

成果与应用

中国科学院获 2002 年度 国家科学技术奖成果简介(一)*

中国科学院综合计划局

(北京 100864)

关键词 中国科学院, 国家科学技术奖, 成果, 简介

2002 年度国家科学技术奖, 授予中国工程院金怡濂院士最高科学技术奖, 奖励 263 项科技成果, 其中国家自然科学奖 24 项, 国家技术发明奖 21 项, 国家科学技术进步奖 218 项。

我院获 2002 年度国家科学技术奖共 27 项, 其中国家自然科学奖一等奖 1 项, 二等奖 11 项; 国家技术发明奖二等奖 1 项; 国家科技进步奖二等奖 14 项。从总体上看, 我院近年来获国家科技奖的比率呈上升趋势。特别是上海有机化学研究所蒋锡夔院士等完成的“物理有机化学前沿领域两个重要方向——有机分子簇集和自由基化学的研究”, 在国内外产生了重大影响, 荣获国家自然科学奖一等奖, 打破了 1998 年以来国家自然科学奖一等奖空缺的局面。下面简要介绍其中 26 项, 不包括专用项目。

国家自然科学奖一等奖成果

物理有机化学前沿领域两个重要方面——有机分子簇集和自由基化学的研究

完成单位: 上海有机化学研究所

主要完成人: 蒋锡夔, 计国桢, 张劲涛, 范伟强, 史济良

物理有机化学是有机化学的理论基础。它主要涉及结构、介质和化学特性、物理特性之间的关系。该成果围绕这一主题的两个重要方面, 即(1)疏水亲脂相互作用(HLI, Hydrophobic Lipophilic Interaction)驱动的有机分子簇集和自卷; (2) 自由基化学中取代基自旋离域参数 σ_{ij}^* 的成功建立和应用进行了深入系统的研究。这两个方面都涉及有机化合物的结构效应和介质效应, 历来是物理有机化学研究的核心内容之一。

疏水亲脂相互作用(HLI)是分子间主要的弱相互作用之一, 也是导致宇宙间生命现象形成的基本作用力之一。深入了解 HLI 对研究生命科学、理解生命现象及某些生理、病理过程有根本性的意义, 在有机合成、化合物分离和超分子化学中也有重要的地位。而有机分子的簇集和自卷是研究 HLI 最基本和最简单的模型, 它们直接影响受物分子的反应性和生物功能, 所以, 用物理有机化学的概念和方法来研究它们是研究 HLI 最好的途径之一, 并且可以用这一简单的理论模型来研究模拟生命现象中的某些物理和化学变化过程, 如该成果已发现动脉粥样硬化斑块的组成和胆固醇酯类化合物的共簇集倾向性直接有关。而解簇集概念的提出和有效解簇剂的研究又可以为治疗动脉粥样硬化疾病的药物分子设计提供有益的启示。因此, 这是物理有机化学前沿领域及与生命科学有关的重要研究方面之一。

在有机分子簇集和自卷课题中, 提出和验证了 6 个创新概念: (1)首次提出并用实验验证动脉粥样硬化病因和分子共簇集倾向性有直接关系; (2)提出并经实验证明只有带有不同电荷长链分子才能形成静电稳定化簇集体; (3)提出解簇集概念、研制成有效解簇剂, 为药物的分子设计提供了启示; (4)首次利用分子自

* 收稿日期: 2003 年 2 月 22 日

卷形成 14、17、18 元环大环化合物和催化某些有机反应；(5)首次揭示溶剂的内在特性溶剂促簇能力(SAgP)对有机分子簇集和反应性的影响；(6)首次揭示了分子几何因素及自卷对分子簇集倾向性的影响。

自由基化学的创新性贡献是：(1)建立了当前国际上最完整、最可靠的反映取代基自旋离域能力的参数 σ_{ij}^* ；(2) σ_{ij}^* 成功应用于多种自由基反应和波谱参数的相关分析；(3)提出自由基化学中结构性能相关分析的 4 种规律性假设，解决了自由基化学界上述长期存在的两个重要问题。

这两个课题的创新贡献均为国内外首次发现及提出。截至 2000 年底，共发表论文 120 篇，出版专著 1 部；被国内外刊物引用 802 次，引用刊物的影响因子总和为 1 816。蒋锡夔等应邀在国际会议和国外大学、研究机构做报告 120 余次。研究成果具有重大的理论意义，受到国内外同行的高度重视，属国际领先水平。

(相关图片请见封二)

国家自然科学基金二等奖成果

高分子稳定金属纳米簇的合成及催化研究

完成单位：化学研究所

主要完成人：刘汉范，于伟泳，左晓斌，涂伟霞，王远

纳米金属簇属介观相，它是沟通多相催化与均相催化的桥梁，其特殊性和规律性尚未被充分认识和利用。作为一类新型的催化剂材料，它可以得到用传统的催化剂制备方法所无法获得的、具有独特结构和反应性能的新材料。该项目完成人在金属簇催化领域的 3 个方面做出系统的创新性工作：

(1)金属簇的合成与表征。运用基体效应结合冷冻干燥技术解决了金属簇宏量合成的难题；首先将微波介电加热技术用于金属簇的合成及金属簇的连续合成，具有方法学上的重要性；首次将 XPS 表征技术应用于双金属簇的表面成份分析。

(2)金属簇的催化反应。首先报道了金属离子对金属簇的修饰作用可同时大幅度提高催化剂的活性和选择性；提出了金属络合物效应的概念，为提高金属簇催化剂的活性和选择性提供了新途径。在铂金属簇催化 α -酮酸酯的不对称氢化反应中，得到乳酸甲酯的 e.e. 值 97.6%，是目前诸报道的最高值；确证了该反应为结构非敏感性反应——不同于传统催化剂的催化特性；提出了修饰剂长程作用模型。

(3)金属簇的负载。提出了配位俘获法负载化技术，运用巯基固定金属簇。被认为是当前纳米材料研究中的“热点”之一的二维空间自组装技术的一项“先驱性研究”(the pioneer study)。

C₆₀ 的化学和物理基本问题研究

完成单位：化学研究所，物理研究所

主要完成人：朱道本，李玉良，严继民，赵忠贤，徐愉

C₆₀ 因其高度的对称性、三维共轭、活泼的化学反应性及很强的电子亲合力等突出特点成为国际上最受关注的领域之一。它的研究不仅涉及化学、物理学、电子学及微电子学，而且涉及到生命科学、纳米技术等学科。该成果的完成人员首先在国际上开展了以 C₆₀ 为电子受体的电荷转移复合物及其衍生物 LB 膜的研究，并对晶体培养、结构、光学性质、磁性等方面做了系统的研究。

完整明确地区分和指认了 C₆₀ 与 C₇₀ 拉曼分子振动模式，提出了 C₆₀ 光致发光光谱的位置是在 7 479 Å；获得的电荷转移复合物 TTF_xC₆₀Br_y 的铁磁转变温度是迄今最高的；在低温下发现基于富勒烯的稳定氮氧自由基的铁磁相互作用也属首次；在 C₆₀ 材料的光导研究方面，发现的一种光导体系，其衰减迅速完全，具有潜在的应用价值；获得了一系列性能优越的新型光限幅材料；提出并制备了基于 C₆₀ 的共价非共价自组装纳米结构材料，设计合成了共价的 PPV-C₆₀ 二元体系并构建了 LED 器件；提出了适量掺杂可较大改善器件的亮

度和发光效率,器件的综合性能属国际领先。

定向碳纳米管的制备、结构和物性的研究

完成单位:物理研究所

主要完成人:解思深,李文治,潘正伟,孙连峰,周维亚,常保和,王超英,刘维,吕力,王刚,唐东升,刘祖琴

在碳纳米管的生长机理及碳纳米管的取向、直径和结构的控制生长方面做出开创性工作,取得国际先进水平的研究成果。1996年,发明了定向生长碳纳米管的模板方法,制备出离散分布、高密度和高纯度的定向碳纳米管阵列,解决了碳管的混乱取向和相互纠缠的问题。1998年制备出长度为2—3mm多层碳纳米管阵列,比已有碳管的长度提高了1—2个数量级,使得可用常规方法研究碳管的性质。首次研究了长碳纳米管束的热学、力学、光学等性质;开口碳纳米管阵列的电子场发射研究取得先进指标。2000年,制备出最细内径为0.5nm的碳纳米管,与理论极限仅差0.1nm;指出通过制备最细碳纳米管可能实现其结构的控制生长。

项目组共发表论文72篇,其中SCI收录62篇,EI 29篇。文章总引用数537次,他人引用数245次。定向生长文章的单篇引用数达275次。据科技部科技信息研究所统计,该单篇为1998年全国单篇引用数第四和1999—2001年全国单篇引用数第一;并被美国科学信息研究所评为1981—1998年最有影响力的文章之一,获经典引文奖。由于碳纳米管的研究工作,解思深被授予1999年桥口隆吉基金奖和2000年何梁何利基金科学与技术进步奖。该项目系列研究工作分别被评为1998年“国内十大科技新闻”、1999年和2000年“国内十大基础研究进展”之一。

新型无机聚合物的设计合成、结构规律与性能研究

完成单位:福建物质结构研究所

主要完成人:洪茂椿,吴新涛,曹荣,黄群,苏伟平

该成果运用创新的研究方法,成功地研制出一系列具有均一尺寸和大小金属-有机纳米笼、纳米管和纳米线及具有纳米孔径稀土-过渡金属、过渡金属-硫属及新型金属-有机材料和具有光、电或磁性能的新型无机聚合物。还研究出国际上首例具有半导体性能的金属石墨和一系列具有半导体性质的新型聚合物及具有三阶非线性光学性能、磁学性能和荧光性能的聚合物。

该成果的102篇论文全部发表在SCI期刊上,其中国际一流期刊44篇,在国际上产生了重要的影响。已有美、德、日、加拿大等国家的多位知名专家要求开展合作研究。相关工作被国际同行专家推介为21世纪无机高聚物电学性能研究的新方向,被美国权威学者专著详细引用,还被英国知名杂志评为杰出的无机化学论文。截至2001年9月,论文被引用300余次,并呈逐年增长趋势。该成果有良好的系统性和完整性,内容涵盖了具有光、电、磁性能的新型无机聚合物的合理合成、结构规律、物理化学性能及潜在应用性能的研究,为寻找新材料提供了非常有用的信息,具有重要的科学意义和应用前景。

持久性污染物的环境界面化学与控制技术原理

完成单位:生态环境研究中心,清华大学,北京大学

主要完成人:单孝全,汤鸿霄,王子健,钱易,陈静生

持久性污染物对环境的危害是全球面临的重大环境问题之一。该研究探索了持久性污染物在水体颗粒物、水体/沉积物、土壤/土壤溶液/植物根系等若干界面过程的规律,较好地解决了国际学术界的某些争论,在对环境微界面上持久性污染物的迁移转化过程原理进行深入研究的基础上,发展了持久性污染物的若干新控制技术原理。主要成果如下:

(1) 首次应用恒定容量模式、扩散层模式和三层模式等三种表面络合模式描述了持久性污染物在天然

河流沉积物表面的吸附行为,解决了国际学术界关于污染物在天然沉积物表面吸附行为的模式研究中存在的猜测与争论。

(2) 提出了将腐殖酸多官能团作用基团与游离金属离子反应的平均作用作为单一反应位点的表面络合模式,研究水体中重金属与腐殖酸反应的机理。基于铅在水 / 沉积物界面过程的动力学,阐明了水体中相当一部分铅不能被沉积物所固定。这些见解已被视作普遍规律而为国际同行接受。

(3) 揭示了地球化学矿物相分离方法学中存在两个突出问题,即不能有选择性地分离土壤中不同的地球化学矿物相,分离过程中重金属会在相间发生再吸附与再分配,从而解决了国际学术界在这一问题上的长期争论。

(4) 基于土壤 / 土壤溶液 / 植物根系界面过程,阐明了硒的存在形态与生物吸收利用的关系,揭示了中国低硒带硒的环境地球化学规律。

(5) 根据难降解有机污染物结构与生物降解性的关系,研究了难降解有机污染物在人工处理系统中的行为、去除效果、阻碍因素,构建了包括高级化学氧化预处理的新型生物反应器、固定化细胞技术的厌氧-好氧相结合的处理持久性有机污染物的技术原理,并建立了相应的工艺技术。

(6) 对无机高分子絮凝剂的形态、结构及微界面絮凝过程进行了理论研究,发展了高效絮凝剂研制和相应反应器的技术原理。

行星际扰动传播研究

完成单位:空间科学与应用研究中心,国家天文台

主要完成人:魏奉思,冯学尚,章公亮,颜毅华

太阳活动产生的太阳风暴,如何通过行星际空间传播是了解和预报空间天气变化规律的核心科学问题之一。该项目在有关自然现象、过程和规律方面的主要进展包括:太阳活动引起的行星际扰动,在向地球传播的过程中将向赤道低纬电流片方向偏转、会聚;电流片有阻碍它的跨越传播并产生地磁等空间环境变化中的电流片同异侧效应;按行星际磁云内部磁场旋转方式的不同划分正、负磁云新分类,负磁云引起的地磁、宇宙线强度下降效应比正磁云的大;太阳日冕区的磁盔—电流片结构对扰动传播有重要的动力学效应,如激波偏转、激波面下凹、慢激波转变为中间激波等;提出在行星际空间的多种结构处磁重联可发生的科学观点、找到观测事例并用数值模拟予以印证等。

在取得这些进展的过程中发展和建立的新方法主要有:建立有限能量半空间太阳磁场算法、发展近特征线投影边界条件理论和磁流体力学中的低数值粘性、高精度方法、提出激波流形概念、近似能量法与空间衰变法和从行星际闪烁观测数据中提取磁场信息的方法等。这些研究进展得到较广泛的引用和好评。

蛋白质二硫键异构酶的分子伴侣活性以及分子伴侣帮助的蛋白质折叠

完成单位:生物物理研究所

主要完成人:王志珍,邹承鲁,蔡晖,姚怡,宋九莉

见本刊 2002 年第 6 期 425 页。

中国兰科植物研究

完成单位:植物研究所

主要完成人:陈心启,郎楷永,吉占和,罗毅波,朱光华

见本刊 2002 年第 6 期 425 页。

通过金属配位作用而实现的一些高选择性合成反应

完成单位:上海有机化学研究所

主要完成人:戴立信,侯雪龙,唐勇,施小新,王德坤

该成果的贡献主要在以下四类反应研究中,通过金属的配位作用实现了反应的高选择性。

(1)解决了 Sharpless 不对称环氧化反应中环氧产物的选择性开环,实现了环氧化合物的高选择性定向开环。对于环氧醇的高选择性开环反应中,发展了三个试剂系统,其中 $\text{LiBH}_4\text{-Ti(OPr}^i)_4$ 体系的负氢离子开环反应的选择性高达 150:1,与文献方法相比,体系简单,选择性更高,该方法已被广泛应用;结合 Sharpless 环氧化方法的动力学拆分,用催化的方法可分别得到光学纯的四类氨基己糖;找到了芳胺,芳硫醇等对称的环氧化合物的去对称化开环反应理想条件。

(2)建立了不对称氧钨化反应合成光学活性吗啉类化合物的方法;发现了新的羟氯化反应,并结合 Jacobsen 的动力学拆分方法建立了“发散式”合成一系列手性药物 β -阻断剂的新方法。

(3)通过叶立德途径合成乙烯基环丙烷或乙烯基环氧化合物时,在锂配位作用下实现了很好的立体选择性的调控,可以几乎专一地得到反式产物或顺式产物;优于文献已有方法。并发展了一条由硫叶立德合成多种取代的氮杂环丙烷,并实现了不对称合成炔基氮杂环丙烷的方法。

(4)通过金属配位的过渡金属催化的硼氢化反应,发现催化的硼氢化反应在苯乙烯体系和烯丙基砜体系中对区域选择性的逆转,实现对苯乙烯体系的高对映选择性不对称硼氢化反应,得到的 ee 值高达 96%。

该成果在上述反应中所得到的选择性已达到国际领先水平。被国际同行应用于一些有意义的化合物合成中,并被广泛引用,部分结果列入著名高等有机化学教科书中。

国际人类基因组计划 1%基因组测序

完成单位:遗传与发育生物学研究所,国家人类基因组北方研究中心,国家人类基因组南方研究中心

主要完成人:杨焕明,于军,汪建,黄谷扬,顾军

1999 年 9 月,中国正式成为国际“人类基因组计划”成员国,并承担了 1%的测序任务。1%的工作框架图测序与分析任务于 2000 年春完成。美、英、法、德、日、中六国合作的“人类基因组的初步测序和分析”一文已发表在 *Nature* 上。1%的完成图于 2001 年 8 月提前两年完成。

“1%测序”的主要贡献有:(1)中国共提供了 42.856 Mb 的“框架”序列。(2)主要发现包括:人类染色体短臂近端区域的遗传距离与物理距离不相符;基因分布极端不均匀;“新区域重复”的集中性分布;基因稀少区存在“超大基因”,导致短小的外显子讯号被含大量重复序列的内含子所淹没;定位在该区域的疾病有 13 种,其中有 8 种疾病相关基因的位置在基因组序列上得到了确认。

中国不仅完成了 1%的工作量,更产生了历史性的影响:发展中国家第一次参与了原先只有超级大国组成的国际性科研合作;中国提出“共有、共享、共为”的原则,产生了全球性的影响;我国理所当然地成为国际“人类基因组单体型图(HapMap)计划”的主要参与国;“1%项目”带动了中国基因组科学的发展,建立了大规模基因组科学研究中心,为我国启动与人类健康及与农业、工业、环境相关的基因组研究奠定了基础。

叶轮机械气动正、反问题的求解与设计优化的研究

完成单位:工程热物理研究所

主要完成人:陈乃兴,黄伟光,徐燕骥,张丰显,董明,李卫红

叶轮机械的应用几乎遍及国防和经济建设的每一个领域。由于燃料价格和使用性能的提高,迫切需要进一步改进叶轮机械的设计。国内航空、航天、能源、舰船、交通等许多部门都迫切要求加强这方面的研究。

它已成为叶轮机机械气动热力学研究的热点,其水平代表了当今世界叶轮机机械气动热力学研究的最新成就。

该项目的创新内容包括三大部分:(1)与国际同步、独立自主地发展了叶轮机机械全三维全粘性流动的正问题求解方法。自 20 世纪 70 年代末起,就叶轮机机械粘性流体力学的研究进行了许多基础性研究,提出了叶轮机机械全三维全粘性流场的计算的两个方法。1994 年作为 11 个人选单位中惟一的中国代表参加了具有国际先进水平的“Rotor 37 单转子压气机性能的盲题测试”。(2)系统、全面地发展了叶轮机机械气动反问题的理论与求解方法。这些方法在理论上和方法上解决了反问题研究的一些难点。(3)设计的优化研究有创新。首次提出了 J 型、特殊马刀型叶片、后加载周向复合短叶片和轴向弯曲叶片的概念、机理和应用。

这些成果的工业应用大大地降低了煤耗,为国家节约了大量资源。

读者来信

就“对国家创新体系的新认识”一文 张光斗院士的来信及路甬祥院长的回复

《中国科学院院刊》编辑部:

你们好!贵刊 2003 年第 1 期发表路甬祥院长的重要文章“对国家创新体系的新认识”,文中有“国家创新体系是由科研机构、大学、企业及政府组成的网络。”这是很正确的。“对科技和教育的投入将成为知识经济时代最为重要的公共性战略投资。”这里对科技的投入是指对科技研究开发的投入。这句话也是可以理解的。文中有“科技创新提供必要的源头供给,为企业和全社会提供知识和技术基础。”“企业则是应用新知识、进行技术创新和市场开拓的主体。”全文都是依据这个思想体系写的。

我们理解企业是技术创新的主体,要支持科技研究开发工作,不只是应用新知识和科技成果,而要进行中间试验和生产试验,把科技成果转化为创新技术和生产力,设计和制造生产线,开拓市场。这要花大量资金、人力、器材、设备等,而且有风险。对引进的技术和生产线,消化、吸收、创新,也要花大量资金、人力、器材、设备等,也有风险。目前企业尚没有成为技术创新的主体,有种种原因。要建立国家创新体系,除了加大对科技和教育的投入,必须使企业成为技术创新的主体,这要花很大力量和决心的。

以上认识是否妥当,请指正。

此致

敬礼!

张光斗 上

2003 年 2 月 16 日

光斗先生:

我读到您给《院刊》编辑部的信,深受教益。我同意您的意见。企业要成为技术创新的主体,是市场竞争和必然要求和结果。除少数公益类、国家安全类产品的研发创新需要国家扶持外,在竞争领域主要靠市场力量促进和形成企业的自主创新动力和能力。政府的责任更多的是创造公平竞争的环境,保证人才和知识源头供给,制订并及时调整鼓励技术创新的政策等。这些不仅靠科技改革和投入增加可以解决,更要靠经济体制和社会管理改革才能完成。目前势头是好的,但有待发展和完善。以上认识,请批评指正。

敬礼

路甬祥

2003 年 2 月 28 日