

砥砺奋进的5年： 中国化学在转型中焕发新活力 ——基金委化学部五年发展成果扫描

■本报记者 陈欢欢

从明年开始,申请国家自然科学基金委化学科学部(以下简称“化学部”)项目的科研人员会发现“出大事”了——化学部延续了30年的七大传统学科居然变成了八个,而且相应的学科申请代码也进行了全面的梳理和调整。

化学部主任、中科院院士张希告诉《中国科学报》记者,在基金委领导支持下,化学部结合国际国内化学发展的现状和趋势,适时作出了改革。项目申请代码调整后,期望不仅有利于传统研究方向的进一步发展,也有利于促进前沿交叉新方向的诞生和发展。

支撑化学部大胆改革的动力来源于过去5年来,我国化学科学从量变向质变大步流星的跨越式发展。

中国化学走到了转型的当口。

美丽的化学

人们总是一厢情愿地希望手机越来越轻薄,续航能力却越来越强。诸如此类的“悖论”还有很多:希望服装材质既舒适透气,又易清洁;能源既高效富足,又不污染环境;支撑了人类社会过去一个世纪稳定繁荣的化肥和农药,人们又希望它们绿色健康……

解决这些难题的重任落在了化学家身上,其中很多看似不可能的任务已经被化学家破解,化学这门古老的科学在现代社会历久弥坚、充满活力。

“化学是研究化学反应和物质转化的一门学科,是创造新分子和构建新物质的一种手段,并和其他学科高度交叉渗透的一门中心科学。”张希说,“化学的灵魂在于创造,创造新的结构和物质;魅力在于变化,出神入化,永无止境。”

在他看来,目前化学发展呈现四大趋势。第一,各学科之间壁垒弱化、界限模糊,许多原创性成果都诞生在学科交叉处;第二,化学研究的尺度从未如此宽泛,当前已经从原子、分子到超越分子的尺度,超分子体系和分子聚集体成为了化学研究的重要对象之一;第三,化学正在走向精准化,包括精准合成、精准组装、精准检测、精准计算等;第四,化学过去被认为是实验科学,而今,实验、理论和计算成为了当代化学的三大支柱。

基金委副主任、中科院院士姚建年表示,化学深入到人类生活的各个方面,医药、燃料、金属、食品、肥料的生产都依赖于化学,但也带来了污染等副作用,化学走向精准化将避免这些副作用的产生,实现人类社会的可持续性发展。

发展的化学

中国是否有好化学?对世界化学有哪些重大贡献?百年以后能否留下里程碑式的成果?“这些问题我十多年前难以回答,现在全国化学工作者取得很多重要成果,给了我回答的自信。”张希说,基础研究只有第一,没有第二;应用研究没有最好,只有更好。做到领跑则意味着不仅跑在最前面,后面还要有人跟踪。

在张希看来,即使按照这个“苛刻”的标准,我国也有许多值得一提的研究成果。如,聚集诱导发光新概念提出颠覆了传统认识,带动了全世界新一类有机光电材料的制备;在碳材料领域中,在世界上第一个合成出了石墨炔;在不对称催化领域,创制了一种螺环手性催化剂,其不对称加氢的效率为世界最高纪录;实现了世界最高分辨率的单分子拉曼成像,分辨率达到0.5纳米,可以看清一个分子。

“中国化学界从来没有像今天这样受到国际关注,中国的化学科技工作者也从没像今天这样受到国际同行的尊重。”张希说。

稳定的科研支持使得中国化学量质齐飞。化学部常务副主任陈拥军告诉《中国科学报》记者这样一组统计数据:2016年,我国化学论文发表量位居世界第一,引文数量全球第二,在化学领域的两大顶级期刊,《美国化学会志》以及《德国应用化学》上发表论文(研究类)的占比中国2016年已居世界第二。

国外学术机构曾提出归一化影响因子,1代表世界平均水平。基金委主任、中科院院士杨卫在2014年5月的西湖学术论坛上透露,用该因子来衡量,我国各学科的平均水平为0.74,只有化学和化工两个学科高于1,分别是1.2和1.19。杨卫认为,这代表了我国化学从产出量到影响力的转变。

张希亦认为,在中国科学从跟踪到并行、引领的转折中,化学走在了前列。

转型的化学

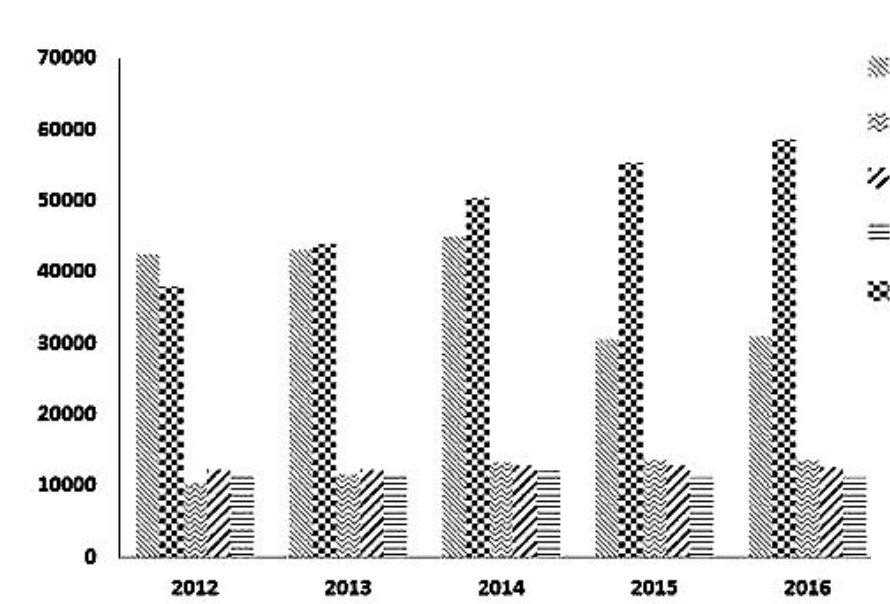
虽然成绩斐然,但张希指出:“中国是化学大国,但还不是强国,我们既不能妄自尊大,也不能狂妄自小。”

2016年第30届中国化学年会的主题是“转型中的中国化学”。姚建年在会上提出应对新形势的四大转变:第一,需要更多原创性和源头性贡献;第二,主动服务国民经济主战场;第三,充分发挥中心科学的作用,主动推动化学和其他学科的交叉融合,形成新的学科生长点和突破点。第四,科研管理者和科技工作者在科研管理、服务和评价方式与标准上适应转型发展的要求。

为了在“十三五”期间实现质的跃升,化学部制定了明确战略目标:未来5年强化基础性、前瞻性、交叉性、变革性的创新研究,实现从量的扩张到质的提升,在部分领域成为全球的开拓者和引领者。

为了实现这一目标,化学部进行了大刀阔斧的改革。基金委成立以来,化学部有7大传统学科——无机化学、有机化学、高分子化学、物理化学、分析化学、环境化学和化学工程。近年来,化学部加强了国际调研和战略研究,基于学科发展特点和国家战略需求,化学部重组形成了8个新资助方向——合成化学、催化与表面化学、化学理论与机制、化学测量学、材料与能源化学、环境化学科学、化学生物学、化学工程与工业化学。

Web of Science 统计的2012-2016年化学领域发表论文情况



对于这一改变,张希表示,这8个资助方向包括了合成和催化等核心化学的内容,化学生物学等交叉和前沿学科方向,以及面向国家战略需求的环境、化工、能源等方向。他希望这次改变有利于鼓励化学工作者跨越学科边界,打破常规,独树一帜,作出更多前瞻性、源头性的贡献,促进中国化学从并行走向引领。

未来的化学

姚建年指出,过去十年,中国化学实现了快速发展,为适应新的发展需求,化学科学研究应该勇于转型,走向“精准化”,在进行自由探索性研究的同时主动开展面向国家重大战略需求的基础研究。

在我国,化工在GDP中占比高达23.5%。化工在创造价值的同时,也对环境和健康造成了一定的危害,因此,科学家们提出了绿色化工的概念。

张希表示,化学的未来是可持续发展的化学,化学部“十三五”期间在绿色石油化工、煤的清洁转化和生物质可再生资源的高效利用等方面都有所布局,对减小环境负面效应的研究也会保持支持力度。

为了提高技术转化效率,化学部积极推动科研部门和企业界的合作,吸引全国优质科研资源解决企业问题,促进企业技术更新换代。如与中石油、中石化设立联合基金,研究石化企业感兴趣的科学问题,同时加强化学和化工的无缝连接,第一批近90个联合资助项目中有70%已经被相关企业列入研发计划。

基金委还瞄准国家重大需求,同地方政府合作,解决国民经济发展中的问题。例如,为了避免中国盐湖资源走上稀土开发利用的老路,基金委跟青海省设立了柴达木盐湖联合基金,开发盐湖资源深度综合利用;协助老工业基地

辽宁省发展精细化工特色产业;资助山西省关于煤炭高效综合利用的合作研究,以解决区域经济发展问题。

开放的化学

经过化学部常年的倡导,交叉融合的理念深入人心,我国化学界对外合作的氛围良好。

2016年,历时10年的基金委重大研究计划“基于化学小分子探针的信号转导过程”以全票优秀的成绩顺利验收,这是一次化学家和生命学家成功合作的典范。陈拥军回忆到,化学部对该计划的管理采取了开放的标准,最后有超过50%的项目由具有生物学背景的专家承担。

同时在基金委另一项重大研究计划“植物激素作用的分子机理”中,化学家和植物学家成功结合,建立了独立自主的植物激素检测平台,打破了该领域由外国两三家实验室垄断的局面。

“跟生命科学和医学、材料的交叉是化学未来发展的一翼,我们要主动把腿迈出去。”陈拥军说。

今年,作为新设立的资助方向,化学生物学的项目第一次独立进行专家评审。张希表示,化学生物学的发展对化学和生物学的影响是双向的,能产生双方意想不到的原创性成果。

此外,中国化学家主动迈出国门。今年9月,由中国、美国、日本、德国和英国5个国家的化学会和基金资助机构联合发起和共同资助的化学科学与社会高峰论坛(CS3)再次回到中国召开。

姚建年指出,在中国化学科学的转型过程中,要积极开展国际交流合作,充分利用像CS3这样的国际交流合作的平台传递中国化学家的声音,提升中国化学家的影响力。

张希：年轻人该做独创性工作

■本报记者 陈欢欢

最近几年,年轻科学家及其所在科研单位对“杰青”“优青”等“帽子”的追求颇为热烈。国家自然科学基金委化学科学部(以下简称“化学部”)常务副主任陈拥军近日在接受《中国科学报》记者采访时明确表示:“人才项目也是一类研究基金项目,不是一个人的学术头衔,对科学家学术水平的衡量还是要根据他真实的学术成绩。”

化学部主任、中科院院士张希亦表示,经得起时间考验的工作才是好成果。“高兴的是,现在我们对化学界科学成果的评价在回归正常。”

说起科研评价改革,化学部是当之无愧的排头兵。

早在2006年,科学界唯SCI论甚嚣尘上之时,化学部就明确提出了科技成果评价的“四个转变”——从注重论文数量向注重论文质量和影响力的转变;从注重锦上添花的工作向注重系统性研究工作的转变;从注重工作的一般创新性向注重原创性和科学研究价值的转变;从注重热门领域的研究工作向注重特色型、引领型工作的转变。

在陈拥军看来,这四点转变并没有硬性指标,但是通过在每年的评审会上反复强调,这些理念已经深入人心,所传递的价值观在评审中心形成了一把标尺,为项目评审保驾护航。

“我们的长期目标是,通过这样的尺子,引导越来越多的科研工作者做有品位的科学研究,形成群体与示范效应。”陈拥军说。

经过多年发展,科学基金已经形成了完整的人才资助体系:从被称为科研人员“第一桶金”的青年科学基金,到1994年就设立的杰出青年科学基金,再到后来设立的优秀青年科学基金、创新研究群体项目等等。

“青年基金资助率相对高,给了年轻人启动经费,‘优青’‘杰青’避免了年轻人跟资深科研工作者直接竞争。”张希认为,这样的人才资助体系为年轻人创造了安心工作的条件和氛围,让他们致力于解决重要的科学问题,对青年科学家的成长至关重要。

在年轻人才选拔上,化学部也坚持四点要求:学术规范、学术工作的独立性、学术工作的原创性和独特性以及学科领域的均衡发展等。

“这样的引导非常重要。”张希强调,“知道适时终止原方向,开拓新方向是一个成功学者的必备素质。在导师的原有方向上继续努力,最多也只能和先进水平并行,很难超越。我们认为,年轻人超越老师的最好办法是开拓新方向,做不一样的研究。”

为此,化学部组织了各种各样的青年学者讨论会,倡导和鼓励他们敢于解决重要的科学问题和技术问题。今年9月20-21日,化学科学部会同政策局和数理科学部召开主题为“化学:主流之外的机遇”的双清论坛,面向科学前沿、国家重大需求和国家安全,鼓励更为广泛的自由探索,开辟更多新领域和新方向。

在日常管理中,化学部也在着力解决相关学科领域同质化和趋同性的问题,避免重复性研究。今年下半年,化学部开始资助领域的重组,调整学科布局,将传统的七大学科调整为八个,其中就包括对学科同质化发展问题的修正。

“不要只去追逐热点,给别人抬了轿子,最后自己什么也没留下来。我们正在引导科研工作者瞄准真正的科学前沿和国家战略需求,希望化学学科可以率先开创出中国人独创的科研领域。”张希说。

基金代表成果

合成气直接转化制低碳烯烃获重大突破

低碳烯烃包括乙烯、丙烯、丁烯,被广泛用于生产塑料、纤维等,是重要的化工原料,也是现代化学工业的基石,传统上是通过石脑油裂解获得。由于我国富煤贫油少气,因此开发从煤、天然气、生物质等非石油的碳资源制备低碳烯烃的方法具有重要的战略意义。

合成气(CO和H₂混合气体)是煤、天然气等碳资源转化利用的重要平台。上世纪二十年代,德国科学家发明了煤经合成气生产液体燃料的费托过程,是目前唯一有效的合成气直接转化制低碳烯烃的途径。然而,该方法的缺陷是目标产物的选择性低,比如C₂-C₄烃(含2个到4个碳原子的烃类,包括烷烃和烯烃)在烃类中的选择性不超过58%。2012年,C1化学领域的国际知名教授 de Jong 团队通过对费托催化剂的组成和结构进行优化,取得了突破性进展,当转化率为小于1.5%时,低碳烯烃选择性达到了61%,转化率达到88%时,低碳烯烃的选择性仍高达52%。

2016年,中国科学院大连化学物理研究所研究员包信和和潘秀莲领导的团队提出了不同于传统费托过程的新路线(OX-ZEO过程),创造性地采用一种新型的双功能纳米复合催化剂,可催

化合成气直接转化一步获得低碳烯烃,选择性高达80%,且C₂-C₄烃类选择性超过90%,远高于传统费托过程低碳烯烃的选择性理论极限58%,而且在110小时的测试中催化剂性能稳定。该催化剂巧妙地将CO分子活化和中间体C-C偶联两个关键步骤的催化活性中心有效分离:其中CO和H₂分子在部分还原的金属氧化物缺陷位上吸附活化,生成CH₂中间体,活泼的CH₂与CO结合成气相中间体CH₃CO,进入分子筛MSAPO酸性孔道的受限环境中进行择型C-C偶联反应,从而实现定向生成低碳烯烃。研究表明,通过对分子筛孔道结构和酸性质的调控,可以实现产物分子的可控调变。另一方面,通过CO替代H₂来消除烃类形成中多余的氧原子,在反应不改变CO₂总排放的情况下,原理上可以降低高耗能和耗水的水煤气变换制氢反应,降低化学反应本身的能耗和水耗。这为进一步发展我国煤转化制低碳烯烃战略新兴产业开辟了一条新的技术路线。

该研究成果于2016年发表在《科学》上,该杂志同期刊发了de Jong以《令人惊奇的选择性》为题的评述文章,认为OX-ZEO过程未来在工业上将具有巨大的竞争力。(陈欢欢)

聚集诱导发光提高发光效率

光在人类生活和文明进程中不可或缺,近代光学研究的重大进展多与发光材料有关,然而传统有机发光材料的设计与应用面临聚集导致发光猝灭(ACQ)的制约,ACQ也是有机发光材料应用的“阿喀琉斯之踵”。尽管研究人员采用了化学、物理或工程的方法来抑制分子的聚集降低发光猝灭效应,但效果并不理想。从焐焐角度看,分子在固态下聚集是一个不可控的自发过程,刻意地抑制分子聚集并不能从根本上解决这个问题。

2001年,香港科技大学讲座教授、中科院院士唐本忠团队根据观察到一些有机分子在溶液中不发光但聚集后发光显著增强的现象创造性地提出了聚集诱导发光(AIE)这一光物理领域的新概念,从根本上解决了有机发光分子的ACQ问题,克服了“三个和尚没水喝”的窘境。AIE使人

们突破传统观念的束缚,从堵变疏来提高有机分子固态发光效率,促使人们重新思考和认识经典的光学定律和跃迁过程。

唐本忠团队在实验数据和理论模拟的基础上,提出了分子内运动受限(RIM)的聚集诱导发光工作机制,AIE领域的品牌分子四苯乙炔(TPE)正是在此机理指导下开发的。同时,以RIM机理为基础,唐本忠团队提出了用AIE基元改造传统ACQ分子的策略,极大地丰富了固态高效发光材料的种类。随着研究的深入,提出了结晶诱导发光的AIE衍生概念,并发展了结晶诱导的纯有机高效室温磷光体系。在大量AIE材料体系制备的基础上,实现了其在高效光电转化器件、高灵敏传感器和智能响应体系以及高分辨特异性成像和精准医疗等领域的高新技术应用,并展示了其显著优于传统有机发光材料的工作特性。

仿生超浸润界面材料研究取得进展

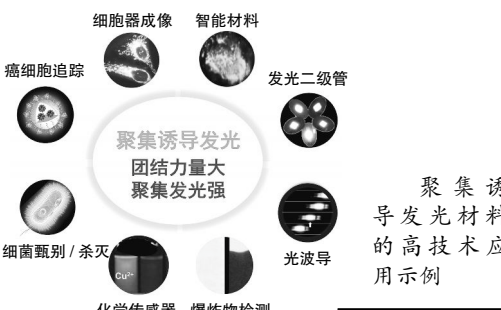
出淤泥而不染的荷叶、翩翩起舞的水尾以及捕虫能手猪笼草等都是大自然的精妙创造,是具有“超浸润特性”的自然界杰出代表。作为超浸润领域的“掌舵手”,中科院院士、中科院理化技术研究所研究员江雷通过近二十年的潜心研究,总结规律,提出了二元协同理论,即将两个具有相反性质的纳米结构单元控制在“协同距离”上,将会产生新的特殊性质。这一发现将材料研究提升到哲学的高度,指导了界面纳米材料的设计,发展了仿生超浸润界面材料体系。

浸润性的研究可追溯到1756年发现的莱顿弗罗斯特现象(Leidenfrost),即当液体接触远超过其沸点的表面时,表面上会产生一层有隔热作用的蒸汽;1805年,杨氏方程的提出从理论上解释了浸润行为;1997年,提出微结构是

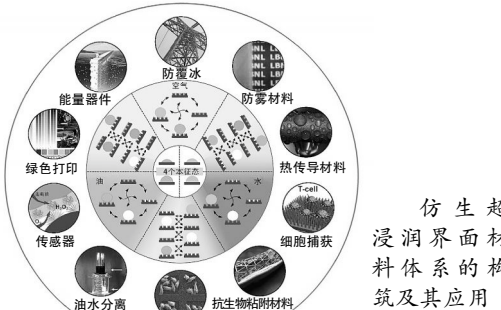
荷叶超疏水的关键;直到2002年,浸润性研究迎来巨变,江雷等发现了荷叶表面的微纳多尺度复合结构对荷叶的超疏水及自清洁起到了关键作用。

研究表明,通过在固体表面引入功能高分子材料,可以实现表面不同浸润性的精确调控。2009年,江雷团队发现了鱼鳞水下的超疏油性,发展了水下液/固超浸润体系;同年,发现荷叶水下超亲气现象,建立了水下气/固超浸润体系;2014年,江雷将超疏水界面材料拓展到所有液-液-固、气-液-固等一切三相体系,创建了包含64种变换的仿生超浸润界面材料体系。

目前所取得的部分研究成果已经应用于能源、资源、环境、健康以及信息等领域。例如,超



目前,世界上60多个国家/地区的1100多个单位的科学家在从事AIE相关的研究,发表论文数和引文数均呈指数增长。AIE已被纳入国内外本科生实验教学,2013年和2015年汤森路透AIE分别列为化学和材料研究前沿的第三位和第二位。2016年《自然》一篇新闻深度分析文章将AIE点列为支撑纳米光革命的四大纳米材料之一,且是其中唯一一个由我国科学家原创的新材料体系。(陈思)



疏水涂层用于建筑玻璃及外墙的自清洁;超浸润界面设计用于制备防覆冰和雾水收集;通过浸润性调控,实现油水、有机溶剂及乳液的高效分离;利用界面浸润性调控,构筑了抗生物黏附界面材料,实现了癌细胞的高效捕获;调控基底浸润性,发展了纳米材料绿色印刷制版技术;设计并构筑非对称纳米孔材料,实现了可再生蓝色海洋能的捕获。(陈思)

