化学与物理重点实验室主任、稀土资源利用国家重点实验室主任、中科院长春应用化学研究所主任。长期致力于稀土功能材料的研究，以材料的结构与功能关系为研究重点，着重解决影响学科发展的关键科学和技术问题，发展了系列材料制备的新方法和技术。他将基础、高技术及应用研究有机结合，研制出的稀土新材料已成功应用于稀土交流 LED 照明、稀土环保着色剂、航天航空高超风洞测温、稀土镁合金汽车零部件、国防军工兵器等领域，满足了国家的战略需求。发表学术论文 500 多篇，他引 36000 多次，获授权发明专利 72 项。撰写专著 1 部，编著 3 部。曾获国家杰出青年基金，入选中科院百人计划、国家基金委创新群体学术带头人，担任国家 973 项目首席科学家。曾获国家自然科学二等奖、中科院杰出科技成就奖、吉林省特殊贡献奖、吉林省科学技术发明一等奖、吉林省科技进步一等奖、吉林省学术成果特别奖、香港“求是”基金会杰出青年学者奖、澳大利亚金袋鼠世界创新奖等奖项。



陈小明

中山大学，教授

个人简介

中山大学教授、博士生导师、中国科学院院士、生物无机与合成化学教育部重点实验室（中山大学）主任。曾在美国加州大学圣迭戈分校作访问学者。1983 年于中山大学化学系获学士学位，1986 年于中山大学化学系获硕士学位，1992 年于香港中文大学化学系获博士学位后回到中山大学工作。1993 年晋升副教授，1994 年晋升教授，2009 年当选中国科学院院士。曾担任中山大学化学与化学工程学院院长。主要从事配合物超分子化学与晶体工程领域的研究。发展了配位聚合物的可控组装和结构调控方法，开展了动态变化和多功能等微孔配位聚合物的结构与功能关系研究；发展了溶剂热原位金属/配体反应方法，发现了 10 多种金属诱导有机反应，将有关的原位反应方法应用于微孔结构配位聚合物的可控组装，促进了“溶剂热原位金属/配体反应”在杂环有机化合物合成方面的应用。



赵进才

中国科学院化学研究所，研究员

个人简介

中国科学院院士、中国科学院化学研究所研究员、博士生导师。1982 年获得内蒙古大学化学系学士学位；1994 年日本 Meisei 大学理学院化学系博士毕业；1995 年 4 月归国；1997 年获得国家杰出青年基金资助；2011 年当选中国科学院院士；2014 年当选为发展中国家科学院（TWAS）院士；2018 当选欧洲科学院（EurASc）外籍院士。主要从事低浓度高毒性有机污染物光催化降解及机理研究，在 PNAS、J. Am. Chem. Soc.、Angew. Chem. Int. Ed. 等国际 SCI 刊物上发表论文 300 余篇，SCI 他引 28000 次以上。授权国家发明专利 40 余项。获国家自然科学二等奖（第一完成人）、日本光化学协会“亚洲及太平洋地区光化学家讲座奖”等奖项。任国家生态环境保护专家委员会委员、基金委化学部专家咨询委员会委员。担任《化学进展》、《环境科学》主编，任 Energy Environ. Sci. 等多个学术刊物的编委或顾问编委、英国皇家化学会 Fellow 等。

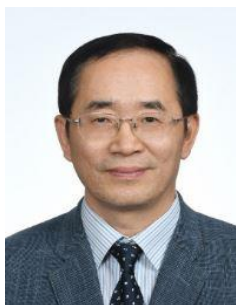


洪茂椿

中国科学院福建物质结构研究所，研究员

个人简介

中国科学院院士，发展中国家科学院院士。1981 年获中国科学院福建物质结构研究所硕士学位。1985 年-1987 年在美国密执安大学化学系和伊利诺依大学化学系做访问学者，1992 年-1993 年在英国纽卡斯尔大学化学系做访问学者，1996-1998 年曾两度在日本名古屋大学化学系做 JSPS 访问教授并获得论文博士学位。主要从事新材料与器件、无机功能材料、纳米材料的制备、结构与性能的关系和应用研究。先后担任中科院福建物质结构研究所所长、党委书记、中科院海西研究院筹建组组长、国家自然科学基金重大研究计划“功能导向晶态材料结构设计和可控制备”专家组组长。现任中科院福建物质结构研究所学术委员会主任、国家“重点新材料研发及应用”重大项目总体专家组成员、新型显示及其关键材料专家组组长。2002 年获国家自然科学奖二等奖，2011 年获国家科技进步奖二等奖，2010 年获何梁何利科技进步奖化学奖，2006 年获全国杰出专业技术人才奖，2010 年被授予全国先进工作者称号。发表论文四百余篇，申请国际专利 6 项，国内专利 38 项，已获授权 28 项。



席振峰

北京大学，教授

个人简介

北京大学化学学院特聘教授、博士生导师、中国科学院院士。主要从事的科研方向是利用金属有机化合物研究高选择性有机合成新反应、新方法。提出并坚持“协同效应”以及“基于活性中间体和机理研究的合成化学”科学研究理念，长期致力于发现金属促进或催化的碳-氢键、碳-碳键以及碳-杂原子键的选择性切断与生成的方法学与规律，实现在合成化学中有用的新反应、新方法、新试剂，探索新一代物质转化的途径。曾在 *J. Am. Chem. Soc.* 等著名杂志上发表过 180 余篇论文，担任 *Org. Lett.* 副主编，2015 年当选中国科学院院士。



彭孝军

中国科学院大连化学物理研究所，研究员

个人简介

大连理工大学教授、博士生导师、中国科学院院士。长期从事精细化工领域研究：从基础理论研究出发，形成了近红外比率荧光菁染料探针分子平台，为解决复杂体系荧光信息的定量获取提供了新方法，被国内外广泛应用；构建的耐候性喷墨打印染料产品体系，大规模产业化，为我国成为彩色喷墨打印耗材大国，做出了重要贡献；创制的荧光探针在血液细胞分析系统的产业化应用，促进了我国在血液临床分析装备领域从空白到国际一流的跨越。发表论文 350 余篇，授权国内外发明专利 50 余项，参与起草国家标准 20 余项、ISO 国际标准 5 项。作为第一完成人，获 2013 年国家自然科学二等奖和 2006 年国家技术发明二等奖，以及 4 项省部级一等奖/特等奖。2001 年获国务院政府特殊津贴，2007 年获国家杰出青年科学基金，入选教育部“长江学者奖励计划”特聘教授。2008 年被评为全国化工优秀科技工作者，2016 年被评为全国优秀科技工作者，2017 年当选中国科学院院士，2020 年获全国创新争先奖。

