

- 3 戴乾圜. 双区理论——致瘤机理和致癌剂的非经验定量结构生理效应关系. 北京: 科学出版社, 2000
- 4 Pei S, et al. The cross-linking ability between DNA double strands as a new method for the identification of carcinogens, *Recent Adv of Chem and Mol Biol of Cancer Res.* Dai Qianhuan, et al. eds., Beijing/Springer-Verlag, Heidelberg: Science Press, 1993. 111
- 5 戴乾圜, 等. 化学致癌作用是一种 DNA 股间交联. *科学通报*, 1999, 44(24): 2624
- 6 戴乾圜, 等. 雌激素诱发 DNA 股间交联及其致癌和促癌协同作用. *科学通报*, 2000, 45(15): 1623
- 7 戴乾圜, 等. 石棉借诱发 DNA 股间互补碱基交联而启动癌变, *科学通报*, 2001, 46(20): 1695
- 8 戴乾圜, 等. 甲基、烷基、环戊并和环己并多环芳烃以及胆蒽系的定量结构致癌活性关系. *中国科学, B 辑*, 1983, 8: 716
- 9 Kohn K W. DNA filter elution: A window on DNA damage in mammalian cells. *BioEssays*, 1996, 18(6): 505
- 10 Miller J. The metabolism of xenobiotics to reactive electrophiles in chemical carcinogenesis and mutagenesis: A collaboration with Elizabeth Cavert Miller and our associates. *Drug Metab Rev*, 1998, 30(4): 645
- 11 Lambooy J P, et al. 4-Dimethylaminoazobenzenes: Carcinogenicities and reductive cleavage by microsomal azoreductase. *Chem-Biol Interaction*, 1985, 53(1~2): 107
- 12 Gupta P K, et al. Induction of mutations by N-acetoxy-N-acetyl-2-aminofluorene modified M13 viral DNA. *Carcinogenesis*, 1991, 12: 819
- 13 Beland F A, et al. NMR structural studies of a 15-mer DNA duplex from a ras protooncogene modified with the carcinogen 2-aminofluorene: Conformational heterogeneity. *Biochem*, 1994, 33: 1373
- 14 Refolo L M, et al. Mechanisms of frameshift mutagenesis by aflatoxin B₁-2, 3-dichloride. *J Mol Biol*, 1987, 193: 609

“分子反应动力学几个前沿问题的研究”通过结题验收

国家自然科学基金委员会化学科学部于 2003 年 3 月在北京召开了由中国科学院大连化学物理研究所韩克利研究员主持的国家自然科学基金项目“分子反应动力学几个前沿问题的研究”结题验收会。

评审专家组在听取了项目结题报告的基础上, 经认真讨论, 对项目取得的成绩给予了高度的评价, 认为该项目选题前沿、成果丰硕、富于创新, 其内容具有重要学术意义和继续深入研究的价值。

该项目主要围绕化学反应的立体效应、离子速度成像、以及单分子检测等问题进行了深入的研究, 主要内容和成果如下:

(1) 在立体反应动力学方面, 针对一些反应体系, 研究了化学反应中的矢量相关问题. 在理论上, 推导出了激光诱导荧光方法确定对称陀螺分子转动取向的公式, 用经典轨线和含时波包方法研究了势能面对反应产物取向的影响. 在实验上, 利用泵浦-探测技术研究了亚硝酸甲酯、亚硝基苯、硝基苯等化合物的光解动力学, 给出了光解碎片的振动分布及转动分布及转动取向, 尤其是应用自己推导出的理论公式和实验测量结果成功地给出了对称陀螺物种甲氧基的转动取向因子. 还用激光和分子束技术研究了激发态钙原子与溴乙烷、溴丙烷反应中, 钙原子轨道取向对产物转动取向的影响, 并利用经典轨线计算对实验结果进行了合理的解释。

(2) 在离子速度成像方面, 完成了离子速度成像仪和光电子能谱装置的改进和完善. 改造后的成像装置不仅提高了离子速度成像的性能, 而且兼有光电子成像的功能. 使用多光子电离-离子速度成像方法研究了叠氮酸、硫化氢、乙硫醇、丙硫醇和二碘甲烷等分子的光解动力学, 发现了该类分子光解产物的转动分布规律. 利用本实验室自行研制的飞秒激光系统和飞行时间质谱仪, 着手研究了若干小分子激发态的动力学。

(3) 在单分子检测方面, 建成一套单分子光学检测实验装置, 观测到单个典型生物分子在溶液内和表面上的行为. 成功地获得了单个蓝藻细胞的吸收光谱, 发现在蓝藻细胞分化为异型胞的过程中藻胆体被降解, 而光系统 II 的蛋白则未被破坏. 观察到分子自组装的纳米线和磷脂膜的原子力成像. 发明了发卡形分子设计与表面电位控制相结合实现单碱基不同的基因片段识别方法, 具有灵敏、廉价、特异性好的优点, 预期具有重要的应用前景。

(供稿: 杨俊林)