



化学测量学“十四五”发展规划概述

王春霞^{1*}, 毛兰群², 黄岩谊³, 陈拥军⁴

1. 国家自然科学基金委员会化学科学部, 北京 100085

2. 北京师范大学化学学院, 北京 100875

3. 北京大学化学与分子工程学院, 北京 100871

4. 国家自然科学基金委员会交叉科学部, 北京 100085

*通讯作者, E-mail: cxwang@nsfc.gov.cn

收稿日期: 2021-03-12; 接受日期: 2021-03-15; 网络版发表日期: 2021-04-23

摘要 化学测量学是化学的测量科学、方法和技术, 是化学科学最早、最重要的发展分支之一. 其根本任务是获取物质组成、分布、结构与性质的信息与时空变化规律, 并为其他相关学科的发展提供方法和支撑. 本文介绍了国家自然科学基金委化学科学部化学测量学“十四五”及中长期发展规划, 为从事相关研究的科研人员、老师和学生提供参考.

关键词 国家自然科学基金, 化学测量学, 发展规划, 研究方向

1 引言

科学基金作为我国资助基础研究的主渠道, 全方位审视全球科学技术发展趋势, 全面深化科学基金改革, 通过确立基于科学问题属性的资助导向, 建立以“负责任、讲信誉、计贡献”为核心的公正高效分类评审机制, 构建符合知识体系内在逻辑和结构、促进科学前沿和国家需求相统一的学科布局^[1]. 化学科学部通过广泛深入的调研, 深刻认识到随着化学科学的发展, 原有的学科设置不能更好地适应科学发展的态势, 特别是不利于交叉和前沿领域的发展, 率先在2017年对原有八个学科进行了整合重组, 将原来的分析化学学科重整后调整为化学测量学^[2].

根据2021~2035年中长期暨“十四五”我国基础科

学发展的总体目标, 遵循习近平总书记向我国广大科技工作者指出的面向世界科技前沿、面向经济主战场、面向国家重大需求、面向人民生命健康的“四个面向”科技创新方向^[3], 按照科技部的总体部署, 国家自然科学基金委(以下简称基金委)化学部组织化学测量学领域的院士、杰出青年基金项目获得者及学术带头人50余人进行深入研讨和战略研究, 在此基础上, 形成了化学测量学“十四五”及中长期发展规划, 明确了学科内涵、目标和特征, 分析了学科现状和新兴研究方向, 提出了未来学科发展布局和优先发展领域. 制定该规划的目的是瞄准重要科学前沿领域的重要基础性问题, 结合国家战略需求, 推动新兴交叉学科产生及新的学科生长点形成, 切实提升我国化学测量学的研究水平和解决实际问题的能力.

引用格式: Wang C, Mao L, Huang Y, Chen Y. The 14th Five-Year Plan of the National Natural Science Foundation of China for chemical measurement science. *Sci Sin Chim*, 2021, 51: 944-957, doi: 10.1360/SSC-2021-0061

2 化学测量学发展战略

2.1 化学测量学的战略地位

化学测量学是研究物质的组成和结构, 确定物质在不同状态和演变过程中化学成分、含量、时空分布和相互作用的量测科学, 旨在发展化学测量相关的原理、策略、方法与技术, 研制各类分析仪器、装置及相关软件, 以获取物质组成、分布、结构与性质的信息与时空变化规律.

化学测量学是化学的测量科学、方法和技术, 是化学科学最早、最重要的发展分支之一. 利用物质间和物质与各种力场间相互作用的原理、规律以及科学技术的最新成就, 广泛吸纳和应用所涉及的自然科学技术和人工智能数据提取方法, 最大程度地获取所需信息和有关科学数据, 实现对物质化学成分、组成和结构与其功能的认知. 通过与物理、生物、数学、材料、信息等相关学科的交叉与融合, 化学测量学已经形成自己的理论体系, 并诞生了新的生长点和前瞻性研究方向: 从传统的容量分析发展到现代的仪器分析; 从光谱、电化学、色谱、质谱、核磁共振、热分析拓展到成像分析、纳米分析、微纳流控分析; 从无机、有机分析扩展到生命过程化学信息的获取; 从常量、微量、痕量分析到单颗粒、单细胞、单分子、活体分析; 从简单物质的鉴定、单一信号的获取到复杂与生命体系的高通量检测与海量数据挖掘. 其他学科领域的发展, 不断向化学测量学提出新的、更高的需求和挑战, 这对测量方法和检测仪器的不断进步起到了积极的推动作用. 复杂生命过程、先进材料创制、新型能源、食品安全、环境问题和特种空间等物质信息和数据的获取, 使化学测量学步入新的发展时期.

基金委化学测量学资助的研究涵盖从宏观到微观复杂体系的检测与分析, 旨在建立新策略、新原理、新方法和新技术, 致力于拓宽现有技术在国家重大需求和重要科学领域的应用. 研究方向包括: 样品处理和分离、谱学方法理论及应用、化学与生物传感、分子成像及仪器研发创制等. 研究范围涵盖色谱、光谱、电化学、质谱、核磁、顺磁、量热分析、能谱分析, 以及新兴领域如组学分析、单分子单细胞分析、活体分析、微-纳尺度分析等.

2.2 化学测量学的发展规律

2.2.1 化学测量学的发展面向国际科学前沿

化学测量学与生命科学、材料科学、纳米科学、能源科学、信息科学和环境科学等前沿领域紧密结合, 互相促进, 做出了突出的成绩. 以微-纳尺度分离分析为例, 它得益于微流控学和纳米科技的先期发展和成功实践, 实现了从过去的微米尺度向微-纳米以及纳米尺度的过渡, 这种发展又和纳米制备技术及其分析表征的需求密切相关. 微-纳尺度分析的发展, 还直接与生命科学前沿, 如与基因测序、蛋白质组学等研究有关, 同时也受益于生命科学新的研究成果. 空间探测对携带仪器重量和体积的苛刻限制, 也是促进微-纳尺度分析方法和技术发展的重要催化剂. 这些事实表明, 化学测量学的发展必须面向科学前沿, 并立足于多种学科前沿发展的基础之上, 具有非常鲜明的特征和突出的时代感. 近年来, 我国科学家利用微纳尺度流体控制及分析中的基础研究成果, 在液滴微流控、单细胞分析、微纳流控复杂生物样品分离等几个重要的应用方向上, 取得了一批具有国际前沿水平的成果, 对于生命分析技术的发展和我国生物技术产业的发展, 起到了重要的推动作用. 面向生物大分子分析中单分子核酸和蛋白序列分析这一国际前沿问题, 我国科学家也积极布局, 充分利用了在化学测量学领域的积累, 提出了新概念, 研发了新装置, 与国际科学界在同一水平竞争.

2.2.2 化学测量学的发展立足国家重大需求

纵观世界科技发展史, 虽有一些科学理论成果是先于社会需求产生的, 但大部分科技发展成果是由于社会需求而催生的. 20世纪30~40年代, 原子光谱、质谱和离子交换色谱的快速发展就是为了满足曼哈顿计划的需求. 近几年我国的食品安全重大事件、公共安全、环境污染等, 化学测量学都能及时组织科技攻关, 开发了相关检测技术, 建立了相应的国家标准, 为维护国家和人民的利益做出了重要的贡献.

国家的经济实力不仅反映在国民生产总值以及国防实力, 也反映在产品质量上, 而产品质量则取决于分析检测的水平. 化学测量学一直致力于发展高灵敏度、高通量、高效快速的分析检测方法, 为各种产品质量的检测提供强有力的手段. 我国最近几年在基础

研究方面已经接近甚至在某些领域超越了发达国家的水平,但在应用过程中体现的差距依然存在。例如,我国在食品农药残留检测方面长期处于被动状态,导致发达国家或地区对我国出口食品所设立的贸易技术壁垒,大多集中在评价标准和检测技术领域。近十年来,我国在农产品、食品检测的化学测量水平正在逐渐接近发达国家水平,成为我国相关产品进出口贸易的坚强技术保障。

提高全民健康水平以及保障国家公共安全,迫切需要化学测量学提供强有力的支撑。我国化学测量学将涉及重大疾病与国家公共安全的分析方法作为重要研究内容,重点研究如重大疾病早期诊断、食品、环境有毒有害物、爆炸物、毒品、生化恐怖源等的快速、准确、灵敏的检测方法,以满足维护人民健康、社会稳定与国家安全的需求。从2001年全球首例手足口病,到2003年的SARS病毒、2009年H1N1流感病毒、2016年寨卡病毒以及2019年暴发的新冠肺炎病毒^[4],我国的化学测量学家在这些不断暴发的全球流行性疾病的预防与控制中,发挥了重要的作用,开展了有益的探索。尤其是在新冠病毒检测技术上,我国科学家从病原鉴定方法、核酸及抗体检测技术、病原溯源方法、快速检验方法和试剂等方面,均做出了重要贡献,为疫情防控的成功提供了技术支撑和方法保障^[5]。这一技术积累和实战的操练,体现了核酸分析方法领域过去一段时间的知识储备、技术沉淀以及人才积累是有效的,也为今后类似新发突发传染病的应对,提供了信心和能力保障。

2.2.3 化学测量学与相关学科交叉融合,互相促进

化学测量学实现对物质化学成分的认知,需要利用物质间和物质与各种力场间相互作用的原理、规律以及科学技术的最新成就,最大限度地获取所需信息和有关科学数据。

化学测量学的发展需要借鉴相关学科的成果。仪器分析作为化学测量学的一个分支,首先得益于物理学(电磁学、光学、力学、热学等)、材料科学(金属材料、无机非金属材料、有机材料、高分子材料、生物材料以及各种材料加工技术等)和信息科学的发展;同时,生命科学、空间科学和环境科学的发展大大促进了化学测量学的发展。再以微-纳尺度分析为例,它直接面对介观及以下尺度空间的科学问题,旨在构建

和发展更高水平、更快速度、更有效率的物质组成、分布及其浓度信息的化学测量学策略、方法和技术,以尽可能快速、全面和准确地获取介观、微观世界中丰富的信息。这也正是整个化学测量学目前所追求的目标,更是生命科学、环境科学、材料科学、医药卫生和工业技术中必须解决的问题。因此,微-纳尺度分析的发展与整个化学测量学的发展一样,离不开相关学科的发展和支持,只有通过与其他相关学科,如数学、物理学和微加工技术等,进行深入的交叉合作研究甚至融合,化学测量学才能得到更好、更快的发展。

化学测量学自身的学科特点,就带有强烈的学科交叉特征。除了借鉴各个学科的成果之外,化学测量学本身的进步,还可以有效带动多个学科的进步或者催生新的学科增长点。以核酸分析这一化学测量学的重要分支为例,20世纪初对核酸成分的精确定量分析,以及20世纪中叶对核酸结构的分析和深刻认识,从根本上改变了生物学、遗传学和医学等学科的思维范式,也奠定了分子生物学的基石;而后随着核酸序列测定技术的发展,人类对生命的认识进入到全新的阶段,同时也促使基因组学产生与飞速发展,并开始发挥重要的医学价值。由此可见,化学测量学的一个重要本质,就是立足于多个学科的边界和交叉点上,在新的维度上拓展知识体系。

2.3 化学测量学的发展态势

化学测量学善于把科学上的新发展转化为全新的分析方法和仪器,每一次重大突破都会推动科学的发展。例如,核磁共振就是把原子核自旋与磁场和射频场的相互作用而发生的共振现象(曾两获诺贝尔物理学奖),转化为用于结构分析的核磁共振波谱方法(获1991年诺贝尔化学奖)、蛋白质结构的测定方法(获2002年诺贝尔化学奖)和磁共振成像(获2003年诺贝尔生理学医学奖)。分析原理和方法上的多样性,决定了化学测量学在自然科学中应用的广泛性。

当前,我国化学测量学研究体现出如下特点。

(1) 注重方法创新和新原理发现。20世纪80年代以来,我国化学测量学的发展逐步由跟踪模仿和应用研究为主转变为注重创新方法和新原理发现的研究。近年来,这一转变的趋势更加明显。中国化学测量学在微-纳流控分析、新型荧光探针、纳米分析、电分析化学、核酸分析等方面取得了一批国际领先的研究成

果,并形成了一致的共识,即只有发现新原理,在方法和技术上进行创新,才能做出一流的工作,才能提升中国化学测量学的国际地位。

(2) 以生命分析和环境分析为研究重点. 生命科学是21世纪的科学前沿, 环境分析关乎人类的长久健康发展. 中国化学测量学家近年来围绕这两个重点领域开展化学测量学的创新研究, 在单细胞分析、单分子分析、活体分析、蛋白质分析、DNA测定、疾病诊断以及环境污染物监测等方面取得了显著的进展, 产生了一系列标志性成果。

(3) 与尖端分析仪器装置的研制紧密结合. “工欲善其事, 必先利其器”. 科学仪器是科学数据产生的基础, 科学研究新领域的开辟, 往往要以实验装置、仪器技术以及方法学上的突破为先导. 回顾科学发展的历程, 很多学科的发展首先有赖于技术方法及科学仪器的创新, 近现代科学的发展更是以技术的迅速发展为重要基础. 在诺贝尔物理和化学奖中, 大约有四分之一属于测试方法和仪器创新, 如质谱仪、X-射线物质结构分析仪和扫描隧道显微镜等. 以微流控的研究为例, 我国和国际研究的早期情况基本一致, 首先是相关实验装置的加工和制备. 经过“973”项目和国家自然科学基金委重大项目的成功实施, 我国在微-纳尺度分析方面的加工技术已经处于世界前列, 并形成了一定的加工创新能力, 这为我国在此领域进行前沿探索提供了重要技术保证. 此外, 我国在“十三五”期间建成了一批大科学装置, 包括同步辐射光源、自由电子激光、散裂中子源、强磁场, 以及在建设中的多模态跨尺度生物医学成像设施等, 这些国际先进水平尖端科学装置发展的分析方法及相关应用为我国化学测量学发展提供了强有力的物质保障。

(4) 初步建成一支高素质的研究队伍. 世界各国之间综合国力的竞争, 实质上是科技实力的竞争, 国家科技实力的决定因素是科技人才的数量和质量. 近年来, 通过大力引进青年人才和领军人才, 发现和培养优秀人才, 我们已经建成了一支高素质的化学测量学研究队伍, 并构建了一个学术自由、公平竞争、尊重科学家研究兴趣、有利于人才成长的体制和研究氛围, 确立了一套科学、公正、合理、透明的评审和评价机制。

纳米酶概念就是由中国科学家率先提出的, 十几年来这一研究方向取得了快速的发展. 纳米酶是一类

自身蕴含酶学特性的纳米材料, 自2007年首次报道以来^[6], 已有超过20个国家的300多个实验室从事纳米酶及其在生物、医学、环境等领域的分析检测、诊断治疗和催化应用研究. 纳米酶能够在温和条件下高效催化酶的底物, 也能在极端环境中保持高的类酶活性. 同时, 纳米酶兼具纳米材料特有的物理化学特性以及经济、稳定、易于大批量生产的优势, 有望取得关于特异性、催化活性和机理等方面的重大突破, 使其替代天然酶成为分析检测的重要突破口, 推动类酶催化从基础研究到实际应用。

2.4 化学测量学的新兴研究方向

化学测量学在传统分析化学研究的基础上^[7], 近年来呈现出以下新兴研究方向。

2.4.1 能源分析化学

能源是人类赖以生存和发展的重要基础, 在国防和国民经济建设中具有重要的战略地位. 化石能源的大量消耗及其带来的环境问题, 使得探索和开发高效能源转化技术以及寻找新型可再生能源成为当前能源科学的重要研究方向. 能源分析是对能源储存与转换过程中存在的物种、能量转化等的定性与定量分析测量, 包括对能源材料、分子、离子、电子、质子等的实时动态监测、成像分析及其转变过程的原位研究, 从而帮助理解能源转化机制, 促进能源高效转化, 推动能源科学的发展. 首先, 能源过程涉及物质与能量的转化, 而转化效率的评价离不开化学测量学对转化前后物质与能量的精确测量. 其次, 能源过程涉及多种物理、化学过程的耦合, 其转化机制尚不清晰, 极大地限制了高效能源材料与器件的开发. 化学测量学可对能源体系中瞬息万变的组成、分布、能量状态进行实时测量, 捕获活性位点、反应中间物甚至是电子结构信息, 获取其演化规律, 为系统深入认识能源过程的化学本质提供重要的支撑。

能源转化过程往往发生在很短的时间范围内, 导致待测量的物质具有寿命极短、浓度极低等特点, 且尺度变化大(从亚纳米到米级)、相数多(气、液、固等)、组成复杂多变、受光/电等多种外场影响显著. 同时, 新型能源材料与器件不断涌现. 因此, 能源体系的精准测量, 给化学测量学带来巨大挑战, 亟需发展适用于能源体系的高灵敏、高时空分辨测量方法, 研制

面向能源体系的新型分析仪器与装置, 实时原位监测不同尺度、不同相界面、不同材料表面能源过程的动态变化, 从而揭示能源过程的分子作用机制, 为高效能源材料与器件的设计和开发提供测量方法与技术。

主要研究内容包括但不限于如下五方面。

(1) 提升能源分析方法的灵敏度、特异性和时空分辨能力。传统分析技术受灵敏度与时空分辨率的限制, 往往只能获得较大空间范围和较长时间尺度的宏观统计平均信息, 难以直接获取能源过程中物质在限域空间内的瞬态变化信息, 限制了对能源过程微观化学本质的深入认识与理解。因此, 发展适用于能源体系且具有更高灵敏度、特异性以及时空分辨能力的分析方法与技术, 在复杂多变环境中原位获取能源转化过程的动态信息, 是能源分析领域亟需解决的问题。一方面, 可通过提升原有分析方法与仪器(如电化学、光谱、质谱、核磁等)的灵敏度与时空分辨率。另一方面, 可从分析的原理创新, 借助多学科交叉融合, 发展新的测量学原理、理论、方法与仪器, 建立全新的能源分析方法。

(2) 能源体系的多尺度、多相界面、多组分及多模式分析。能源过程涉及不同尺度(原子级活性位点、微纳米能源材料、宏观器件)、不同界面(固液、固固、气固等)、不同组分(反应物、电子、光/电场等)之间的相互转化, 且各因素之间相互关联、相互影响。亟需利用化学测量学手段, 观测能源体系中不同尺度下电子/电荷传输、分子转化过程, 直接检测能源过程中各种界面可能存在的关键中间体, 分析其对能源转化的影响。同时, 结合多种分析技术, 从多个角度对能源体系进行多模式测量, 获得分子结构、电子结构、时空间分布等多模态信息, 全面解析能源过程的化学本质。

(3) 外场调控下能源反应与新能源材料的原位动态分析。能源过程的研究往往是在外场调控下进行的, 能源分析必须考虑外场对能源过程的原位调控作用。提高新型能源分析方法的时空分辨, 以获得外场调控下的各相时空成像数据, 深入剖析外场种类、强弱、分布、动态变化等对能源转化过程的影响, 从而揭示外场调控下能源转化过程的机制。在此基础上, 发展新的通用型原位动态分析技术, 对新能源材料进行系统分析, 揭示其组成、结构及演化过程, 阐明其结构与作用机制, 指导设计更加高效的能源材料。

(4) 开发面向能源体系的新型分析仪器和联用设备。能源体系复杂, 须从多个角度获取精确信息, 进行全面分析。例如, 利用电化学与谱学分析(红外、拉曼等)在动态限域尺度上的联用, 可获得瞬态电化学界面过程的微观反应信息; 同时利用谱学对产物乃至中间物的定性和定量分析, 可从分子层面揭示反应机理。现有的联用分析方法与仪器, 其灵敏度与时空分辨率往往较难同时达到能源分析的检测需求。因此, 需发展适用于能源体系样品、无损、普适、可原位观测的新型分析仪器与联用设备, 从而建立多参数、多模态能源转化评价体系。

(5) 建立能源分析相关数据库与标准化测试方法。能源分析目前缺乏统一的度量标准, 降低了研究成果对后续研究的指导意义。建立能源体系的标准化测试方法, 对能源科学的长期发展具有重要意义。这需结合能源科学的研究现状和重点领域, 对包括样品前处理、测试及数据分析等全流程进行测量规范, 有效量化能源体系的评价指标, 建立能源分析领域标准化测试方法。在此基础上, 将标准化测试结果共享上传, 结合大数据人工智能技术, 建立能源分析综合数据库。

2.4.2 材料分析化学

材料分析化学是材料化学、合成化学和化学测量学的有机融合, 是化学测量学的一个重要分支, 具有长久的发展历史。近年来受多个学科飞速进步的推动, 材料分析化学的测量手段和工作范畴都产生了巨大的变化, 成为化学测量学的新兴研究方向之一。材料分析化学包括两层内涵, 一是将新原理、新技术与新方法应用于材料的结构、组成、表界面及理化性能分析表征; 二是将新材料用于化学测量学, 借助新材料的光电磁等优异性能, 提高分析方法的灵敏度、选择性、重现性和稳定性等。

材料分析化学在化学测量学的发展中将扮演重要角色。例如, 半导体发光量子点光谱特性及其能带结构与性能关系的研究离不开光谱分析仪器和方法, 而发光量子点的出现, 尤其是低毒、可见及近红外光发射量子点的发展, 为生物成像及癌细胞原位、实时标记提供了有力工具; 超顺磁性纳米材料的发现为复杂物质分离分析、免疫分析以及磁共振成像提供了新的机遇; 具有光热效应的纳米材料使光控释放以及光热分析检测成为可能。同时, 新材料的新结构、新性能也

亟需新的分析表征设备与研究手段和技术,如单原子、单分子水平上的结构与性能表征,超薄、超小结构表征,表界面性能表征等,特别是实时原位表征。

目前材料分析化学处于高速发展阶段,近年来我国化学测量学家在该领域取得了一系列瞩目的成果,尤其是基于新材料性能开发的新型传感平台,其主要研究内容体现在以下三个方面。

(1) 纳米材料具有与宏观物质迥异的表面效应、体积效应、量子尺寸效应、宏观量子隧道效应,以及由此引起的优良光、电、磁及生物化学特性。利用其磁性能,通过在其表面修饰核酸适配体、抗体及亲和配体,可实现复杂样品中靶分子的高效富集与分离;利用光、电及生物学性能,通过在传感界面上构建纳米颗粒,可实现目标待测物信号的高效放大,高灵敏检测实际样品中的靶标物质;利用纳米材料新性能,如发展新型的氟磁共振成像探针和近红外光热探针,探索可穿透人体组织深层次的疾病检测新方法;整合磁共振、光热、荧光、拉曼、电化学、化学发光、颜色变化等多种测量手段,实现生命过程相关的重要生物物质的多模式高灵敏检测。

(2) 探索纳米结构和性能的定量关系,构建有别于单个纳米粒子性能的纳米组装结构。通过化学多级组装模拟生物体系的结构和功能,揭示结构与功能的关系,探索重大疾病的精准诊断与高效治疗新模式,并结合生物标记发展重大疾病的精确诊断新技术;模拟肿瘤空间构型,探索循环肿瘤细胞等疾病的检测新方法;构建气体传导优化组装体系,实现对不同疾病呼气中标志物的高灵敏诊断技术;在生命体中构建生物拓扑结构,探索对活体器官、组织和细胞功能的重要影响机制,研究疾病诊断新机制。

(3) 纳米复合材料作为各种纳米材料的结合体,不仅具有单个纳米材料的特点,更展示了复合材料的特有性能。以聚合物为载体的无机纳米复合材料综合了无机、有机和纳米材料的优良特性,具有良好的机械、光、电和磁等功能特性,为开发新型的成像检测技术、电化学传感器件、气体传感器和分离检测技术提供了强大的材料基础和技术空间。仿生材料是当前材料科学中的前沿领域,根据自然界生物的某些组织或器官制备的纳米复合材料,在大健康检测和环境分析中将发挥重要作用。对仿生材料的迫切需求,使其研究越来越受到重视。MOF、COF和多孔硅等多孔材

料由于具有比表面积高、热稳定性和化学稳定性好等特性,在样品的采集、分离、富集等方面均表现出优异的性能。

2.4.3 生物成像

成像技术和设备是生命科学研究和临床医学重要的工具,而对生命活动的精确测量与可视化将成为后基因组时代前沿科学的主战场。荧光蛋白、超分辨成像技术和冷冻电镜技术等三个生物成像技术分别获得2008、2014和2017年的诺贝尔化学奖,凸显了这个领域的重要性。生物成像目前已成为一个高度交叉的研究和应用领域,融合了生物、化学、物理学、神经科学、医学、工程、材料等多个学科。

生物成像依据尺度大体可以划分为宏观、介观和微观三个层面,分别对应于组织、细胞和生物分子成像。生物成像领域存在很多挑战。现有的成像方法通常可分为结构/形貌成像技术和功能/分子成像技术,它们在尺度、时间、空间分辨率和无创伤性等方面各有特点。

生物活性分子的时空分布、结构、功能及其相互作用方式,决定了细胞增殖、分化、凋亡以及重大疾病发生、发展、迁移等过程。生物活性分子,不但包括蛋白质、核酸等生物大分子,同样也包括如自由基、质子、离子、神经递质、氨基酸等生物活性小分子。生物活性分子共同形成精密复杂的相互作用和调控网络,实现生命活动的基本功能。对活性分子的浓度和时空分布加以精确监测,是深入揭示致病机理以及对疾病进行预警与诊治的前提,对疾病标志物的研究具有重要意义。

细胞中存在多种类型的生物活性小分子,在细胞的病变过程中起着重要作用,每种类型又可能有数种分子及其代谢物在时间和空间维度上发挥作用,发展生物活性小分子成像方法,研究这些小分子及其与生物大分子的相互作用与转化十分重要。发展细胞、亚细胞水平上,具有高选择、高灵敏、多水平、多参数分析新方法和新技术,以及原位、实时、动态的可视化示踪技术,对实现活性小分子的准确定量及时空分布检测具有重要意义。细胞显微荧光成像技术为实现这一目标提供了契机,但该技术存在如分辨率有待提高、缺乏定量分析手段、缺乏对小分子活性物质的识别受体和高特异性反应等问题,难以实现这些活性分

子细胞和亚细胞层面的高空间分辨和高时间分辨. 无标记生物成像技术能够直接对细胞中的化学组分在分子水平上高灵敏度地准确识别和鉴定, 并避免荧光成像中有些代谢产物小分子无法实现荧光标记的局限.

国内化学测量学在生物成像方法学方面有显著进展, 但与国际先进水平仍存在很大差距. 其中有两个重要原因: 一是缺乏相关人才队伍和团队, 二是国产高端生物成像设备和核心部件自主能力不足. 例如, 在样品分析测试技术与设备方面, 我国目前的整体局势是对技术的应用能力强, 但相关高端仪器设备及配套试剂主要掌握在国外公司手中.

主要研究内容包括如下三方面.

(1) 发展新原理和新型成像方法

利用不同的光和物质相互作用, 发展新型成像手段, 包括X射线生物成像、超分辨成像、无标记成像、荧光寿命成像、光谱成像、自适应光学成像和细胞分辨质谱成像技术等. 以基于同步辐射装置的X射线细胞显微成像为例, 该技术用波长为0.1~10 nm的电磁波成像, 分辨率极易达到数十纳米, 与荧光显微装置相比具有独特优势. 如何将这些X射线细胞显微成像技术与分子成像技术结合, 反映细胞结构和功能变化的分子基础, 是细胞显微成像技术领域的一个重要发展方向, 具有巨大的应用前景.

发展高灵敏的单分子成像方法, 拓展基于光、电、磁等更多信号响应的单分子检测机制, 提高从复杂生物体系高背景噪声中测量和分析单个分子信号变化的水平, 在细胞、组织器官甚至活体中对单个生物分子进行实时快速“拍摄”, 实现生理和病理状态下生物单分子随时空变化的实时动态成像.

发展高通量、高内涵、自动化、微型化成像方法. 基于细胞成像的多重原位分析方法(*multiplex in situ analysis*)成为近年的研究热点. 这些技术能实现对上千种mRNA在组织和细胞原位的单分子成像分析, 以解析其数量和分布情况, 为组织原位细胞类型鉴定提供了重要工具.

发展组织深处成像方法, 如多光子成像、光声成像、超声成像和红外成像技术, 并在此基础上发展多模态跨尺度生物成像方法, 如光学成像与电镜成像融合的光电联用技术、PET-CT、PET-MR和fMRI-OPT. 将测序与成像结合, 将微流控技术与单细胞成像技术结合提高通量和分析效率等多模态技术等, 实现单细

胞的精确识别、追踪和俘获、精细的动态多模态观察.

(2) 发展高性能成像探针和样本制备方法

基于在化学、材料科学方面的优势, 我国科学家在成像探针研发方面处于国际前列. 现有的荧光探针分析方法已经达到了很高的灵敏度, 能够检测到单分子的水平, 并研发出大量可供选择的荧光探针, 包括荧光染料、量子点以及各类聚集和组装材料等. 但现有的荧光探针在灵敏度、选择性、跨越细胞膜的能力、毒性与生物相容性、时空分辨能力以及对小分子活性物质的识别能力等方面还不能满足需要.

发展遗传编码荧光探针. 制备特异性遗传编码荧光探针, 发展实时、高空间分辨率的成像新技术, 用于测量生物分子在细胞内时空动态分布、行为与代谢. 创新发展遗传编码荧光探针特异性识别与高灵敏荧光传感原理, 构筑高通量遗传编码荧光探针设计、测试与筛选平台. 针对代谢、信号转导等重要生物过程, 研发高亮度高响应度遗传编码荧光探针, 发展生物正交、多参数活细胞生物表型监测技术, 建立基于遗传编码荧光探针的细胞与活体动物模型.

发展新型探针、标记技术和样本制备方法. 研制新型纳米探针、识别生物活性分子的荧光探针、多组分同时分析探针、分子结构荧光分析探针、超高灵敏度和单分子分析方法与探针以及超分辨时空成像方法与探针, 研发新型核素探针及靶向造影剂等可早期、特异性显示恶性肿瘤的探针体系. 样品制备技术包括如组织透明化和样本膨胀技术等.

(3) 持续拓展成像技术的应用, 发展人工智能在生物成像领域的应用, 包括多模态跨尺度图像融合技术、图像智能识别、成像分析及建模算法等; 以及大力推进研制国产生物医学成像分析仪器、部件和配套试剂, 包括显微镜、物镜、相机和电动载物台等, 开发高通量及高内涵单细胞成像与定量分析及原理样机, 研发分子影像技术工具.

2.4.4 仪器研制

科学仪器是认识世界的重要工具. 人类科学发展史上任何一次大的飞跃都离不开科研工具的巨大创新和根本变革, 科学仪器的发展和创新的往往是催生科技创新的重要要素. 长期以来, 科学仪器研制是我国科技的短板和弱项. 面对美国和其他国家对我国高端科

学仪器(特别是高端测量仪器)、部分关键器件禁售的现实,我国科学研究必须解决基础关键器件、部件、材料研制和系统设计,不断激活从源头上增强国家自主创新的能力。

目前,科学仪器的研制正面临着难得的历史性机遇。我国在“九五”和“十五”期间已将“科学仪器研制与开发”列为国家科技攻关计划的重要组成部分。1998年,国家自然科学基金委启动了科学仪器研制专项,开始推动我国相关仪器设备的研究。2016~2020年化学科学部共计73项国家重大科研仪器研制专项得到资助,其中化学测量学43项,在整个化学学科占据重要位置。仪器研究覆盖从传统光、电、色、质领域到生命体系及高通量、成像等诸多新兴前沿领域,成功研制了单细胞时空分辨分子动态分析系统、超高分辨离子迁移谱、超高灵敏光谱流式检测系统、小型质谱仪器、微流控芯片-质谱系统、高通量测序仪、微流控芯片与检测仪器、双向凝胶电泳成套设备和电化学成像等一系列原创仪器,培养了一批从事分析仪器研制的研究人员。虽然成效显著,但研制仪器中的关键器件和部件仍然依赖国外,科研仪器相关研究还远未形成规模,至今没有相关的创新研究群体。

当前,围绕化学测量学核心科学问题,发展原位、在体、实时、在线、高灵敏度、高通量、高选择性的仪器系统,依然存在挑战。研究对象也从宏观体相系统到微观世界的单分子单个体分析。面向宏观领域体系的分析仪器集合体,如环境中的水体、空气污染等大尺度群体行为测量,结合人工智能及大数据分析,可能会提供更多更有效的数据信息。

从科学仪器制造技术角度看,整机的微型化、固态化,不仅分析标准样品,并且能够同时满足真实应用场景的分析需求,是分析仪器和化学测量的发展方向。应重视关键器件、关键工艺设计、关键测量用材料和关键部件的研制。用国产高端器件替代进口高端器件,研制出性能优良、且应用目标符合并满足国家战略布局的化学测量仪器设备。比如能替代APD、MPPC甚至PMT,有宽动态范围,成本低于进口相应器件,能长期稳定运行的光电探测器件和组件;能替代高端高价值、高运行费用的相对廉价的方法和技术,且具有可标准化的性质。其主要研究方向包括但不限于如下三方面。

(1) 发展基于新理论、新概念、新方法和新技术

的分析测试方法与仪器。包括高端分析方法的建立,如实现单细胞、单分子的测量等;在航空、航天、太空、深海、潜艇和其他极端条件下的分析测试;研究先进成像技术、活体分析、纳米技术的生物应用、医学应用及安全性问题等。

(2) 在基础前沿研究领域,存在较大的技术不确定性和不稳定性,与工程化技术的多学科集成交叉结合,不仅可为研究体系提供更确切的测量数据保障,也能为前沿创新性科技成果推广应用提供充足的技术基础。以深空探测分析仪器为例,科学仪器载荷是解决深空探测科学问题的核心工具,用于化学物质检测的质谱仪器在探测外星环境和寻求生命起源等任务中发挥重要作用。近年来,国外已陆续将色谱-质谱仪等多种科学仪器送至太空,覆盖从高空轨道器到地表着陆器和巡游车的全方位测量,取得了一系列突破性进展。其中SAM质谱仪载荷首次检测到有机物存在于火星的证据。未来的空间站实验及星体环境探测任务中,使用小型串联质谱仪实施化学及生物分子的实时检测是空间科学探索的重要核心技术支撑。

(3) 围绕化学及生物医学、环境科学、食品安全、公共安全等相关领域,解决测量方法技术及仪器系统的关键问题,促进化学测量学的发展。如生化科学仪器及其关键部件,测序、组学、生物相互作用分析等测量仪器;食品安全、环境保护领域的光谱和色谱仪器及其关键部件;社会设施及公共安全与计量领域的特定监测设备与计量仪器等。

2.5 化学测量学的发展目标

2.5.1 发展布局

化学测量学的发展策略是:突出原创,厚积薄发;重视前瞻,淡化跟踪;需求导向,自主创新;宽松环境,鼓励交叉。

化学测量学的发展方向是:高灵敏度、高选择性、高信息量、快速、简便、原位、经济,以及分析仪器的微型化、自动化、数字化并向智能化、信息化纵深发展。

诸多科学领域的快速发展为化学测量学提供了广阔的发展空间和机遇,同时也提出了新的挑战。化学测量学的发展应以解决重大科学问题为核心,在解决问题的同时得到发展。要以生命科学、环境科学、食品

科学、材料科学、国家安全等诸多领域中的科学问题为对象,开展化学测量学的原理、方法、技术、仪器装置的创新研究和应用研究。

化学测量学的战略目标是:强化基础性、前瞻性、交叉性、变革性和实用性,实现精准测量。

2.5.2 化学测量学的优先研究领域

2021年起,基金委对各学科的申请代码进行了调整,从原来的三级代码^[8]调整为二级代码^[9],我们根据近几年化学测量学研究的前沿领域和国家需求,列出以下化学测量学的优先研究领域和重点研究方向。需要说明的是,这些领域和方向是动态和开放的,会适时适情调整。

(一) 谱学分析理论与方法

- (1) 功能光学探针与标记
- (2) 光学传感器与传感器阵列
- (3) 化学发光和生物发光新体系
- (4) 原子光谱与金属组学
- (5) 表面增强光谱技术

(二) 电分析化学

- (1) 功能化仿生界面的构筑与电化学传感
- (2) 纳米电分析化学
- (3) 电化学发光与成像新技术
- (4) 生命电分析化学
- (5) 可穿戴电化学传感与器件
- (6) 谱学电分析

(三) 色谱和微/纳流控

- (1) 样品处理方法
- (2) 新型分离介质
- (3) 联用技术与新型检测器
- (4) 微-纳尺度分离分析
- (5) 复杂体系多维度分析

(四) 化学成像

- (1) 高时空高分辨成像
- (2) 多模态、跨尺度成像
- (3) 单分子、单细胞、单颗粒成像
- (4) 活体成像

(五) 质谱分析

- (1) 新型离子化方法与技术
- (2) 高性能质量分析器
- (3) 同位素质谱技术与应用

(4) 质谱成像

(5) 临床质谱分析

(六) 核磁共振

(1) 核磁共振成像测量方法、新型造影剂构建及生物医学应用

(2) 生物大分子稳态和瞬态结构与动态相互作用

(3) 基于核磁共振的组学分析

(4) 面向细胞、组织和活体的跨尺度核磁共振测量学

(5) 大幅度提高灵敏度、分辨率和采样速度的核磁共振新原理、新技术与新方法

(七) 生命分析

- (1) 生物界面与生物分子间相互作用分析
- (2) 单细胞多组学分析
- (3) 活体分析
- (4) 疾病生物标志物分析
- (5) 食品安全与公共安全分析

(八) 环境分析

- (1) 复杂样品处理技术
- (2) 原位、实时及形态分析
- (3) 分析方法标准化与质量控制
- (4) 环境健康与毒理学分析
- (九) 化学测量仪器与装置创制

2.5.3 化学测量学的重点研究方向

- (1) 复杂体系分离分析
- (2) 活体分析
- (3) 分子识别与信号转换
- (4) 单分子、单细胞、单颗粒水平测量与分析
- (5) 仿生分析与智能器件
- (6) 极端条件下的化学测量
- (7) 多原理集成与联用分析方法
- (8) 微纳分析及应用
- (9) 新型分析仪器与装置
- (10) 柔性、可穿戴传感器件
- (11) 公共安全检测
- (12) 化学测量学的人工智能模态与方法
- (13) 多组学分析方法和技术
- (14) 临床医学分析
- (15) 能源与新材料分析
- (16) 基于大科学装置的化学测量

3 学科交叉的优先领域与国际合作

3.1 与化学科学部内部学科交叉研究的重点方向

3.1.1 与物理化学交叉

物理化学的新现象、新理论、分析测试新方法、新仪器与新软件等为化学测量学的发展带来新契机。探索量子调控、金属纳米超结构、界面电荷转移等信号增强机制,设计超高灵敏的光学成像探针、检测方法、检测装置;发展多维、多尺度、多参量分析表征新原理与新方法;突破超强超短激光的瓶颈问题,建立超精密微-纳加工技术、超快光谱和超快成像技术等。对复杂的能源、生命和复杂界面进行原位和工况状态下的表征,推动对这些体系的理解和优化设计界面结构和过程。探究局域场新理论,建立基于局域场调控的光学成像、化学反应、分子间弱相互作用等技术并将其应用于化学精准测量。

3.1.2 与合成化学交叉

合成化学是化学学科的基础和核心,为化学测量学提供了优异的分子工具;同时借助化学测量学以监测反应过程、解析分子结构、评价分子性能,实现高效、可控、精准的化学合成。通过理性设计、反应过程实时监测与调控,定向、可控合成功能导向新物质,提供高性能的光、电、磁、热性能的化学测量探针;建立高分子聚合过程的分子结构表征新技术,探究组份、结构和分子序列排布与高分子性能的关系,实现耐极端环境高性能聚合物的可控、定向合成;发展分子组装过程高分辨实时原位的表征手段,揭示组装中间体构象及组装体系动力学,实现组装过程的高效、精准、动态调控,为构筑多级复杂组装功能体系和探究生命体组装提供新思路、新方法和新技术;联合时间和空间分辨技术和瞬态研究方法,通过催化材料的精确设计和反应活性中间体的原位探测,揭示催化剂失活的反应机理,指导催化剂的合成和再生等。

3.1.3 与化学生物学交叉

化学测量学为化学生物学研究提供了有力的方法和技术,化学生物学的发展也极大地推动了化学测量学的发展。利用或发展新的光、电、磁、声等检测技术,从分子层面系统研究生物分子的结构、

时空动态变化、界面行为,建立高通量、高分辨、高灵敏的生物分析新原理与新技术,为揭示功能生物分子的构效关系、调控机制、协同关系、化学干预等提供理论依据。该领域重点研究方向包括发展单细胞/单分子实时、动态、精准测量技术,生物核磁、质谱、分子光谱,微纳芯片与多组学分析,生物纳米孔测序分析,多维度、超高时空分辨生物成像技术,多模态活体原位分析,智能成像与谱学数据分析技术等。

3.1.4 与材料化学交叉

化学测量学是材料化学迅猛发展的基石,为化学材料结构和性能表征及结构-性能相关性研究提供了多尺度、多维度的分析手段,包括从微观分子组成、微纳结构,到宏观热力学、动力学及光电磁热性能解析等。同时,新型化学材料(高分子、纳米粒子、生物材料)是化学测量学的策略与方法创新的源头。发展具有高选择性和高特异性的新型纳米孔材料制备及孔内修饰的新策略,建立纳米尺度单分子(核酸、蛋白等)分析、生物分子识别、电迁移等的研究平台;利用材料科学与工程创新发展新型纳米电极制备方法,搭建纳米电极精确控制和信号采集装置及设计相关软件,实现活体单细胞水平的电话性分子的高时空分辨、超灵敏、动态检测;发展微纳加工新方法,建立单细胞、单分子在线分析微装置。

3.2 与其他学科交叉研究的重点方向

多学科交叉研究既是化学测量学的学科发展之源,也是其最根本的学科特征。化学测量学在交叉研究领域具有举足轻重的作用,随着与包括物理学、生命科学、环境科学、地球科学、信息科学、医学等的交叉合作越发深入,其研究优势越发明显,极大地推动了这些学科领域的前沿探索研究。近年来化学测量学与其他学科交叉研究的重点方向具体如下。

3.2.1 与物理学交叉

物理学是化学测量学方法创新的源头学科,化学测量学的发展离不开物理学中的新原理、新概念和新装置。引入物理学新概念和新技术创建分析新方法,开展新仪器原理和装置的研究,并注重利用已建成的大

科学装置发展先进特别是工况条件下的分析方法. 发展基于量子光学的操纵新技术和精密测量新方法; 建立冷原子分子气体的高精度成像技术; 突破衍射极限的光学近场和远场成像方法与技术; 基于柔性材料的大变形、非线性本构关系研究, 发展高性能的柔性传感器等.

3.2.2 与生命科学交叉

发展生物筛选新技术、生物物质检测分析新方法; 建立生物大分子化学修饰的动态监测新技术; 发展单细胞的亚结构及生物大分子的跨尺度、系统分析新方法; 建立单细胞多组学分析平台; 发展药物筛选的高通量新方法, 药物代谢及其与生物分子相互作用的研究新技术; 发展复杂天然产物的高效分离、鉴定新方法; 建立食品中营养成分及有害物质快速检测的原理及技术.

3.2.3 与环境化学、地球化学等结合

环境污染物的毒性及危害取决于其环境过程, 污染物进入环境后, 通过迁移和转化与其他环境要素和物质发生化学的或物理的作用, 会发生浓度变化或形态转变等. 利用化学测量学手段建立环境污染物的采样新方法及定量新原理和技术, 实现污染物快速、准确检测, 发展污染物生物毒理分析新技术是该领域重要的研究方向. 另外, 建立地球地质的三维高分辨综合分析技术, 和矿物资源勘查技术及形成机理研究对地球观测和资源利用至关重要.

3.2.4 与数学和信息科学等交叉

化学测量学的新仪器开发及运行离不开算法和计算机软件控制. 通过软硬件的联合开发实现仪器精确、自动、远程控制, 实现低人力成本、高效及极端环境的数据采集; 发展多维、多尺度、多模态光学表征和跨层次信息整合以及单分子成像与动态检测技术; 发展多参数亚纳米级精度光学表面检测, 包括三维空间信息获取与光谱实时检测技术; 建立多维图像处理、重建数学建模与优化的新技术; 发展大数据的深度挖掘和智能处理, 及复杂高维度信息的合成与可视分析技术等; 建设各种重要谱学技术的谱库工程.

3.2.5 与基础及临床医学交叉

化学测量学为临床医学诊断提供强有力的原理和技术支撑, 整合化学测量新方法用于临床医学可实现灵敏、高效的疾病诊断和监测. 发展新发、突发疾病的快速诊断技术; 研发稳健的疾病床边诊断新技术及其微型化设备; 建立基于微纳芯片的单细胞综合分析平台, 包括单细胞获取、培养、刺激反馈、动态示踪、多组学分析等; 优化循环靶标富集及深度分析技术; 研制高深度、多模态成像平台, 实时动态分析疾病发生发展过程中分子、细胞器、细胞和组织变化; 发展柔性可穿戴微传感器, 实现人体健康监测和智能医疗等.

3.3 国际合作优先领域

鉴于化学测量学的前沿交叉特点, 应鼓励开展广泛的国际合作与交流. 国际交流旨在吸收先进的思想和捕捉新的研究趋势. 应减少一般性访问和高投入邀请国外专家, 逐步实现从“请进来”向“走出去”的战略转变. 应及时制定和完善相关政策, 鼓励我国研究人员积极参加国际学术交流, 参与国际组织并适当发声, 使我国的化学测量学做强做大, 做出自己的特色.

化学测量学开展国际合作的需求和优先领域包括:

- (1) 分析仪器与核心部件研制
- (2) 影像探针的开发与临床应用
- (3) 多尺度脑化学测量
- (4) 液体活检新技术开发与应用
- (5) 智能生物传感
- (6) 多维度单细胞检测
- (7) 纳米诊疗理论与应用
- (8) 食品安全在线、快速检测新方法
- (9) 化学测量学大数据AI分析
- (10) 多组学分析

4 实现中长期及“十四五”发展战略的保障 措施

化学测量学作为化学科学的研究支撑之一, 对于我国化学学科整体学术水平的提高具有现实意义. 近20年是我国化学测量学发展最为迅速的时期, 取得了

突出的成绩. 这一时期, 也是国际化学学科调整和变化最为剧烈的时期. 我国科技工作者乘势而为, 不断缩小了与国际领先水平的差距. “十四五”期间, 要继续贯彻基金委“鼓励探索、突出原创; 聚焦前沿, 独辟蹊径; 需求牵引, 突破瓶颈; 共性导向, 交叉融通”的方针, 严格强调学术道德和规范, 杜绝学术腐败, 遏制学术失范, 不断提高我国化学测量学的研究水平.

4.1 目前我国化学测量学研究领域比较明显的共性问题

(1) 需进一步加强重大原创性研究. 与国际同行比较, 我国化学测量学发表的论文数和被引用数已经稳居世界前列, 但鲜有突出的、国际引领性的原创成果, 在新概念、新仪器、新方法、新关键应用上产生的重要成果不足. 化学测量学应继续避免内容同质化及跟风 and 重复性的研究, 避免单纯追求论文的数量和所发表期刊的影响因子.

(2) 需进一步提高化学测量学仪器与器件研究水平. 化学学科的发展离不开高水平的仪器设备及器件研制, 仪器和器件的研制一直是化学测量学的基础和优势. 目前, 我国还没有投入足够的力量从事仪器与器件的研究, 大量的工作还是依靠商品化设备的常规功能, 或者是简单地拼装商品化仪器, 很少从原理上进行仪器的创新研究. 应从根本上加强对高水平原创性研究工作的支持, 保持化学测量学的学科特色和优势, 推动学科的持续发展.

(3) 化学测量学利用测量手段解决化学的关键问题, 应做到“顶天”或“立地”, 冲击化学学科的根本问题, 触及知识前沿和科学极限, 或立足于需求, 为解决实际瓶颈问题提供科学的应用方法.

(4) 同其他学科和化学其他分支的融合尚需进一步深入. 在鼓励交叉融通的大背景下, 化学测量学研究与生命科学、环境科学、材料科学、能源科学、纳米科技等热点领域相结合, 体现了化学测量学的基础性和实用性. 化学测量学不应停留在常规方法的应用或对已有方法的改进, 应从根本原理出发进行深入地合作, 提出新的原理, 解决其他学科难题.

4.2 现存问题的可能原因和可能的解决方案

(1) 学术评价方式单一, 学术研究的质量亟待提

高. 在过去40年中, 我国化学测量学相关领域的发展突飞猛进, 培养和造就了一大批科学研究人员, 形成了完整的教育体系, 成就斐然. 但随着科学研究的深入和学科体系的进一步完善, 化学测量学的研究, 从基础理论出发, 直至日常生活的应用, 针对不同内容、不同场景都可以找到重要的科学问题, 所展示的方式是多方面、多层次的. 用一个简单的评价方式或标准予以排序, 会逐渐导致同质化的形成, 不利于多方位的创新.

(2) 人才培养期待新生力量. 在各种人才项目的支持下, 人才发展成绩可喜, 人才水平大大提高. 除现有的人才项目外, 对年轻科学家的扶持和支持还应进一步加强, 年龄结构还需要优化, 不断创造一个适合年轻科研力量脱颖而出的公平、合作、竞争机制, 提升总体科研能力和水平. 要大力加强研究生教育, 培养高水平的研究生, 为经济社会发展不断输送一批理论学术过硬、应用创新过硬的实用型科研人才. 应在有条件的高校中, 有针对性地开设分析仪器专业. 同时加强科普工作, 提升公众对化学测量学和化学的了解和认知, 不断吸引更多的青少年学习相关知识, 营造良好的社会学习氛围.

(3) 化学测量学是化学的核心组成部分, 应鼓励对关键科学问题的研究. 目前, 化学测量学领域尚无基础科学中心和重大研究计划项目, 重点国际合作项目也较少. 化学测量学通常作为基础科学的研究工具, 为其他领域的科学问题提供解决方案. 应鼓励学科内的科研人员拓宽学术视野, 积极应对化学测量学面临的更复杂的化学样品、更微量的化学分析和更精准的化学测量的时代挑战, 发展真正有价值的新原理、新理论、新方法和新技术, 提升我国在该研究领域的核心竞争力.

(4) 对化学测量学直接相关的关键器件、关键部件和关键材料的研究, 要予以重视和支持. 创新仪器研制方面, 严重依赖商用科学仪器、独特性分析仪器和核心技术方法发展不足、高端新分析仪器研发队伍相对薄弱等是目前发展中存在的问题. 科学仪器的研制应该是科学问题驱动的, 必须是重要科学问题与新仪器创制相结合, 摆脱简单的拼装和“项目-论文-结题”的套路, 鼓励科学家提高认识, 注重高端且独特的新科学仪器的创制.

致谢 在国家自然科学基金委员会党组的统一部署和国家自然科学基金委员会化学科学部的领导下, 我们广泛听取相关领域专家学者的意见建议, 认真组织起草了化学测量学“十四五”及中长期发展规划, 数十位专家参与了讨论、撰写和修改, 如陈洪渊、汪尔康、董绍俊、谭蔚泓、李景虹、樊春海、方晓红、李剑锋、龙亿涛、孙育杰、张晓兵、关亚风、牛利、杨朝勇、任斌、鞠焜先、马会民、金长文、王铁、汪乐余、聂宗秀、刘倩等, 由于篇幅所限, 名字就不一一列出了, 我们谨向参与讨论和起草工作的所有人员表示诚挚的谢意! 向提出意见建议、亲自撰写、审读规划草案的所有专家学者表示诚挚的感谢!

参考文献

- 1 Li J. *Bull Nat Nat Sci Found China*, 2018, 32: 345–350 (in Chinese) [李静海. 中国科学基金, 2018, 32: 345–350]
- 2 Zhang G, Fu X, Zheng Q, Chen Y. *Sci Sin Chim*, 2020, 50: 681–686 [张国俊, 付雪峰, 郑企雨, 陈拥军. 中国科学: 化学, 2020, 50: 681–686]
- 3 Xi J. Chinese President Xi Jinping's speech at the scientists' symposium. Beijing, 2020 (in Chinese). http://www.qsttheory.cn/yaowen/2020-09/11/c_1126484063.htm [习近平. 习近平主持召开科学家座谈会上的讲话. 北京, 2020. http://www.qsttheory.cn/yaowen/2020-09/11/c_1126484063.htm]
- 4 Wang C, Qu G, Chen Y. *Chin Sci Bull*, 2020, 65: 2321–2325 [王春霞, 曲广波, 陈拥军. 科学通报, 2020, 65: 2321–2325]
- 5 Pang X, Ren L, Wu S, Ma W, Yang J, Di L, Li J, Xiao Y, Kang L, Du S, Du J, Wang J, Li G, Zhai S, Chen L, Zhou W, Lai S, Gao L, Pan Y, Wang Q, Li M, Wang J, Huang Y, Wang J. *Natl Sci Rev*, 2020, 7: 1861–1864
- 6 Gao L, Zhuang J, Nie L, Zhang J, Zhang Y, Gu N, Wang T, Feng J, Yang D, Perrett S, Yan X. *Nat Nanotech*, 2007, 2: 577–583
- 7 Zhuang QK, Liu HW, Chen HY. *Frontier and Prospect of Analytical Chemistry* (in Chinese). Beijing: Science Press, 2012 [庄乾坤, 刘虎威, 陈洪渊. 分析化学学科前沿与展望. 北京: 科学出版社, 2012]
- 8 National Natural Science Foundation of China. *National Natural Science Found Guide to Programs* (in Chinese). Beijing: Science Press, 2020. [国家自然科学基金委员会. 国家自然科学基金项目指南. 北京: 科学出版社, 2020]
- 9 National Natural Science Foundation of China. *National Natural Science Found Guide to Programs* (in Chinese). Beijing: Science Press, 2021 [国家自然科学基金委员会. 国家自然科学基金项目指南. 北京: 科学出版社, 2021]

The 14th Five-Year Plan of the National Natural Science Foundation of China for chemical measurement science

Chunxia Wang^{1*}, Lanqun Mao², Yanyi Huang³, Yongjun Chen⁴

¹ Department of Chemical Sciences, National Natural Science Foundation of China, Beijing 100085, China

² College of Chemistry, Beijing Normal University, Beijing 100875, China

³ College of Chemistry and Molecular Engineering, Peking University, Beijing 100871, China

⁴ Department of Interdisciplinary Sciences, National Natural Science Foundation of China, Beijing 100085, China

*Corresponding author (email: cxwang@nsfc.gov.cn)

Abstract: Chemical measurement science refers to the measurement science, methods and technology of chemistry. It is one of the earliest and most important branches of chemistry. The basic task of chemical measurement science is to obtain information on the composition, distribution, structure and property of chemical substances and their spatio-temporal changes, and to provide methods and supports for other related disciplines. This article introduces the 14th Five-Year Plan & medium- and long-term development strategies of Department of Chemical Sciences, National Natural Science Foundation of China for chemical measurement science, for the purpose of providing guidelines for researchers, educators, and students working in this field.

Keywords: National Natural Science Foundation of China, chemical measurement science, strategic development, research fields

doi: [10.1360/SSC-2021-0061](https://doi.org/10.1360/SSC-2021-0061)