

中国科学院获 2005 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

2005 年度国家科学技术奖授予中国科学院院士叶笃正、吴孟超国家最高科学技术奖, 国际科技合作奖 5 人, 奖励 314 项科技成果, 其中自然科学奖 38 项(一等奖空缺, 二等奖 38 项); 技术发明奖 40 项(一等奖 1 项, 二等奖 39 项); 科技进步奖 236 项(一等奖 18 项, 二等奖 218 项)。

我院作为第一完成单位(或第一完成人)获国家科技奖授奖项目 43 项, 其中自然科学奖二等奖 17 项, 技术发明奖二等奖 8 项, 科技进步奖二等奖 18 项。我院推荐的蒲慕明获 2005 年度国际科技合作奖。下面将我院获奖项目简要介绍如下(不包括专用项目):

国家最高科学技术奖



国家主席胡锦涛(中)为叶笃正院士(右)和吴孟超院士(左)颁国家最高科学技术奖

叶笃正

1916 年 2 月出生于天津。1940 年获清华大学理学学士学位, 1943 年获浙江大学理学硕士学位, 1948 年获美国芝加哥大学哲学博士。1950 回国, 历任中科院地球物理研究所、大气物理研究所研究员、所长。1981—1985 年任中国科学院副院长, 1985 年至今任中国科学院特邀顾问、大气物理研究所名誉所长。先后被选为中国科学院学部委员(院士)(1980 年), 芬兰科学院外籍院士(1981 年), 英国皇家气象学会荣誉会员(1982 年), 美国气象学会荣誉

* 收稿日期 2005 年 12 月 31 日

会员(1990 年)。

叶笃正院士在大气动力学、青藏高原气象学、东亚大气环流、全球变化科学、大气运动适应理论和阻塞高压等领域做出了开拓性的贡献,是我国现代气象学和全球变化科学的奠基人之一。1948 年创立了大气长波能量频散理论,证明了西风环流中的能量可按远大于风速的速度向下游传播,即“上游效应”,对现代大气长波的预报提供了理论基础,也对阻塞高压天气系统的生成、维持和移动给出一种动力学解释,长期保持了在这个研究方向上的领先地位。1957 年首先发现了冬季高原南北两侧的两支西风急流,并揭示了其对东亚大气环流和气候变化的重要作用,随后又率先提出了高原对大气夏季是热源、冬季是冷源,从而确立了热力作用和动力作用在高原气象研究中的同等重要的地位。他的奠基性发现和系统的理论研究开拓了一个科学研究领域——高原气象学,成为当代气象科学的一个重要研究方向。与合作者于 1953 年首先提出了东亚大气环流突变概念并展开了气候突变问题的研究,发现西风急流跳跃性北移、5—6 月间全球环流的突变以及 10 月的相反突变,揭示了急流突变对季风和雨带变化的影响,对提高我国天气和气候预报的水平提供了重要参考依据。

叶笃正院士是国际全球变化科学的少数几个主要倡导者和开拓者之一,在国际地圈-生物圈研究计划(IGBP)的建立和科学规划工作中发挥了重要作用。在气候变化与人类活动关系方面,他发展了“陆面记忆”科学概念,把人类活动所导致的陆面改变(如灌溉)与气候变化联系起来。与国际学术界几乎同时提出了对全球变化的适应问题并创立了有序人类活动研究的理论框架。他在气象学和全球变化科学上的理论贡献,被国际学术界公认并得到高度评价。为此,2003 年他被授予世界气象组织最高奖——第 48 届 IMO 奖。(详细报道见本刊 2003 年第 4 期 298 页)。

吴孟超

1922 年 8 月出生于福建省。1949 年毕业于同济大学医学院,获学士学位。1991 年当选为中国科学院院士。现为中国人民解放军第二军医大学东方肝胆外科医院院长、东方肝胆外科研究所所长;曾任第二军医大学副校长、中华医学会副会长、解放军医学科学技术委员会副主任等;12 次担任“国际肝炎肝癌会议”等重要学术会议的主席或共同主席。我国肝胆外科的开拓者和主要创史人之一。其主要科技成就如下:

(1)创立了肝脏外科的关键理论和技术体系。1958 年,在建立人体肝脏灌注腐蚀模型并进行详尽观察研究和外科实践的基础上,创造性地提出了“五叶四段”的解剖学理论;在动物实验和临床探索的基础上,建立了“常温下间歇肝门阻断”的肝脏止血技术;通过临床和肝脏生化研究发现了“正常和肝硬化肝脏术后生化代谢规律”,并据此提出了纠正肝癌术后常见的致命性生化代谢紊乱的新策略;率先成功施行了以中肝叶切除为代表的一系列标志性手术。以上述工作为基础,创立了独具特色的肝脏外科关键理论和技术,建立了中国肝脏外科的学科体系,并使之逐步发展、壮大。

(2)开辟了肝癌基础与临床研究的新领域。针对肝癌发现时晚期多、巨大且不能切除者居多的特点,提出“二期手术”的概念,即对巨大肝癌先经综合治疗,待肿瘤缩小后再行手术切除;针对肝癌术后复发多、但又缺乏有效治疗的特点,率先提出“肝癌复发再手术”的观点,显著延长了肝癌患者的生存时间;针对中国肝癌合并肝硬化多,术后极易导致肝功能衰

竭的特点,提出肝癌的局部根治性治疗策略,使肝癌外科的疗效和安全性得到有机统一。上述研究使肝癌术后5年生存率由上世纪60—70年代的16.0%,上升到80年代的30.6%和90年代以来的48.6%。组建了国际上规模最大的肝脏外科专业研究所,牵头指导了一系列具有国际先进水平的基础研究工作,研制了细胞融合和双特异性单抗修饰两种肿瘤疫苗,发明了携带抗癌基因的增殖性病毒载体等,研究结果发表于Science、Nature Med、Hepatology、Oncogene、Cancer Research等学术刊物。

(3)创建了世界上规模最大的肝脏疾病研究和诊疗中心,培养了大批高层次专业人才。他领导的学科规模从一个“三人研究小组”发展到目前的三级甲等专科医院和肝胆外科研究所,成为国际上规模最大的肝胆疾病诊疗中心和科研基地;设立吴孟超肝胆外科医学基金,奖励为中国肝胆外科事业做出卓越贡献的杰出人才和创新性研究;培养了大批高层次专门人才。通过他和同行们的共同努力,推动了国内外肝脏外科的发展,多数肝癌外科治疗的理论和技术原创于中国,使中国在该领域的研究和诊治水平居国际领先地位。

国家自然科学奖二等奖

微小晶体结构测定的电子晶体学研究

完成单位:中科院物理研究所

主要完成人:李方华、范海福、万正华、胡健军、汤栋等

上世纪70年代发展的高分辨电子显微学为测定微小晶体结构提供了一种新方法,补充了衍射方法之不足。可是前人的尝试法很有局限性,如需事先对待测结构有初步了解、晶体能耐电子辐照、不能得出全部原子的位置等。该项目提出两个新思想:一是把任意一幅显微像转换为晶体结构图像;二是结合高分辨电子显微像和电子衍射花样来提高分辨率,并通过电子显微学与衍射晶体学的交叉予以实现。主要成果包括:(1)建立了一个高分辨电子显微像衬度的新理论;(2)在该理论的支持下,把衍射晶体学中的多种分析方法,特别是直接法,引入到高分辨电子显微学中,建立了一套全新的电子晶体学图像处理技术,它是测定微小晶体结构的新方法,克服了前人方法的局限性,首次把像分辨率从0.2 nm提高到0.1 nm,从而能分辨出全部原子;(3)该技术已成功应用于多个无机氧化物新晶体的结构测定;(4)开发了专用可视化电子晶体学图像处理程序包。一方面丰富了电子晶体学的内容,开辟了衍射晶体学与显微学相结合的新领域,推进了学科的发展;另一方面为相关学科提供了测定新材料微小晶体结构的方法,是了解材料性能、结构和工艺之间关系,提高材料性能,探索高性能新材料的重要工具。

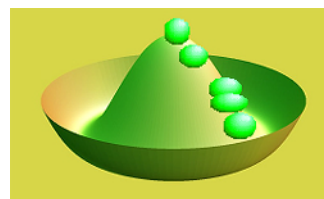
电荷-宇称对称性破坏和夸克-轻子味物理的理论研究

完成单位:中科院理论物理研究所

主要完成人:吴岳良

电荷共轭-宇称(CP)对称性涉及到空间和物质的基本对称性,一直是粒子物理研究的前沿领域。Cronin和Fitch因发现CP破坏而获诺贝尔奖。但他们发现的只是间接CP破坏,既可由弱作用引起,也可由超弱作用来解释。要区分它们,必须研究直接CP破坏。这不仅对

探索自然界新的作用力和理论有重要意义, 而且对弄清 CP 破坏的起源起着关键性的作用。自 1964 年起, 物理学家一直致力于对直接 CP 破坏的研究。该项目对探索了近 40 年的直接 CP 破坏给出更精确和自洽的理论预言, 得到欧洲核子中心 NA48 和美国费米实验室 KTeV 两个重要实验的证实。



CP对称性自发破缺

由此实验和理论首次确立了自然界中直接 CP 破坏的存在, 成功地检验了标准模型的 CP 破坏机制, 排除了超弱作用理论。同时解释了困扰粒子物理学界近 50 年的所谓 $\Delta I=1/2$ 规则。被国际同行公认为“北京组”工作, 得到国际上实验和理论主要专家的认可和引用。吴岳良对 CP 对称性自发破缺的双黑格斯二重态模型(S2HDM)中一些重要的物理唯象进行系统研究, 指出 S2HDM 可以成为 CP 破坏起源的一种新物理模型。在电荷-宇称对称性破坏和夸克-轻子味物理理论研究方面, 吴岳良作为主要完成人在国际核心刊物上发表了几十篇高水平论文, 总引用率达 1 000 余次。发表在 Phys. Rev. Lett. 上的论文单篇引用达 90 余次。

有毒难降解有机污染物光催化降解机理的研究

完成单位: 中科院化学研究所、香港中文大学

主要完成人: 赵进才、余济美、沈涛、马万红、陈春城

有毒难降解有机污染物引起的环境问题已成为国内外十分关注的重大问题。用现有环境技术很难处理这些污染物。国际上最受关注、应用潜力很大的去除方法是用环境友好的氧化剂(O_2 , H_2O_2 等)在催化剂和紫外光同时作用下的光催化技术, 最大的科学难题是只能利用紫外光和反应效率低。该项目的研究目标集中在利用可见光(或太阳光)光催化降解有毒有机污染物机理方面, 主要成果包括: (1)成功地在可见光照射下实现了染料污染物的 TiO_2 光催化有效降解和矿化, 提出了与紫外光光催化反应不同的染料污染物可见光光催化降解机理; (2)设计并合成了一系列新型铁氮配合物可见光光催化剂, 提出了可见光光催化活化 H_2O_2 及 O_2 降解并矿化有毒有机污染物的反应机理; (3)研制成功二元协同改性的 TiO_2 基可见光光催化剂, 在可见光照射下可有效地活化 O_2 降解多氯酚等有毒有机污染物, 对 TiO_2 表面和体相改性进行了系统而深入的研究。已在 Environ. Sci. Technol., J. Am. Chem. Soc., Angew. Chem.等 SCI 收录的国际核心刊物上发表论文 106 篇, 其中 SCI 影响因子 3.0 以上论文 48 篇。被 Science, Environ. Sci. Technol.等刊物 SCI 他引 1 087 次。应邀在 Topics in Catalysis 上撰写综述论文 1 篇。应邀成为 Environ. Sci. Technol.的编委。

超分子体系中的光诱导电子转移、能量传递和化学转换

完成单位: 中科院理化技术研究所

主要完成人: 佟振合、吴骊珠、张丽萍、陈彬

该项成果包括三部分: (1)微反应器控制的光化学反应的选择性。在众多提高反应的选择性方法中, 利用分子聚集体和纳米有序结构作为微反应器控制反应方向已显示出巨大潜力。该项目利用微反应器, 在高底物浓度条件下高产率地合成了一系列大环化合物; 在烯烃的光敏氧化反应中, 利用微反应器控制底物和敏化剂的分布, 按意愿单一地生成单重态氧氧化产物, 或单一地生成超氧负离子氧化产物; 利用微反应器合成了若干个在溶液中很难

合成的化合物。(2) 超分子体系中光诱导电子转移和能量传递。深入研究超分子体系中光诱导电子转移和能量传递的机制, 可以为理解生命过程中的信息传递和设计分子电子器件提供依据。三重态能量传递和电子转移要求给体和受体非常靠近, 否则, 这些过程不能发生。该项目设计了几个系列的用硬链段连接的给体-受体超分子化合物, 用光化学和光物理相结合的方法证实, 在给体-受体距离大于 20\AA 时, 电子转移和三重态能量传递仍能有效地进行, 发展了“通过化学键”进行电子转移和能量传递的理论。(3) 疏水和疏脂作用对光化学和光物理过程的影响。疏水和疏脂作用是分子间重要的相互作用。该项目用光化学和光物理方法为长链分子在有机-水混合溶剂中的聚集和自绕曲提供了一系列新证据; 提出和证实极性分子在非极性溶剂中受疏脂作用驱动也形成聚集体和自绕曲; 利用极性链和非极性链分别受疏脂和疏水作用发生自绕曲, 成功地合成了一系列大环化合物。上述结果在 SCI 收录的刊物上发表论文 100 余篇, 包括 *Acc. Chem. Res.* 1 篇(被译成日文转载), *J. Am. Chem. Soc.* 7 篇。论文被他人正面引用近 500 余次, 应邀在重要国际学术会议上做特邀和邀请报告 50 余次。

高等植物株型形成的分子基础

完成单位: 中科院遗传与发育研究所、中国水稻研究所

主要完成人: 李家洋、钱前、王永红、付志明、刘新仿

高等植物株型形成是一个基本的但十分复杂的生物学问题, 其调控机理一直是植物科学研究领域的热点和难点之一。该项目的成果包括: (1) 采用图位克隆法分离了水稻 MOC1 基因, 证明 MOC1 是分蘖芽形成及生长发育的关键调控因子, 为进一步阐明水稻分蘖的调控网络并进而应用于水稻等禾谷类作物超级品种的培育提供了重要的理论依据。同时, 利用实验室自主发展的正义/反义表达(SARE)系统, 获得了一批顶端优势受到影响的拟南芥突变体。目前, 两个参与顶端优势调控的重要基因 BUD1 和 BUD2 已被克隆。(2) 从植物中克隆了编码催化色氨酸合成途径的两个关键步骤酶的基因, 利用转基因技术, 创制出色氨酸与吲哚乙酸合成量改变的转基因植物。通过对这些转基因植物及色氨酸合成途径突变体中的色氨酸与吲哚乙酸含量的测定与分析, 初步确定了吲哚乙酸在模式植物拟南芥中的合成分支点, 提出了能解释不同实验室的不同研究结果的吲哚乙酸合成途径的分支途径模式。另外, 通过自主建立的 cDNA 阵列(基因芯片)体系, 鉴定出一批油菜素内酯的应答基因。(3) 利用 EMS 诱变的拟南芥突变体群体, 获得了一类新的细胞死亡突变体 mod1, 其特征为死亡细胞与活细胞镶嵌并存。该突变体是目前动植物中分离获得的唯一一个脂肪酸从头合成途径的突变体, 对于研究动植物脂肪酸代谢、调控以及生长发育具有重要意义。此外, 通过建立植物表达文库法获得了一批拟南芥突变体。上述成果已在 *Nature*、*The Plant Cell*、*The Plant Journal*、《中国科学》和《科学通报》等学术刊物上发表了一系列研究论文。

核糖体失活蛋白及核糖体 RNA 结构与功能的研究

完成单位: 中科院上海生命科学研究院生物化学与细胞生物学研究所

主要完成人: 刘望夷、张劲松、刘仁水、何文君、凌俊

核糖体失活蛋白(RIP)是一类植物毒蛋白。它在理论方面可用作研究核糖体 RNA 结构与功能的工具酶; 在应用方面可用作杀虫剂或制备免疫毒蛋白杀伤癌细胞和抗病毒感染

等。该项目从各种植物组织中筛选出并命名了 6 种不同的新 RIP。对其中一种香樟树种子的双链 RIP-辛纳毒蛋白进行了全面系统的研究,发现它专一作用于核糖体大亚基 RNA 上 S/R 结构域,脱去一个腺嘌呤,使核糖体失活;可杀伤癌细胞和某些昆虫幼虫;它在种子中的生理功能是一种储藏蛋白;测定了它的氨基酸序列和基因序列及糖肽结构,证明它可以水解超螺旋 DNA 上的腺苷酸,导致 DNA 解旋。该项目研究结果证明,核糖体 RNA 中 S/R 结构域在蛋白质合成中呈动态结构;核糖体经 RIP 作用后,S/R 结构域中出现的一个活泼醛基是使核糖体失活的重要原因。这个醛基被封闭后,核糖体的功能可大部分恢复;用人工合成的 S/R 结构域做实验证明延伸因子 2 确实与核糖体 RNA 相应的部位结合;用原子力显微镜(AFM)直接观察到了核糖体及其起始复合物中的生物大分子;从侧柏树种子中纯化出一种新的 RNase 型 RIP,它专一作用于某些真核细胞核糖体大亚基 RNA 中 C4453—A4454 之间的一个磷酸二酯键,导致核糖体失活。证明了这个新的结构域只能与延伸因子 1 结合,而不能与延伸因子 2 结合。该项目共发表论文 63 篇,57 篇被 SCI 收录,总影响因子为 150,其中 46 篇被他人引用 303 次。

哺乳动物有性和无性生殖的实验胚胎学研究

完成单位:中科院动物研究所

主要完成人:陈大元、孙青原、李光鹏、李劲松、朱子玉

该研究在有性生殖方面的成果包括:(1)依据微管和微丝组织和解聚的原理,证明了微丝在卵遗传物质运动中的动力作用,提出了分裂器的轴向决定卵裂方向,染色体的迁移和分裂器旋转依赖微丝存在的理论。(2)提出了受精后丝裂原活化的蛋白激酶(MAPK)灭活与原核形成有关的观点。(3)在带下受精中,首次发现了透明带内表面存在精子受体,并用 ZP3cDNA 探针证明,卵母细胞参与透明带的早期发生,为后来显微受精的研究和应用奠定了理论基础。(4)提出了单倍体的球形精子细胞带下受精后可以跨越变态直接形成雄原核,说明成熟精子的尾部只是为了保证自然状态下的受精,并非是受精本质所必需,为精子变态障碍的患者提供了希望,为动物遗传资源的保存提供了重要依据。(5)分裂器交换和生发泡置换的重构卵,受精后均获后代,该项研究可克服染色体非整倍性导致的不育症和提高后代的质量,均为世界首例。(6)内细胞团交换的成功,将为解决胎盘发育和信号传递等理论问题以及异种核移植提供了可能。在无性生殖方面的成果为:2002 年首次获得我国成年体细胞克隆牛存活群体,共 14 头,存活 5 头。理论研究发现克隆动物中线粒体的异质性。证明母源性卵子线粒体是体细胞克隆动物成活所必需的。2003 年在新疆和北京获得重复,获得成活体细胞克隆牛 15 头,证明我国的克隆研究逐步走向成熟。发表 SCI 收录论文 20 篇,其中 7 篇被引用 54 次。

气候系统模式、模拟及气候可预报性研究

完成单位:中科院大气物理研究所

主要完成人:曾庆存、王会军、林朝晖、周广庆、俞永强

该项目历经 20 余年,从气候动力学基础理论、模式研制和计算理论到数值预测实际应用,做出系统的重大创新成果,主要有:建立了具有我国独创性的完整的、完全协调的气候系统(大气、海洋、陆面)模式,证明其数学上的适定性;创立完全平方守恒格式;提出标准层

结扣除,完全克服计算不稳定性,且大大提高计算精度;最早提出并实现了有自由表面的大洋模式;率先建立了包含植被和各相水土的多孔介质陆面物理过程模式等。均得到国际数学和大气学界高度评价和采用。数值模拟结果被国际模式比较计划证实为有最好模拟季风能力的三个模式之一;气候变暖模拟三次被 IPCC(政府间气候变化委员会)科学报告采用,为政府间谈判提供了科学依据。在国际上最早所创立了季风雨量距平跨季度数值气候预测系统,与所建立的预测理论和方法一起,被气候研究领域最重要的国际计划(CLIVAR)科学报告所引用,推动了国际和国内短期气候预测理论研究和业务建立。该项目曾三次获中科院自然科学奖一等奖,预测方法和结果被我国国家气象、海洋和军事等部门业务应用。共发表 SCI 收录论文 103 篇,他人引用 494 次;发表 CSCD 收录论文 189 篇,他人引用 267 次。

黄土丘陵沟壑区土地利用与土壤侵蚀

完成单位:中科院生态环境研究中心、北京师范大学、中科院/教育部水土保持与生态环境研究中心、北京大学

主要完成人:傅伯杰、刘宝元、陈利顶、刘国彬、谢昆青

该项研究紧密结合地理学的研究前沿和国家生态环境建设的重大需求,系统研究了土地利用对土壤水分、土壤养分和土壤侵蚀过程的影响,科学发现与创新点如下:(1)研究发现了黄土丘陵沟壑区土地利用与土壤水分时空变化规律及主要驱动因子;建立了黄土丘陵坡地土壤水分空间分布模型,为土壤水分空间分布预测提供了定量方法;揭示了土地利用与生态过程的相互作用机理,提出了黄土丘陵坡地和小流域土地合理利用模式。(2)建立了陡坡土壤侵蚀模型,解决了国际上通用土壤侵蚀模型对陡坡侵蚀预报的不准确性问题,填补了国际上陡坡土壤侵蚀预报的空白。(3)将土地适宜性评价与生态过程相结合,发展了土地可持续利用评价的理论。创建了综合生态评价、经济评价和社会评价的集成方法,并已将此方法成功应用于黄土丘陵沟壑区的土地可持续利用评价与规划。该项研究将自然地理的描述和分类研究深化到过程研究,为自然地理综合研究做出了重要贡献,推动了我国景观生态学的发展。发表论文 203 篇,其中 SCI 收录论文 46 篇,出版著作 5 部。论著被国内外引用 1 084 次(其中他引 736 次)。

中国土壤系统分类研究

完成单位:中科院南京土壤研究所等 37 个单位

主要完成人:龚子同、雷文进、陈志诚、高以信、曹升赓、张甘霖、肖笃宁、李述刚等

土壤是人类赖以生存的自然资源。由于土壤是一个不均匀的连续体,分类难度大,世界上至今尚无统一的土壤分类。中国作为世界上土壤资源类型最为丰富的国家,因此创建一个立足中国、面向世界的土壤分类不仅可促进我国的农业持续发展和生态环境建设,而且也是对世界土壤科学的贡献。该项研究历经 20 年、有全国 37 个相关单位 200 多名土壤学家共同完成,成果主要有以下特点:(1)实现了我国土壤分类从定性向定量的跨越。建立了以诊断层和诊断特性为基础、以定量化为特点,既可与国际交流,又充分体现中国土壤特点的谱系式、可检索、全新的中国土壤系统分类。(2)创建了一系列我国特有的诊断层和诊断特性。如季风亚热带的低活性富铁层,干旱土的干旱表层、盐磐层,以及青藏高原的草毡表层,还有一系列人为土层。这样不但解决了我国土壤分类问题,而且被国外所借鉴。(3)在世

界上率先建立了人为土的分类体系。使纷乱复杂的人为土得以定量的区分和科学的表达。国际土壤分类委员会主席 H. Eswaran 指出:“人为土纲的建立是中国土壤系统分类重要创新之处。”中国人为土已被国际分类组织(WRB)全盘接受并成为其标准。

中国土壤系统分类全文已译成英文、日文,部分译成俄文,选入世界土壤分类专著,列入世界土壤百科全书,成为世界主流分类之一;在国内已进入 10 多本教科书,并被广泛引用,被称为是我国土壤分类发展历史上的里程碑。



中国土壤系统分类

典型化学污染物环境过程机制及生态效应

完成单位: 中科院生态环境研究中心、南京大学、南开大学、中科院动物研究所

主要完成人: 徐晓白、王连生、戴树桂、黄玉瑶

该项目属地球科学领域,研究了典型化学污染物在环境中的环境过程机制及多水平生态毒理效应,主要特色为:(1) 结合国家履行斯德哥尔摩国际公约需求,系统研究了持久性有机污染物和一批环境影响明确但尚未引起足够重视的系列化合物。在阐明了“六六六”热解时生成二噁英机理的基础上,发现了目前我国二噁英新的最大污染源。对有机锡的环境行为、多介质模型、分子毒理学效应以及生态效应,进行了细致的研究。(2)项目对象是多组份、多介质且不断演变的复杂体系,研究难度大,研究方法充分体现了多学科交叉的特点。(3)发展并应用三维-定量结构-活性关系(3D-QSAR)和量子化学模拟等 QSAR 方法,并创新性地建立了混合体系环境行为和生态毒性预测方法,成功地将多组分 QSAR 技术应用到混合体系环境行为的定量研究之中,为实现“预防污染战略”建立基础。项目发表 SCI 论文 160 余篇,被引用 580 余次;所著《典型化学污染物在环境中的变化及生态效应》一书被傅家谟院士评价为“系统地阐明了工作的科学理论和创新点,促进环境化学学科的发展,对经济和社会具有推动作用”。该项目的工作为争取人与自然协调、经济持续发展做出了贡献,为国家有关部门建立有关持久性有机污染物的监测和研究提供了坚实的基础和相关方法。

甲烷直接催化脱氢转化为芳烃和氢新反应的研究

完成单位: 中科院大连化学物理研究所

主要完成人: 徐奕德、谢茂松、包信和、林励吾、王林胜

甲烷是天然气和煤层气的主要组分。甲烷分子构型高度对称,是自然界中最为稳定的碳氢化合物之一。长期以来,甲烷直接催化转化制备高品质液体燃料和化学品,一直是化学研究的热点和前沿课题之一。该研究在 1993 年首先发现和报道了在无氧以及连续流动条件下甲烷在分子筛负载的金属催化剂上直接活化和转化为芳烃和氢的反应过程,开辟了一条甲烷直接高效转化的新途径;在自行设计的原位固体核磁反应系统(专利装置)中,第一次获得了分子筛 B 酸中心在高温催化反应中的动态变化规律,发现了 Mo/HZSM-5 催化剂在甲烷活化中的双功能特性,提出甲烷在多相催化中的酸助活化机理;在该反应的构效关系充分认识的基础上,成功发展了具有较高性能的 Mo/MCM-22 催化剂;提出并初步验证了甲烷无氧芳构化与临氧偶联反应的耦合过程,使甲烷的转化率和芳烃-收率分别达到

18%和 12%，催化剂的寿命超过 50 小时。该成果得到国内外同行的高度认可。自 1993—2003 年底，在国际杂志上发表论文 60 篇，他人引用 815 次。应邀在国际催化杂志上发表综述文章和国际系列会议做特邀报告。迄今为止，国内已有近 15 个研究团队相继进入该研究领域，研究成果引起了国内外相关化学企业的重视。

宇宙结构形成的数值模拟研究

完成单位：中科院上海天文台

主要完成人：景益鹏

该研究首次发现了小质量暗晕的成团性比 PS 理论的预言要强得多，引发了许多修改 PS 理论的研究，并提出了暗晕成团的精确公式，被广泛用于预言星系和暗物质的成团性质；首次提出了描述暗晕密集因子的对数正则分布公式，并被广泛用于预言星系的观测性质；发现暗晕的内部密度轮廓的幂指数在 -1.0 和 -1.5 之间，该工作已成为高精度研究暗晕结构的最有影响的三个工作之一；首次提出了描述暗晕内部物质分布的三轴椭球密度分布模型，并被广泛用于预言引力透镜、暗物质分布等多个研究领域；首次精确测量了星系对的速度弥散，结果被广泛用于检验星系形成模型，并得到星系红移巡天测量结果的支持；最早提出了构造星系相关函数的速度弥散的星系团低权重模型，并已发展为目前流行的暗晕星系占有数模型。该项目共在顶级期刊上发表 SCI 论文 60 篇，被他人 SCI 引用 1 260 次；其中 5 篇论文均已进入国际最有影响的 1% 的天文学论文。所提出的暗晕占有数模型方法和暗晕三轴椭球模型被国际权威人士誉为开创性和奠基性的工作。

碲镉汞薄膜的光电跃迁及红外焦平面材料器件研究

完成单位：中科院上海技术物理研究所

主要完成人：褚君浩、何力、李言谨、龚海梅、黄志明

该项目主要发现和创新点是：(1) 发现了碲镉汞带间跃迁本征吸收光谱和光学常数规律，提出吸收系数表达式、折射率表达式和器件响应截止波长表达式，建立了红外椭圆偏振光谱等多种光谱分析模型。(2) 发现了碲镉汞中重要杂质缺陷光跃迁、声子光跃迁和表面二维电子的磁光共振光跃迁，发现碲镉汞中各种载流子的迁移率分布。(3) 解决了碲镉汞薄膜红外焦平面材料器件设计、结构参数、电学参数、杂质缺陷、p-n 结制备等多项关键科学问题，在国际上继美国法国之后，研制成 1 024 × 1 元和 64 × 64 元碲镉汞红外焦平面列阵器件。其中 256 × 1 元红外焦平面模块已应用于实践 7 号科学卫星，获得清晰的红外图像，实现长线列红外焦平面的空间应用。该项目在国际刊物发表论文 36 篇，完成《窄禁带半导体物理学》专著，在国际会议做邀请报告 11 次，授权专利 8 项，他引 187 次。关于碲镉汞本征吸收光谱等 14 项结果，被写入了国际权威科学手册 Landolt-Börnstein(《科学技术中的数据 and 函数关系》)，作为碲镉汞研究的标准数据和表达式。美国碲镉汞物理化学国际会议主席评论该项目的研究水平为：“不仅赶上世界水平，而且在某些方面走在国际前列”。

分散元素矿床和低温矿床成矿作用

完成单位：中科院地球化学研究所、中科院广州地球化学研究所

主要完成人：涂光炽、高振敏、胡瑞忠、刘家军、赵振华等

中国的分散元素和低温成矿作用，在全球背景中很具特色，它们均主要集中发生在我

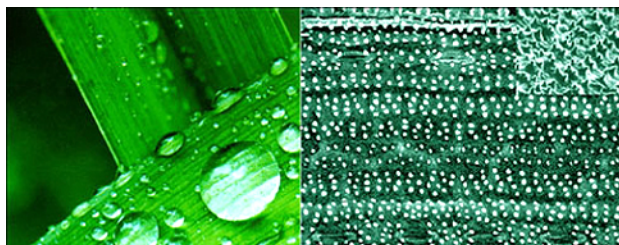
国西南地区。该项目采用矿床地质地球化学-实验模拟-计算模拟紧密结合的方法,联系中国西南地区地质条件的特殊性,进行了开拓性的综合研究,主要成果包括:(1)确立了分散元素可以形成矿床的理论体系,突破了分散元素不能形成矿床的传统观念;(2)揭示了矿床中的分散元素具有独立矿物、类质同像和吸附三种存在形式,发现了两种分散元素新矿物;(3)确定了分散元素矿床的分类、分散元素的成矿专属性 and 我国西南地区分散元素矿床集中出现的有利因素,并指出了分散元素矿床的找矿方向;(4)确立了我国西南地区存在大面积低温成矿域;初步揭示了这个面积之大、矿种之多、矿床组成和组合之复杂在世界上十分少见的大面积低温成矿域的形成背景、过程和机制;(5)将有机地球化学与无机地球化学融合,提出了油气形成过程可以促进金属成矿的理论;(6)确定了某些常被认为是中、高温才能成矿的“惰性”元素(Au、Ag、PGE、REE等),在低温条件下迁移和富集成矿的机理。该成果建立起了分散元素和低温成矿作用的理论体系,对矿床学和地球化学学科的发展做出了贡献。已出版专著 4 部,发表论文 304 篇。

具有特殊浸润性(超疏水/超亲水)的二元协同纳米界面材料的构筑

完成单位:中科院化学研究所

主要完成人:江雷、翟锦、宋延林、李玉良、朱道本

该项目从具有特殊表面性能的生物体出发,选择几种典型的生物体表面进行重点研究,揭示了生物表面特殊浸润性的机理:通过对荷叶表面微观结构的研究,其表面的微米/纳米结构与表面植物蜡的协同作用是引起自清洁性的关键;对水稻叶片表面微观结构的观察,说明表面



左图为水滴在水稻叶表面的各向异性;
右图为水稻叶表面的微观结构

微观结构的定向排列影响水滴的运动趋势;揭示水黽的稳定水上运动特性源于它腿部特殊的微/纳米结构和油脂的协同效应。受到以上研究结果的启发,仿生制备了具有纳米和微米结构的一维纳米材料,实现了一维纳米材料的构筑,研究其超疏水和超双疏的仿生性质;并成功制备了可控超疏水/超亲水可逆“开关”,即利用热响应性高分子和阵列氧化锌纳米结构分别实现了温度和紫外光控制下超亲水和超疏水之间的可逆转换。利用模板挤压法成功地将高分子材料,尤其是亲水性的高分子,制备成超疏水性纳米阵列薄膜;制备纳米结构碳膜,在全 pH 值范围内具有超疏水性;以管状多孔氧化铝为模板,实现大规模制备仿蝉翼的柱状超疏水高分子阵列薄膜;仿生制备聚合物超疏水类荷叶结构;将超疏水与超亲油这两个特殊的浸润性质相结合,制备了超亲油和超疏水兼具的网膜,实现了油水的分离。已发表 SCI 收录的论文 90 篇,授权专利 12 项,相关成果受到国际同行的重视,Adv. Mater. 主编邀请撰写相关的工作综述。可逆“开关”方面的研究结果分别被 Nature 和 Science 作为新闻和亮点给予报道。

单分子结构与电子态的理论和实验研究

完成单位: 中国科学技术大学

主要完成人: 侯建国、杨金龙、王海千、王兵、朱清时

扫描隧道显微术 (STM)

包括扫描隧道谱 (STS) 是研究单分子结构的有力工具。

虽然 STM 有很高的分辨率, 但其图像只反映分子电子态的空间分布, 不必然直接反映其几何结构。同时, 实验还受到衬底和针尖等因素的影响。

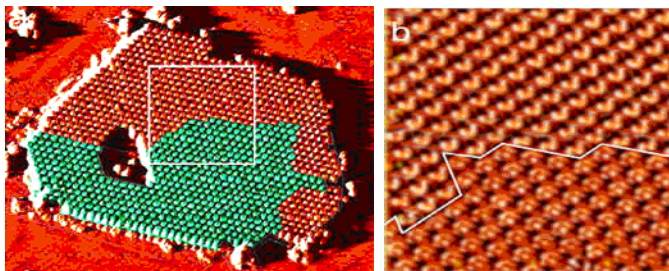


图 由 C60 分子的取向而引起的取向畴的 STM 图像

因此确定单分子的构型、取向、内部原子结构和电子态等是极具挑战性的课题。

围绕单分子结构与电子态的基本问题, 该研究工作包含相互连系的三个方面: (1) 精确控制实验条件, 从大量数据中总结获得高分辨 STM 图像和 STS 谱的规律, 结合理论计算, 发展出一套实验与理论相结合的对单分子结构进行高分辨表征的研究方法, 取得了系列的成果和突破。包括对 C60 分子取向畴的直接观察、C60 及硫醇分子吸附取向的确定等; (2) 控制单分子与小团簇的分立电子结构, 研究其在特定条件下的运输性质, 证实了纳米结的量子电容效应, 构造了单分子 Esaki 二极管, 发现了非晶化对金属纳米点量子限域效应的抑制等; (3) 在单分子结构与电子态相关的理论研究方面取得了重要的进展。

上述工作加深了对单分子和原子团簇的物理与化学本质及单分子器件的认识, 发现了一些新的效应与现象, 得到同行的关注。如 1999 年美国物理学会 (IOP) 为单分子吸附取向的研究成果发布了专题图片新闻, 并获得了一系列奖项。截至 2004 年 2 月, 已发表相关论文 44 篇, 其中在 Nature、Phys.Rev.Lett. 和 JACS 上 7 篇, 他人引用 232 次, 获准发明专利 1 项, 在包括美国物理学年会、美国材料学年会、国际真空学会年会等重要的国际会议上做邀请报告 15 次。