



“化”育万物

■本报记者 甘晓

2019年5月中旬,中国科学院化学研究所(以下简称化学所)园区里一栋实验楼一不小心成了“网红”。为举办“国际化学元素周期表年”的公众开放日,科研人员布置了一栋楼那么大的元素周期表。

不久前,在这栋楼的一间实验室里,该所研究员、中科院院士李玉良带领的团队通

过一种简便、可扩展的合成工艺制成一种零价钼原子锚定在石墨炔上的原子催化剂,研究成果发表在《美国化学会志》上。“这是一种真正的零价原子催化剂,是第一种高效、高选择性地产生氨和氢的双功能原子催化剂。”李玉良向《中国科学报》介绍了这项最新成果。

对于中科院分子科学科教

融合卓越创新中心(以下简称分子科学卓越中心)的科研人员而言,在分子科学概念下,化学逐渐成为一门中心学科,形成“化”育万物的繁荣景象。

“世界新科技革命发展的势头迅猛,作为重要基础科学的分子科学,正在孕育新的重大突破。”分子科学卓越中心主任、化学所所长张德清表示。



化学所科研人员布置了一栋楼那么大的元素周期表。

中科院化学研究所供图

从化学到分子科学



2018年8月15日,分子科学卓越中心召开理事会。

化学,是一门古老的学科。历经数百年,化学学科建立了完备又严密的研究体系,发展出无机、有机、物化、分析、高分子等多个二级学科。面向未来发展,这种“分片式”化学学科恐怕难以碰撞出更多的思想火花。

同时,化学作为创造物质的学科,在社会和经济发展中作出了重大贡献,展示了基础科学与应用的强大结合能力。在新的时期,如何更加深入揭示化学的基础科学属性、解决化学的重大核心问题,通过交叉融合实现方法理论的突破与研究领域的拓展,孕育更多改变世界发展进程的知识与技术,是全世界化学家的新使命。

“当时我们隐隐约约有这个看法,能不能叫做‘分子科学’?上世纪90年代末,化学所时任所长朱道本提出了设想,‘好的应用固然重要,但我们仍然应当坚持化学是一门科学。’他请所里文献情报室研究人员查询,到底有没有‘分子科学’这个概念,世界上有没有化学家在开展‘分子科学’研究。”

当时,处在世纪之交的中国科学家预见到,即将到来的21世纪,一定是属于交叉学科的。朱道本更愿意用“交响乐”来形容学科交叉,指的是优秀科学家在一起紧密合作,演奏出比独奏更美妙的乐曲。

探究化学键和分子间相互作用

的本质进而创造新分子、构建新的分子功能体系——“分子科学”概念和基本任务首次在中国化学界提出。

化学所继1994年成为科技部和中科院基础性研究改革试点单位后,又在1999年的中科院知识创新工程试点中启动“分子科学中心”建设。

作为我国“分子科学”研究的发源地,化学所围绕分子科学布局的蓝图就此展开。于2003年与北京大学联合筹建北京分子科学国家实验室(筹),并于2017年共建北京分子科学国家研究中心。

2014年8月,中科院启动实施“率先行动”计划,为化学所的改革提供了创新动力。鉴于多年来在分子科学前沿取得的科技成就和展现的良好发展态势,化学所提出建设“分子科学科教融合卓越创新中心”。

在当年12月召开的卓越中心咨询论证会上,中科院相关部门邀请了12名院内外同行专家和管理专家,对卓越中心实施方案进行咨询论证。“战略定位清晰、主要方向组织体现了优势和竞争力,有望实现科学卓越和教育卓越。”这是专家组对分子科学卓越中心的评价。

2015年1月15日,中科院院长办公会批准该卓越中心启动筹建。

正如20年前所预见的一样,分子科学走上了科学史的舞台。张德清指出,“作为研究分子的结构、合成、转化与功能的科学,分子科学将为可持续发展提供新知识、新技术、新保障,为能源、生物、信息、航空航天等高科技提供物质基础。”

“这真的是化学实验室吗?”

身着白大褂的实验人员手握试管,将五颜六色的液体倒进烧杯、锥形瓶中,观察化学反应的结果——如果抱着这样的想象走进化学所实验室,大概会惊呼:“这真的是化学实验室吗?”

前几年,一位受朱道本邀请的学者来到有机固体实验室。“他看到我们有很多搞物理的设备,对我们在学科交叉上做的努力感到非常惊讶。”朱道本为此感到自豪。

他强调,有机固体研究具有显著的交叉性。团队成员的专业包括有机化学、物理化学、高分子化学、理论物理和器件物理。“他们发挥各自的专业背景和研究特点,互相配合。”朱道本说。

在学科交叉的基础上,科学家按分子合成、分子组装、分子功能的逻辑布局了分子科学卓越中心的3个研究领域,分别研究共轭分子导向的

合成与剪裁、分子的可控组装及调控、分子功能体系的构筑与应用。

张德清介绍,合成与制备化学是分子科学的核心,但更强调分子合成过程的精准化和绿色化。“合成化学家将致力于革新惰性化学键的活化和成键模式。”他说。

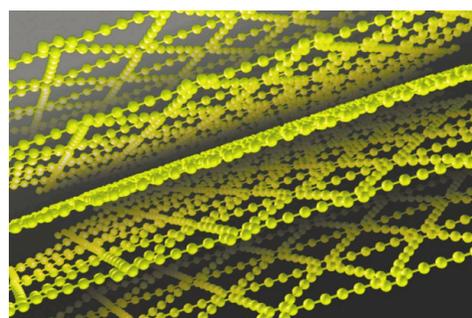
自组装作为创造新物质和产生新功能的新手段,是21世纪分子科学将要解决的重大科学问题之一。分子科学研究则更注重探索超分子、分子聚集体及其高级结构的形成、构筑、性能以及分子间相互作用的本质。

对科学家而言,确认了目标,毫无疑问这是“对”的方向!近年来,他们在中科院战略性先导科技专项(B类)“功能 π -体系的分子工程”(以下简称专项)中,开垦出分子科学的诸多处女地。

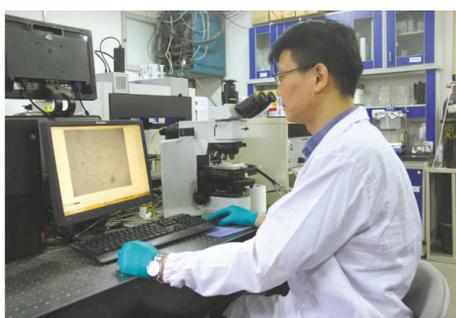
分子中碳原子通过 sp^2 或 sp 键合方式相互连接或与杂原子连接形成

π -离域轨道有机分子,通常被称为“ π 分子”。这类分子的特殊结构使其具有丰富的物理化学性能。因此,共轭分子中惰性键的活化新方法,共轭分子的高效、绿色合成,共轭分子的多级可控组装与功能,光电功能、生物功能、力/热功能等方向,成为科研人员聚焦的重点。

如今,该专项进入收官阶段。科学家已在综合性能优异的有机半导体、柔性电子器件的构筑、兼具高发光和高迁移率的分子材料、有机电泵浦激光等方面取得多项突破。“通过专项的执行,分子科学卓越中心正在全面引领该领域的发展。”张德清介绍。未来,分子科学的发展必将越来越依赖于学科交叉。例如,同步辐射光源、散裂中子源、强磁场等关键研究工具和变革性研究方法的出现,为中国分子科学取得新的重大突破创造了条件。



二维碳石墨炔的结构模型



研究人员在实验室工作。

聚焦基础研究原始创新

分子科学研究面向应用,但从事分子科学研究的出发点则是基础科学问题。回到基础科学问题的“初心”,这一点在分子科学卓越中心几乎成为一项共识,也在化学所科研人员中薪火相传。

在朱道本带领的有机固体研究团队中,研究人员长期聚焦有机功能材料的电输运特性,成为国际上发现高迁移率有机半导体材料最多的团队之一。迄今为止,该团队已有30余人成为本领域的学术带头人,10人获得国家自然科学基金杰出青年科学基金项目资助,4人当选为中国科学院院士。

2010年,李玉良带领的团队用六炔基苯在铜片表面的催化作用下发生偶联反应,合成出另一种新的碳材料——石墨炔。这是世界上首次通过合成化学方法获得的全碳材料。

这项研究的“初心”离不开科研人员对化学键断裂与精准形成的基本科学问题的思考。

上世纪90年代,化学所有机固体实验室在朱道本带领下开展了碳材料富勒烯研究。碳具有 sp^3 、 sp^2 和 sp 三种杂化态,通过不同杂化态可以形成多种碳的同素异形体。唯独含 sp 杂化的新结构碳材料还没有被人工合成。

“这类碳材料电荷分布不均匀,存在化学反应的活性点,有可能成为新一代电子、光电器件及催化的关键材料。”李玉良表示。

近10年来,李玉良团队已经实现了石墨炔可控的层数制备。如今,基于对石墨炔本身的深入了解,研究团队重点围绕石墨炔储能、原子催化方面的性质开展研究。随后几年里,

该研究吸引了来自生命科学、催化、燃料电池、太阳能电池等不同领域的科学家参与合作。作为一项基础研究的科学突破,石墨炔已经在跨学科、跨领域的应用中展现出强大的生命力。

最近,他们发现了石墨炔锚定零价原子催化剂,在《美国化学会志》以封面文章发表的研究成果挑战了单原子催化领域最难攻克科学问题——锚定零价金属钼原子。研究人员不仅在石墨炔表面负载了零价钼原子(负载量高达7.5 wt.%),还实现了其表面活性组分的高度分散。该催化剂具有确定的结构、明确的反应活性位点等特点,实现了在常温、常压下高选择性、高活性和高稳定性合成氨和产氢。

在石墨炔出炉的这一年,王健君回国加入化学所。“所里的领导和前辈都主张,分子科学研究要面向真正的科学难题,要开辟自己的特色。”

问问“初心”,王健君在实验室主任宋延林的支持下,很快确定了研究领域。“水是怎么变成冰的?这个问题到现在也没有答案。”他说。听起来很简单的问题,实际上蕴含着冰核如何形成、冰晶如何生长等深奥的科学问题。

一头扎进这些科学问题后,王健君从滑冰运动中受到启发,制备了一种新型的自润滑冰层冰层材料。“滑冰时,冰刀与冰面间存在液态的水润滑层,我们才能在冰面上自由滑行。”他解释,“如果能在需要防冰的材料表面引入一层水,不就好了吗。”

2013年,他带领团队利用多巴胺修饰的透明质酸在弱碱性条件下

发生交联反应,并沉积修饰到固体材料表面得到这种材料。其分子能携带500倍以上的水分,是目前发现的自然界中最好的保湿性物质。这一材料的引入,极大降低了冰的粘附力。几年来,该团队在揭示生物控冰分子机制、仿生构建高分子控冰表面及设计构建实用高分子控冰涂层等方面取得了长足进展。

最近,王健君又有一系列新的研究突破,使研究人员深受鼓舞。“我从回国到第一篇文章发表,大概经历了3年时间。分子科学卓越中心为我们创造了宽松的环境,去享受新发现、攀登真正的基础科学高峰。”他说。

为改善科研氛围和研究条件,分子科学卓越中心专门布局人才专项、建立新型人事制度。同时,试行的团队绩效评价办法,让骨干人才和试点团队的薪酬稳定支持部分逐年提升。“这些措施使科研人员能够潜心治研、安心工作,为做出原创的、里程碑式的科研成果,引领分子科学领域的发展而努力。”张德清说。

人工模拟光合作用水裂解催化中心的提出正是一个典型案例。研究员张纯喜自1997年以来一直潜心水裂解催化中心的结构和机理研究。2015年,他成功合成得到当时与生物水裂解催化中心结构最接近的人工模拟物。研究成果发表在《科学》上。“一个新的催化中心结构很快会发表。”张纯喜表示。

在科研人员的共同努力下,分子科学卓越中心在2017年的国际评估中获评“A级”评价。2018年1月8日,该卓越中心通过验收进入正式运行阶段。

科教相长:温故而知新

上基础课,自然会给学生带来新鲜的“料”。宋卫国说:“讲了5年课,我每年的教案,PPT都会大改。”其中,增加科研进展是在他备课中格外重视的。例如,在“晶体结构”的课堂上,宋卫国会以近年来钙钛矿太阳能电池的新发现为例,帮助学生理解阴离子与阳离子如何结合。

科研促进教学的效果显而易见。2016年9月和2017年10月,中科院前沿科学与教育局组织教育领域专家对国科大科教融合学院进行评估,国科大化学学院连续两年均获得“A”的优异成绩。在教育部第四轮学科评估中,国科大化学学科获得了“A+”。

反过来,教学促进科研,更能体现“科教融合”的深意。对李永航和宋卫国而言,“教学相长”并不是一句空话。

李永航看到,科研人员埋头研究工作时,往往只关注一个极小的领域。“给本科生上基础课,需要对整个学科的基础知识进行完整而系统的整理,对科研会有新的启发。”他表示。

例如,同样在准备“晶体结构”一章课程时,从事有机和钙钛矿太阳能电池研究的李永航受到“离子半径决



李永航院士为本科生授课。

定了化合物稳定性”这一规律启发——“要提高钙钛矿光伏材料的稳定性,是不是可以通过从结构上调整组分的离子半径实现?”他想。

宋卫国也深有体会。最近,从事催化相关研究的他对设计催化剂的策略有了新想法。他带领团队在设计之初就从电子结构入手,有针对性地挑选磁性材料,以实现回收的目的。

这也是宋卫国在本科生课堂上经过“温故”而“知”的“新”——电子结构中的不成对电子是材料磁性的原因。“上课就是给自己补课,跳出科研,回到基础知识中,对继续前进有很大帮助。”他说。

从化学到分子科学,从基础到应用再回到基础,从科研到教学,从化学所到分子科学卓越中心……多年来,无论名

称、机构、定位如何变化,中国化学家不懈攀登、科教报国的决心始终不变。

“化”育万物,“育”出的不仅

是创造美好生活的新物质,更是一流的人才、一流的思想、一流的成果,这些都为我国由“化学大国”迈向“化学强国”作出了贡献。