

·成果简介·

# “有序高级结构分子聚集体的结构、构筑与性能研究”成果介绍

董建华<sup>1</sup> 李会玲<sup>2</sup>

(1 国家自然科学基金委员会化学科学部,北京 100085; 2 中国科学院化学研究所,北京 100080)

[关键词] 重大项目,有序高级结构分子聚集体,自然科学基金成果

国家自然科学基金“九五”重大项目“有序高级结构分子聚集体的结构、构筑与性能研究”于 2003 年 9 月 8 日在京通过专家组验收。专家组对项目的总体评价为特优,认为项目组研究人员经过 4 年的工作,达到了总体研究目标,取得了高水平的研究成果,培养了一批研究人才,圆满完成了研究任务。

本项目共分为 8 个子课题,前两个子课题偏重理论研究,后 6 个课题分别以高聚物、小分子组装单元、生物分子、以及表面聚集为对象,开展实验研究,项目负责人是中国科学院理化技术研究所的刘新厚和北京大学的宛新华教授,承担单位包括中国科学院化学研究所、中国科学院理化技术研究所、北京大学、复旦大学、南开大学、吉林大学、北京师范大学和北京工业大学等单位。从理论研究和实验研究两个方面对有序高级结构分子聚集体的结构、性能以及其与分子间弱相互作用的协同效应之间的关系、构筑方法与过程以及高级结构与宏观性质的联系进行了研究,取得了一系列开创性的重要的研究成果。揭示了一些新的科学现象并提出了新的理论方法用于解释未知的实验现象。同时对具有重要应用背景的材料与构筑过程也进行了深入的研究。分别在理论和实验研究方面取得了较大的进展,得到了一批具有理论意义和具有潜在应用背景的研究成果。代表性成果有:

## 1 理论计算模拟

(1)发现多肽纳米管的自组装过程的主要动力来自氢键,肽键中 N 原子的取代将直接影响多肽纳米管的自组装过程和形成的高级结构的稳定性。进

一步揭示了氢键体系存在着超加合效应,从理论上解释氢键网络的协同性和稳定性;(2)发展及完善了分子对接、自由能计算、介观动力学参数化等计算机模拟方法。在分子对接方法中提出了新的几何匹配判别函数,发展了遗传算法与 TABU 搜索结合的聚集体结构优化方法。在自由能计算方法中扩展 LIE 方法,在 MM/PBSA 方法中增加了溶剂效应,并计算了 DNA 链间的结合自由能。

## 2 高级有序结构构筑单元

具有特定化学组成、化学结构和立体结构的各种分子构筑单元如:(1)嵌段共聚物:设计、合成了刚柔嵌段共聚物、含糖两亲性嵌段共聚物、线团-刚棒-树枝嵌段低聚物;(2)树枝状高分子:表面带正或负电荷的不同代数的树枝状分子;(3)双头基两亲分子;(4)液晶高分子和氢键复合型高分子;(5)生物分子如脂质材料作为细胞膜仿生材料,以胰岛素为代表性药物,DNA;(6)硒杂、氮杂等原子桥连环糊精、具有不同空穴尺寸的硒、氮等杂原子冠状化合物、杯芳烃桥式双环糊精等。

## 3 高级有序结构

设计了一系列新型非典型两亲分子,探讨了这些分子通过分子间弱相互作用形成有序高级结构聚集体的规律,揭示了它们在形成有序高级结构时的基本规律和特征。系统研究了两亲分子混合体系中有有序聚集体的形成与转化,进行了嵌段共聚物、低聚物的二维、三维自组装。对不同层次有序高级结构分子聚集体之间的平衡、共存、转化的条件和规律以

国家自然科学基金重大项目。

本文于 2003 年 11 月 10 日收到。

及事件发生的顺序、信息反馈等取得了一些研究成果。

该项目实施期间,在国内外核心学术刊物上发表有关论文 339 篇,313 篇被 SCI 收录。其中影响因子 > 5.0 的 9 篇,影响因子 > 3.0 的 53 篇,影响因子 > 2.0 的 102 篇,完成专著 5 册。多篇论文是发表在化学领域最重要的学术期刊上,不少论文发表后受到国际同行的瞩目和引用。在本项目执行过程中,项目组中共有 40 余人次参加了多次国际会议,并有 8 人次在相关国际学术会议上做了特邀报告。在国际学术界取得了声誉。组织 2003 年第 10 届 LB 膜国际会议,子课题负责人刘鸣华研究员担任国际会议秘书长。项目组于 2001 年 10 月在北京主办了第 172 届香山科学会议,邀请了国际著名教授参加会

议,其主题为“功能超分子体系-材料科学和生命科学间的桥梁”。通过国际会议既了解到国际该领域的最新进展,又展示了基金成果,增强了国际交流与合作。培养了博士研究生 41 名,硕士生 38 名,通过项目的执行为我国在本领域的研究工作培养了一批青年研究骨干。

本项目的实施为我国在该领域的研究凝聚了一批优秀研究小组,选定了具有前沿性和挑战性的研究方向,取得了一批具有国际影响的重要结果,带动了国内相关研究的深入开展,推动了我国化学科学沿着世界上化学科学的主流方向发展,使我国在此领域研究水平大大提高并保持与国际上发达国家同步,为我国进一步开展本领域研究工作奠定了坚实的基础。

## INTRODUCTION ON THE MAJOR PROJECT OF NSFC ENTITLED“STRUCTURE, ARCHITECTURE AND PROPERTIES OF MOLECULAR AGGERAGATOR ORDERED SUPER-STRUCTURE

Dong Jianhua<sup>1</sup> Li Huiling<sup>2</sup>

(1 Department of Chemical Science, NSFC, Beijing 100085; 2 Institute of Chemistry, CAS, Beijing 100080)

**Key words** Major Project, ordered super-structure of molecular aggregator, achievements of natural science foundation

·资料·信息·

### 从废气中收获宝石

中国科学技术大学化学与材料学院陈乾旺教授领导的研究组在 440℃ 较温和的条件下成功地实现了从 CO<sub>2</sub> 到金刚石的逆转变。该项工作有重要的理论意义并蕴藏着巨大的经济价值。

长期以来,由于天然金刚石非常难得,极大地阻碍了金刚石的应用。自 1796 年以来,人类在金刚石人工合成方面经历了长达两个多世纪的不懈努力,尽管有不同的金刚石合成方法被报道,但由于存在着产品尺寸小,重复性低等原因,没能形成产业。地球里有大量 CO<sub>2</sub> 和碳酸盐,并且地球内部是还原性的(远古时还原性更强),陈乾旺教授领导的研究组认为天然金刚石很有可能来源于 CO<sub>2</sub> 在地球内部的还原。国家自然科学基金委员会经过评估后认为该思想创新性很强,值得探索,并于 2001 年给予资助。

经过一年多的研究,2002 年 10 月实验取得突破性进展,在 440℃ 条件下将二氧化碳还原成了大尺

寸金刚石,目前能生长 1.2 毫米的金刚石。最近他们又用碳酸盐代替 CO<sub>2</sub> 也取得了成功,一方面使工艺更加简化,另一方面为探索天然金刚石的起源提供了更多有价值的信息。目前,该工作已申请国际专利,有关论文已被美国 *J. Am. Chem. Soc.* 和德国 *Angewandte Chemie* 发表。

《英国独立报》以“源于废气中的宝石思想”为题报道了他们的结果。人类首次发现天然金刚石的印度则以“金刚石源于稀薄空气,不夸张!”为题也报道了该结果。另外, MegaStar, Ananova, Novice, 香港太阳报,凤凰卫视、俄罗斯、意大利和法国的媒体也都作了报道,美国硅谷的《新思想市场》评价该工作是“终身都能给予她的礼物:自己身体排出的气体做成的钻石。”

(化学科学部 陈荣 供稿)