

# 结构与功能导向的新物质创制

新物质创制尤其是功能新物质的创制是现代文明社会的物质基础,也是经济社会、国家安全、科学技术发展和进步的源动力。各国政府和科学家都致力于研究具有各种特殊功能与结构的新物质。功能新物质创制能力和水平,是国家核心竞争力的标志,是创新型国家的战略高地,急需整合资源、集中优势、协同攻关,实现创新跨越发展。

## 1 立项背景和依据

(1) 新物质创制彻底改变了人类生活方式。目前经 CAS (美国化学文摘社) 登记的化合物超过了 1 亿个,其中绝大部分是通过化学合成获得,反映出合成化学在创造新物质方面的强大生命力和无限创造力,同时也极大地满足了人类生存和社会进步的物质需求,体现在:

(1) 提高人类生活水平,如合成纤维、合成塑料、合成橡胶等影响了现代生活;(2) 保障人类粮食安全,如合成氨、合成农药等提高了粮食产量;(3) 解决人类健康问题,如抗生素、大量新药物的合成控制了疾病,延长了人类寿命,提升了人类的健康水平;(4) 新技术的先导和基础,如硅半导体材料和光纤等的发明,奠定了电子信息、高速计算、人工智能、网络等信息时代的物质基础。与此同时,新物质创制催生了新技术、新材料和新产品,构筑了新一代产业链。例如,全球超过 90% 的化学品是通过催化过程生产出来的。全球催化剂及其再生市场在 2013 年和 2014 年分别达到 232 亿和 246 亿美元。其中,新鲜催化剂门类将从 2014 年的 205 亿美元增

至 2019 年的 250 亿美元,年均复合增长率为 4.0%。新物质创制是多学科交叉突破的引擎。徐光宪先生指出,作为 20 世纪六大发明的信息技术、生物技术、核科学与核武器技术、航空航天与导弹技术、激光技术和纳米技术,无不需化学合成的新材料,如果没有化学合成技术,上述六大技术根本无法实现。

(2) 新物质创制是科学卓越的高地。诺贝尔化学奖近半数授予新物质的发现和创制研究,近 10 年来诺贝尔化学奖 4 次授予新物质研究成果,足以说明新物质创制的理论和实验研究在促进科技进步和社会生产力发展中扮演着重要角色。新物质创制的研究既有科学家基于大量不断尝试实现特定的合成目标,如 1918 年诺贝尔化学奖授予 Haber 发现的合成氨催化剂;也有瞄准已知特定结构的化学合成,如 1965 年诺贝尔化学奖授予 Woodward 在天然有机化合物结构和合成方面的研究贡献;还有围绕特定功能需求的化学合成,如 2008 年诺贝尔化学奖授予 Tsien 等发现和改进绿色荧光蛋白的发光性能。

(3) 开展功能导向的结构设计和结构导向的精准合成,实现新物质精准创制。虽然目前经 CAS 登记化合物超过了 1 亿个,但具有明确功能应用的仍然十分有限,表明人们驾驭特定功能物质的创制能力有限,指导特定功能物质的创制理论缺乏。唐有祺先生提出的化学核心任务之一是揭示组成-结构-性能之间的关系和有关规律,以利于设计分子或结构,据以创造具有预期特色的新物质;同时,徐光宪先生指出“结构和性能的定量关系”是 21 世纪化学的四大难题之一;诺贝尔化学奖获得

者 Noyori 指出，化学家需要为实现“完美的反应化学”而努力，即以 100% 的选择性和 100% 的收率只生成需要的产物而没有废物产生。因此，必须开展功能导向的结构设计和结构导向的精准合成，以实现“结构和功能双驱动的新物质精准创制”这一最终目标。

（4）加强结构与功能新物质创制研究，实现化学大国到化学强国跨越。针对上述目标，美、欧、日等国家和地区积极采用政府引导方式，调动和整合科研院校和企业的力量协同攻关，意欲缩短新物质创制和转化的周期，抢占国际新物质创制的制高点。我国同样高度重视并支持新物质创制研究，设立了大量与新物质创制密切相关的科研项目，包括国家科技部的“973”计划、国家自然科学基金委重大研究计划、中科院重要方向项目，取得了较为丰硕的成果。从 2008 年开始，我国化学领域的论文发表量跃居世界第一位，但影响力与欧美发达国家相比仍有相当的差距。这一现状就源于新物质的创制、新现象和新功能的发现、原创性理论和方法的开拓等方面有待于突破，因此加强结构与功能导向的新物质创制研究，是实现我国从化学大国到化学强国创新跨越的必由之路。

（5）“结构与功能导向的新物质创制”先导专项应运而生。2016 年 10 月 29 日，中科院正式启动了“结构与功能导向的新物质创制”战略性先导科技专项（B 类），以中科院上海有机化学所和中科院福建物质结构所为依托单位，首席科学家由洪茂椿院士和丁奎岭院士担任。研究团队涵盖了化学、物理、材料、生物等不同学科领域的优势科研人才，包括中科院院士 6 人，“973”首席科学家 5 人，“杰青”32 人，基金委创新群体 7 个，中科院“百人计划”和“青千”71 人次。

## 2 拟解决的科学问题

### 2.1 两大科学问题

功能导向的结构设计和结构导向的精准合成已经成为现阶段新物质创制的研究重点。本专项拟针对以下两

个重大科学问题开展研究。

（1）如何实现物质特定功能的结构设计？着重关注结构-性能的关系，揭示功能基元的微观结构和性质以及功能基元间的效应协同关系和规律。

（2）如何实现物质特定结构的定向合成？着重关注结构-合成的规律，揭示基于功能基元的化学反应电子转移、原子迁移、能量转化机制，以及三者之间的效应协同。

### 2.2 三大研究内容

围绕上述科学问题，本专项拟采用功能基元的研究策略（图 1），发展功能基元模块化化学合成方法，针对无机、有机和无机-有机杂化化合物，开展光电、催化等功能导向的结构设计和结构导向的定向合成，主要研究内容包括以下 3 方面。

（1）无机化合物结构设计与创制。基于光电功能基元的无机化合物的结构设计与创制，根据功能基元响应光电场产生的电子极化、电子跃迁、离子极化的作用模式，建立无机光电功能基元模型，实现功能基元结构设计和功能基元效应协同，并以功能基元为基础进行模块无机合成，实现光电功能无机新物质的创制。

（2）有机分子精准合成。基于功能基元催化的有机分子精准合成，针对医药、材料等领域中功能有机新物质的创制，基于有机催化功能基元，发展单元反应、创制催化体系、设计合成策略，探索有机分子结构与反应行为的协同作用机制，揭示分子结构与功能的定性定量关系，实现功能分子高效、简洁、环境友好的精准合成。



图1 “结构与功能导向的新物质创制”先导专项提出的创新思想：功能基元理论

(3) 功能无机-有机杂化化合物的合成。基于效应协同的无机-有机杂化化合物的定向合成与组装,在无机光电功能基元和有机催化功能基元研究基础上,探索功能杂化化合物中无机和有机功能基元优势互补的关键结构因素,以及电子转移和能量转换的效应协同本质,建立无机与有机功能基元杂化组装新方法,定向合成高效活化转化和光电转换功能的无机-有机杂化化合物。

### 3 预期成果

专项将聚焦无机、有机和无机-有机杂化功能物质创制前沿领域的挑战性问题,集科技攻关、队伍和平台建设于一体,注重多学科交叉和协同攻关。

(1) 瞄准“结构和功能双驱动的新物质精准创制”的关键科学目标,协同攻关,在特定结构与功能的新物质创制领域取得重大突破,率先在国际上创建功能基元理论体系及数据库应用平台,创建国际通用、知名的物质创制新反应,发现若干个对学科产生重大影响的新现

象,在2—3个方向引领国际新物质创制的发展。

(2) 瞄准国家经济发展、国家安全建设、民生保障等领域发展前沿,创制拥有自主知识产权的功能新物质,催生变革性技术。1—2个具有国际重要影响力的“中国牌”光电晶体,实现新波段激光应用;3—5个优势催化剂体系,实现二氧化碳综合利用、烃类高效转化,获得2—3个临床前潜在药物分子、含氟功能物质;4—6个低成本和高转换效率、高效小分子活化转化功能的无机-有机杂化化合物,2—3个高效稀土/过渡金属/有机杂化发光物质,组装低衰减速率、长寿命的稀土 OLED 器件。

通过本专项的成功实施,将培养一批功能新物质创制领域顶尖的科学家;提升我国功能新物质创制的能力和水平,变革当今化学与材料研究的方式,推动学科发展,满足国家重大需求。

(依托单位:中科院上海有机化学所、  
中科院福建物质结构所)