

# 2018年化学热点回眸

郑企雨

中国科学院化学研究所, 北京 100190

**摘要** 2018年, 化学学科在合成与催化、理论与机制、分析与测量等核心领域取得诸多突破性进展; 更重要的是, 化学作为一门传统学科, 在与生命、医学、材料、环境、能源等领域的交叉中焕发出新活力, 极大地拓展了自身的发展空间。本文选择一些代表性示例, 介绍了2018年化学在新分子创造、结构表征、催化合成、手性科学等方向的亮点工作, 评述了对化学生物学、机器学习在化学中的应用、材料与能源化学等交叉领域的典型成果。

**关键词** 化学; 2018年进展; 物质创造; 交叉前沿

化学是研究物质的组成与结构、反应与机制、性质与功能的科学, 化学通过创造新的分子改变世界。作为一门传统学科, 化学具有完备和严密的研究体系; 在新的世纪, 又与生命、医学、材料、环境、能源等领域密切交叉、相互渗透, 极大地拓展了自身发展空间。2018年, 化学继续在分子的创制、转化、理论、性质等方面取得重大进展, 同时机器学习等新技术给化学研究注入新的活力, 生命、能源等领域的科学问题也吸引了越来越多化学研究者的兴趣。

## 1 新分子创制

挑战分子合成的极限是化学家最乐此不疲的事。从简单的小分子到复杂的天然产物, 从超稳定的高温陶瓷到只能存在几飞秒的反应中间体, 从保障健康的药物到改变生活的材料等, 化学家发现、设计、合成了数以千万计分子。

分子创制除了功能导向外, 合成不同寻常的结构也受到科学界的青睐, 如配位数最高的络合物、最扭曲的芳香化合物、最长的单个分子等。2018年日本北海

道大学 Ishigaki 等<sup>[1]</sup>在最长的碳—碳单键上取得突破, 他们利用奇妙的大位阻取代基效应, 在新设计的六芳基乙烷分子上获得了键长可达 1.806 Å 的碳碳单键, 约为常规碳碳单键键长的 1.2 倍, 而分子内两个碳原子间最短非共价键距离为 1.802 Å<sup>[1]</sup>。两个碳上巨大的芳香取代基一方面通过空间排斥作用, 使得碳碳单键尽可能长, 同时又因为取代基的屏蔽, 使得因太长而脆弱的碳碳单键不易受其他活性基团的进攻发生断裂, 此外取代基之间的弱相互作用还可以稳定分子结构, 防止碳碳单键自身的断裂(图1)。

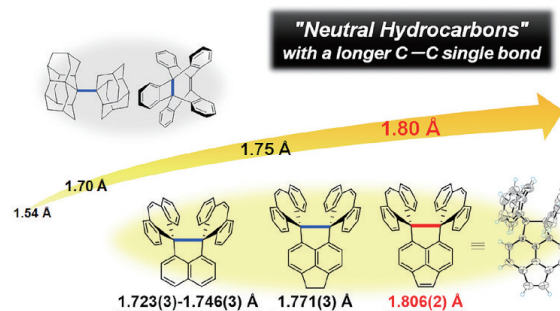


图1 中性碳氢化合物中的最长碳碳单键(图片来源:《Chem》)

收稿日期: 2019-01-07; 修回日期: 2019-01-11

作者简介: 郑企雨, 研究员, 研究方向为有机化学、超分子化学, 电子信箱: zhengqy@iccas.ac.cn

引用格式: 郑企雨. 2018年化学热点回眸[J]. 科技导报, 2019, 37(1): 16-24; doi: 10.3981/j.issn.1000-7857.2019.01.002

石墨烯是近十几年来最热门的碳材料,带动了整个二维材料的发展。从分子水平“自下而上”的人工合成碳材料(富勒烯、碳纳米管、石墨烯等)可以获得多样化的、精确的结构,从而具有不同寻常的性质,满足进一步功能化、器件化的特定要求。西班牙加泰罗尼亚纳米科学和纳米技术研究所的Moreno与圣地亚哥德孔波斯特拉大学Peña等<sup>[2]</sup>,从小分子DP-DBBA出发,在高真空的金表面先通过乌尔曼偶联聚合,再在更高温度下环化和脱氢芳构化形成纳米带,最后经脱氢交叉偶联,制备了有序纳米孔阵列的石墨烯。这种孔状的石墨烯具有半导体的性质,不同于普通石墨烯的零带隙,可用于制造晶体管器件,也可用于分子筛分和传感(图2)<sup>[2]</sup>。

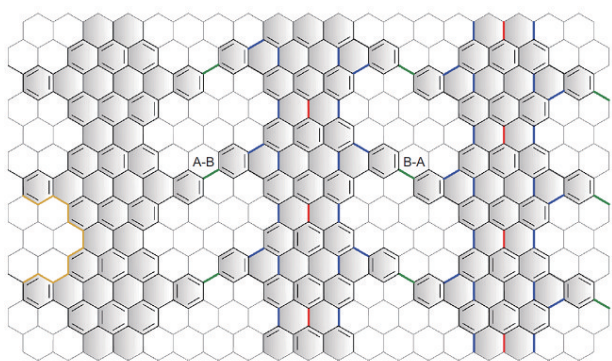


图2 具有纳米孔的石墨烯(图片来源:《Science》)

## 2 分子成像

通过X射线单晶衍射获得分子结构是目前最为准确、直接的确定分子三维结构的方法,这种方法也广泛应用于生物大分子如蛋白质的结构测定。冷冻电镜技术则是近年来分子成像领域的重大突破,单颗粒冷冻电镜技术现已达到原子分辨率水平。传统的蛋白质结构测定,需要获得高质量的单晶,再通过同步辐射来测定结构,单颗粒冷冻电镜技术的发展降低了对蛋白质样品的处理难度,这一技术也成为当今结构生物学最强大的研究利器。现在,同样的原理也可用于化学小分子成像,美国加州大学洛杉矶分校Gonen、加州理工学院Stoltz团队与瑞士保罗谢尔研究所Grüenle团队在同一时间,分别独立报导了利用旋转电子衍射技术测定小分子的三维结构,分辨率可达1 Å以下,测试样品可达到亚微米晶级别,整个过程可在几分钟内完成<sup>[3-4]</sup>。这是小分子结构测定的重大突破,随着硬件技术的发展,冷冻电镜技术在未来,必将同光谱、核磁

共振、单晶X射线衍射等技术一样极大地推动化学的发展(图3)<sup>[4]</sup>。

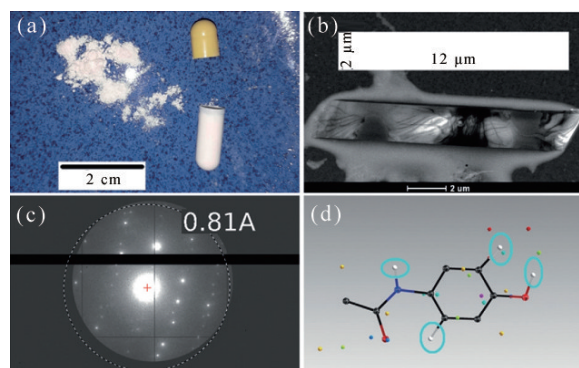


图3 旋转电子衍射技术测定微米尺度样品的单晶结构(图片来源:《Angewandte Chemie International Edition》)

成像分辨率的高低对于表征结构、研究分子性质甚为关键,在化学与材料研究领域应用广泛的扫描透射电镜分辨率可达0.5 Å,这是通过高角度环形暗场技术实现的。通过叠层成像技术和电子显微镜像素阵列探测器,美国康奈尔大学Muller团队<sup>[5]</sup>获得了0.39 Å的空间分辨率,这是电镜分辨率的最高纪录,这种技术还克服了高角度环形暗场技术需要高电子束能量的问题(电子束能量过高会破坏样品),仅在80 keV下就能获得二硫化钼二维材料的高分辨图像(图4)。

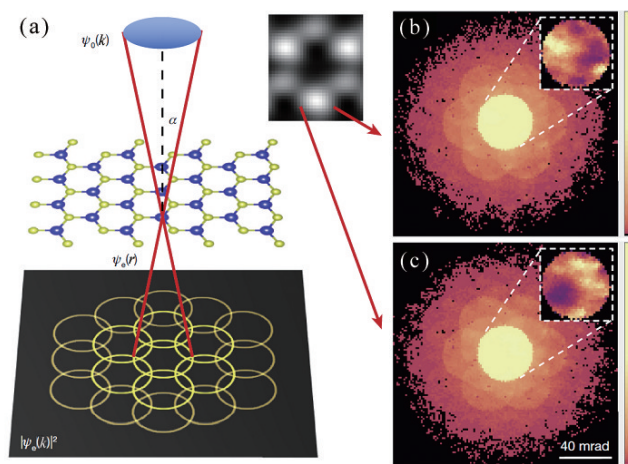


图4 使用电子显微镜像素阵列探测器的扫描透射电镜成像(图片来源:《Nature》)

## 3 催化与反应

化学反应创造了数千万种功能多样的物质,支撑着人类社会的可持续发展和文明进步。催化是实现高

效转化的最重要途径。当前催化与反应研究面临着许多挑战,例如新的化学键成键方式、廉价高效催化剂的研制、惰性分子在温和条件下高附加值的转化、绿色和原子经济性的合成方法等。

人工固氮是化学化工领域的重大课题,将氮气转化为氨的 Haber-Bosch 法主要采用过渡金属催化剂。德国维尔茨堡大学的 Braunschweig<sup>[6]</sup>发现 1 价硼烷化合物可以结合氮气分子并对其进行还原,首次实现了非过渡金属活化氮气的反应。硼烷中的硼既含有孤对电子,也有空余的 p 轨道,从而能有效地结合与活化氮气分子。该工作有望像受阻路易斯酸碱对一样,开辟出新的催化体系(图 5)<sup>[6]</sup>。

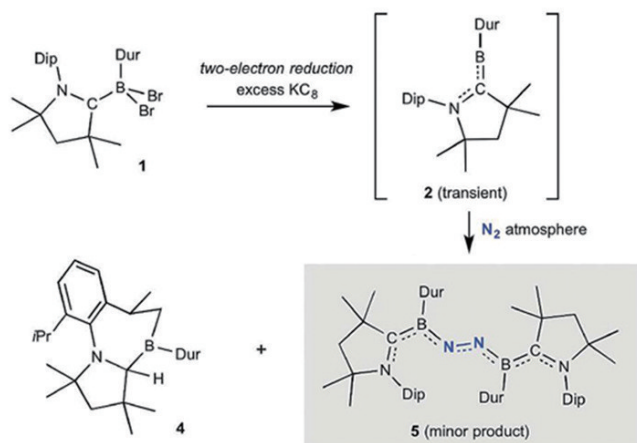


图5 硼烷化合物活化氮气小分子(图片来源:《Science》)

重要化工原料的生产不仅影响下游的材料、电子等行业,也与经济的可持续发展密切相关,重要性甚至可以上升到国家战略安全的高度。丙烯腈被广泛应用于合成纤维、合成橡胶及合成树脂等,生产丙烯腈通常是采用丙烯氨氧化的方法。美国国家可再生能源实验室的 Beckham 等<sup>[7]</sup>以廉价的 TiO<sub>2</sub> 固体酸作为表面催化剂、3-羟基丙酸乙酯为原料,高效制备了丙烯腈。而 3-羟基丙酸乙酯可由木质纤维素经微生物转化而得,从而建立了一条由可再生原料大规模生产丙烯腈的新工艺(图 6)<sup>[7]</sup>。

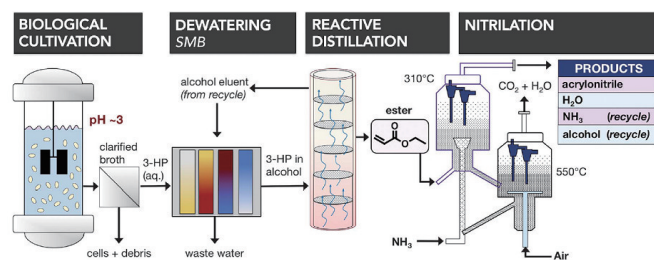


图6 由生物质制备丙烯腈过程的概念图(图片来源:《Science》)

## 4 手性科学

手性是三维物体的基本属性,如果一个物体不能与其镜像重合,就称为手性物体,这两种互成镜像的形态被称为对映体。手性普遍存在于小分子、大分子及宏观物质,其发展对人类社会的进步做出了巨大贡献。今天人们使用的药物绝大多数是手性药物,因此研究手性分子、获得或创造手性物质具有重要意义,是当代化学最重要的领域之一。2018年是手性研究频频取得突破的一年,从发现新类型的手性异构现象、颠覆教科书的手性合成方法、外场调控的手性分离、新颖的手性材料等,这些突破都给手性化学带来重大的发展机遇。

上海大学、悉尼工程大学的 Reimers 与悉尼大学的 Crossley 等<sup>[8]</sup>提出了一种全新的构象异构类型,他们在化合物(BF)O(BF)-quinoxalinoporphyrin 的 4 个立体异构体中,发现了一种以前未被分类的构象异构形式,即由于中间桥联 B—O—B 键角反转导致的阻弯异构(akamptisomerization)。这种异构导致该化合物形成两对对映体,二者之间的非对映转换势垒为 10<sup>4</sup> kJ/mol。类似于取代联苯转动受阻导致的立体异构,阻弯异构在刚性的平面大环体系中可能广泛存在,其光电、催化等性质有待深入发掘(图 7)<sup>[8]</sup>。

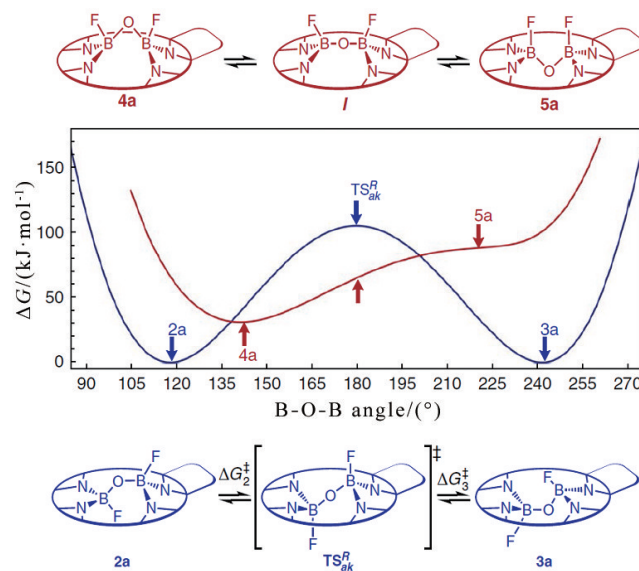


图7 4种阻弯异构体的转变能量(图片来源:《Nature Chemistry》)

绝大多数的手性化合物是碳中心手性,即饱和碳原子上所连接的 4 个基团不相同。作为非常经典的化

学反应,饱和碳原子的亲核取代通常会有两种机制: $S_N1$ 和 $S_N2$ 。前者由于形成平面的碳正离子中间体,被认为不可能获得手性产物。哈佛大学 Jacobsen 等<sup>[9]</sup>利用手性氢键给体催化剂与 Lewis 酸促进剂的协同作用,在低温条件下稳定了经 $S_N1$ 反应机制生成的碳正离子中间体,降低了重排、消除等副产物的生成几率,通过手性催化剂的控制,成功实现了反应的高对映选择性,获得手性季碳化合物。该研究打破了教科书上 $S_N1$ 反应不能用于手性合成的定论,巧妙地通过离子对机理解决了获得高对映选择性产物的难题,应用前景广阔(图8)。

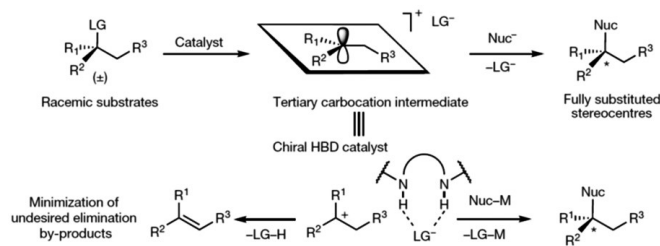


图8 构筑手性季碳中心的 $S_N1$ 方法(图片来源:《Nature》)

拆分外消旋体是获得单一立体异构体的重要途径。尽管不对称催化技术发展迅猛,但实际的工业生产多数仍采用拆分的方法来制备手性化合物。最常用的拆分手段为结晶拆分方法,价格便宜且易大量生产。利用手性色谱进行拆分是实验室通用的对映异构体分析手段,制备型的手性柱也可以获得一定规模量的单一手性化合物,但成本较高。不论是不对称催化、还是结晶和手性柱拆分,这些方法从原理上都是利用对映异构体在空间上的差别来区分的。以色列魏茨曼研究所 Naaman 和希伯来大学 Paltiel 等<sup>[10]</sup>则从分子的磁性入手,利用手性诱导的自旋选择性实现对映选择性识别。手性分子的电荷再分布使其诱导电子自旋取向表现出对映选择性,因此与垂直的磁化基底相互作用,两个对映异构体表现出吸附能量的差异,这为手性分子的拆分开辟了一种全新的途径(图9)<sup>[10]</sup>。

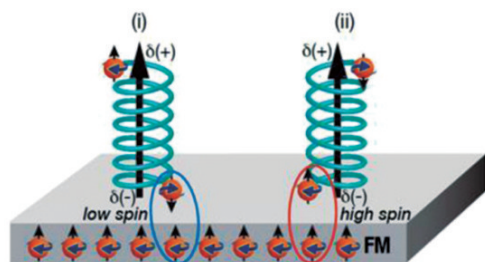


图9 利用非手性的磁基底实现手性拆分(图片来源:《Science》)

除了药物之外,手性材料是手性科学研究的一个新的生长点。随着在分子层次的手性控制取得突破性进展,科学家们开始关注超越分子层次的手性控制。其中最为突出的是手性液晶材料,尤其是蓝相液晶材料。韩国首尔大学 Nam 和浦项工程大学 Rho 等<sup>[11]</sup>利用手性氨基酸和肽控制金纳米颗粒的生长,由于纳米颗粒表面与手性氨基酸和肽的界面相互作用具有对映选择性,导致了纳米颗粒不同手性的高指数晶面具有不同的生长速率,最终能够得到单一手性三维金纳米颗粒。这种方法本质上是将有有机小分子的手性转移到数百纳米尺寸的无机颗粒上,所制备的金纳米颗粒具有很强的手性等离子基元光学活性,可望用于制造等离子超材料(图10)<sup>[11]</sup>。

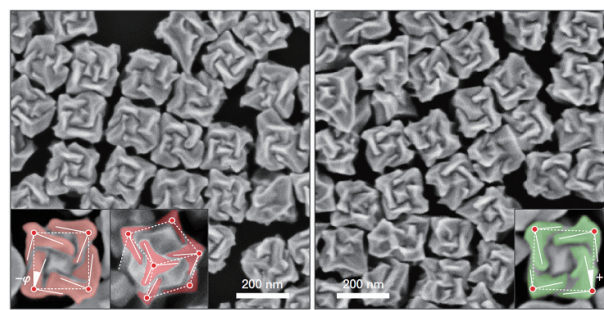


图10 具有镜像对映异构特性的金纳米颗粒(图片来源:《Nature》)

## 5 机器学习与人工智能化学

机器学习和人工智能成为今天科学家和技术开发人员津津乐道的话题,其来势凶猛,影响深远,不仅能方便人们的生活,还有可能改变整个人类社会数千年来的整体架构和道德伦理。在化学领域,机器学习的影响力也逐渐在显现。利用机器学习,化学家能预测分子的性质、探索新的反应、优化合成的路线,从而摆脱枯燥乏味、“危险的”实验室工作,更加有目的、有效地创制新物质。

默克公司的 Dreher 与美国普林斯顿大学的 Doyle 等<sup>[12]</sup>利用机器学习算法-随机森林算法,通过高通量试验获得的大量 Buchwald-Hartwig 反应数据训练后,能准确预测具有多维变量的碳氮键偶联反应表现。比起常规的线性回归分析,这种算法具有更高的预测准确性,而且还能适用于较少样本的训练或样本之外的预测,因此对于合成化学家来说非常实用(图11)<sup>[12]</sup>。

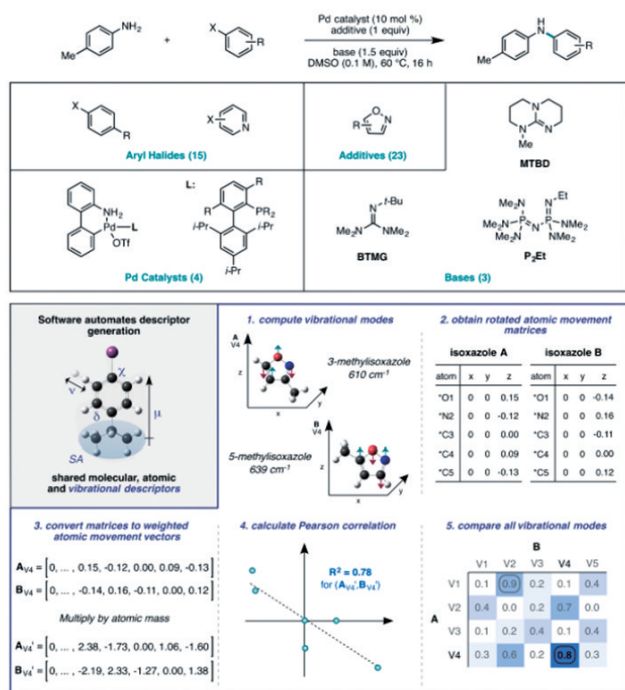


图 11 应用机器学习预测偶联反应(图片来源:《Science》)

合成化学家在实验室通常将不同的反应物混在一起,在一定条件下转化后,分析所得到的产物,看看有没有自己所期望的东西,然后再优化条件或是把原来的想法扔进“废纸篓”。英国格拉斯哥大学 Cronin 等<sup>[13]</sup>设计的机器人可以替代合成化学家们进行这种常识性的操作,通过开发的新的机器学习算法控制有机合成机器人,并将之与质谱、核磁、红外等分析工具相连,在完成实验后,机器人对获得的数据进行“思考”,再决定下一步将如何进行。这种机器人已经初步具备了自己发现新反应、合成新分子的能力,其发展势必给传统实验室合成研究带来冲击(图 12)<sup>[13]</sup>。

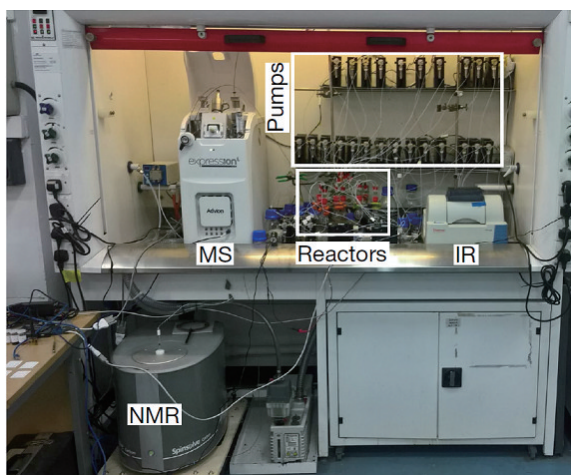


图 12 化学合成机器人(图片来源:《Nature》)

## 6 化学与生命科学交叉

生命本质上是由一个个功能分子组装而成的,因此化学与生命科学密不可分。不论是生物化学这样的传统学科,还是近 20 年发展迅猛的化学生物学,都是化学与生命科学交叉的重要地带。从化学的角度来看,与生命科学交叉,一方面可以通过外源的化学物质、化学方法或途径,在分子层面上对生命体系进行精准和动态的修饰、调控和阐释;另一方面,也可以通过对生物体系的理解和驾驭来推动化学学科自身的发展与创新。

2018 年度诺贝尔化学奖获得者之一、美国加州理工学院的 Arnold 长期从事的酶定向进化就属于化学与生命科学的交叉前沿领域。通过对含血红素辅基的蛋白质的定向进化方法改造,他们实现了自然界酶不能发生的碳硅键和碳硼键形成反应。2018 年,该团队利用对细胞色素 P450 的酶的定向进化,又实现了高张力双环丁烷和环丙烯的合成,这对传统的有机合成来说是很困难的<sup>[14]</sup>。此外,针对廉价金属铁催化卡宾的碳氢插入反应,他们对不同的血红素蛋白及突变体进行筛选,再经过多轮定向进化,获得了具有较好催化活性、高产率和高立体选择性的酶,还能直接利用表达此突变蛋白的细胞作为催化剂进行卡宾的碳氢插入反应<sup>[15]</sup>。定向进化作为合成生物学的重要技术,将对绿色化学的发展产生重大推动作用(图 13)<sup>[15]</sup>。

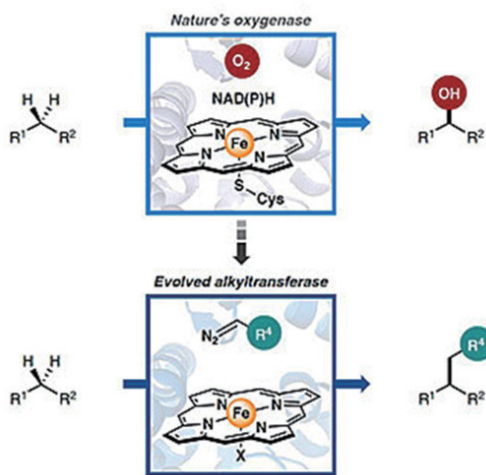


图 13 定向进化酶实现卡宾的碳氢插入反应(图片来源:《Nature》)

美国伊利诺伊大学香槟分校 Lu 同样关注酶的改造,采用的是体外重构的方法,他们将铁硫簇基团引入细胞色素 C 过氧化物酶,构造了亚硫酸盐还原酶的结构

与功能模拟物,其具有天然酶的光谱和结合性质,并且亚硫酸盐的还原能力比天然酶高<sup>[16]</sup>。他们利用人工合

成的金属蛋白酶实现了化学催化剂难以完成的多电子氧化还原反应(图14)。

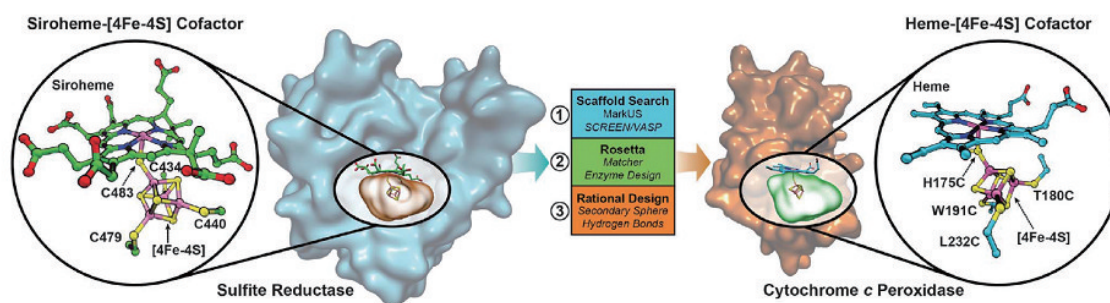


图14 人工改造细胞色素C过氧化物酶模拟亚硫酸盐还原酶(图片来源:《Science》)

虽然生命个体的演化主要取决于遗传基因的序列,但其复杂性和多样性无法仅由“中心法则”解释。蛋白质的翻译后修饰就是生命过程中一种普遍存在的调控方式,其重要的生理价值和病理意义已得到了人们的广泛认同和重视。在特定的位点对蛋白质进行人工修饰和标记,就可以原位研究和调控蛋白质的功能。蛋白质修饰的化学反应需要具有很好的生物兼容

性、反应快、选择性和产率高,“点击化学”就是这样一类被广泛应用的反应。与通常在活性的氨基酸上修饰或者通过基因密码子拓展引入非天然氨基酸的方法不同,剑桥大学 Gaunt 等<sup>[17]</sup>报道了一种在蛋氨酸上的标记方法,通过蛋氨酸上的硫醚与高价碘试剂的亲核反应,得到重氮硫结构的产物再进行二次修饰,该方法具有很好的拓展空间(图15)。

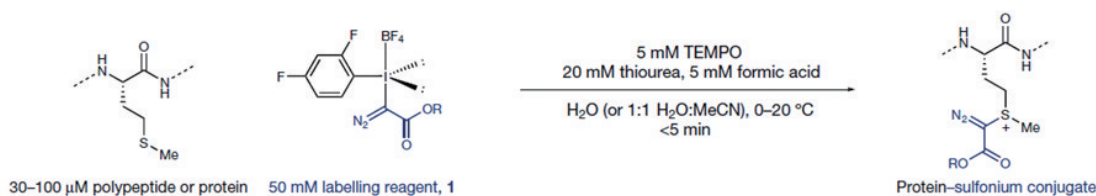


图15 基于高价碘试剂的蛋白质蛋氨酸选择性标记(图片来源:《Nature》)

化学在生命科学领域的应用主要是分析和检测。随着新技术的发展,原位、实时、快速、精准地获取分子信息成为理解生命过程的重要手段,并对疾病的早期诊断带来极大的促进,造福人类健康。日本国立长寿医疗研究中心 Yanagisawa 等<sup>[18]</sup>以血液中的 A $\beta$  相关肽作为生物标志物,通过免疫沉淀-质谱联用方法测定多个 A $\beta$  相关肽的水平,高达90%的准确率预测大脑中的 A $\beta$  负担,从而实现阿尔茨海默病的诊断。

## 7 化学与材料科学交叉

多孔材料在催化、分离、能源等领域具有重要的用途,从无机的分子筛到有机-无机杂化的框架结构(金属有机框架材料 MOF/沸石咪唑酯骨架结构材料 ZIF),再到纯有机的框架结构(共价有机骨架材料 COF),这

些有着固定孔尺寸、确定晶体结构的多孔材料,构效关系清楚,性能易于调控和拓展,受到化学和材料学家的青睐。自2005年第一例利用可逆的硼氧键合成晶态有机框架结构以来,COF发展迅猛,被用于催化、传感、吸附分离、光电能源等领域。尽管绝大多数的COF通过粉末X射线衍射证明了具有较好的晶态和规整的孔结构,获得足够大的单晶仍然是艰巨的挑战。兰州大学王为、北京大学孙俊良、加州大学伯克利分校 Yaghi 等<sup>[19]</sup>,采用辅助试剂交换的方法控制亚胺键的成键速度,增加成键的可逆性,使得晶体生长时有足够的时间来自我纠正缺陷,获得了满足单晶X射线衍射测试要求的大尺寸高质量单晶,首次实现了基于亚胺键的三维COF单晶生长和解析。该方法不仅解决了结构问题,更为获得可重复、高质量的COF材料提供了重要的思路,有助于COF研究拓展到其他化学键体系中(图16)。

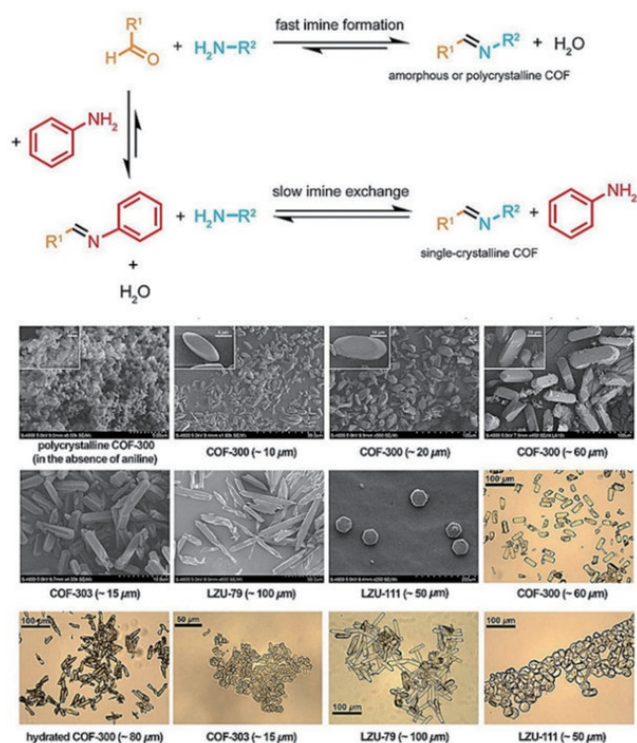


图 16 基于交换策略制备大尺寸的 COF 单晶  
(图片来源:《Science》)

化学在创造了新物质改善人们生存条件的同时,也给地球带来新的麻烦。“白色垃圾”就是最典型的问题。大量的高分子材料难以被自然降解,严重污染水源、土壤和大气。化学家既然打开了“潘多拉的盒子”,就有责任去解决这些问题。美国科罗拉多州立大学 Chen 等<sup>[20]</sup>通过设计特定的单体,制备了在容易实现的条件下降解的塑料。他们设计的单体为在  $\alpha$  和  $\beta$  位具有反式环稠合的  $\gamma$ -丁内酯衍生物,使用极少量的催化剂,就能在室温、无溶剂条件下高效地发生聚合反应。合成的高分子塑料不仅性能优良,还可以热解或化学降解为原始单体,并进行多次的循环利用。

## 8 中国化学的 2018 年

化学是中国基础研究的优势学科,2013 年以来每年发表的论文数已居世界第一,且与其他国家的差距还在扩大,这主要得益于科研经费的稳定增长和一支庞大的从事化学基础研究队伍。中国化学家提出的聚集诱导发光、单原子催化概念、合成的石墨炔二维碳材料、构建的非富勒烯有机太阳能电池等极具特色,发展的煤制油、合成气催化转化等技术在能源领域也有重大

战略意义。

2018 年中国化学研究再上新台阶,在多个领域产出了重大的成果,改变了过去零星出现的状况。代表性的成果包括:在化学反应机制与理论领域,北京大学江颖、徐莉梅、高毅勤、北京大学/中国科学院王恩哥等首次得到了水合钠离子的原子级分辨图像,并发现了一种水合离子输运的幻数效应<sup>[21]</sup>,复旦大学周鸣飞、德国马德堡大学 Frenking 等观察到类似过渡金属的碱土金属八烷基化合物<sup>[22]</sup>,中国科学技术大学王兴安、中国科学院大连化学物理研究所孙志刚、张东辉和杨学明等首次观测到化学反应中的“几何相位”效应<sup>[23]</sup>;在合成化学领域,上海师范大学赵宝国、中国科学院成都有机化学研究所袁伟成等利用羰基催化的策略实现了仿生的不对称曼尼希反应<sup>[24]</sup>,南方科技大学谭斌、美国加州大学洛杉矶分校 Houk 等首次实现了催化不对称的四组分 Ugi 反应<sup>[25]</sup>,上海科技大学左智伟等发展了可用于光促进甲烷转化的廉价、高效的铈基催化剂和醇催化剂的协同催化体系<sup>[26]</sup>;在材料化学领域,北京科技大学邢献然、陈骏等通过相界面应变制备出巨大极化的超四方薄膜<sup>[27]</sup>,中国科学院上海应用物理研究所樊春海、美国亚利桑那州立大学颜颖等利用框架核酸诱导策略实现了精确可控的 DNA-二氧化硅固态纳米结构制备<sup>[28]</sup>,东南大学游雨蒙和南昌大学/东南大学熊仁根等发现了一类 17 种新型全有机钙钛矿铁电体<sup>[29]</sup>;在环境化学领域,复旦大学王琳等在城市大气环境大气新粒子形成研究方面取得重要进展<sup>[30]</sup>;在化学工程领域,华南理工大学李映伟、美国德克萨斯大学圣安东尼奥分校陈邦林等制备了高度有序、大孔、单晶的稳定 MOFs 材料<sup>[31]</sup>,太原理工大学李晋平、美国国家标准与技术研究院 Zhou W、美国德克萨斯大学圣安东尼奥分校陈邦林等利用 Fe-MOF 实现了乙烷/乙烯分离<sup>[32]</sup>。

2018 年中国科学院上海有机化学研究所马大为、南开大学周其林和四川大学冯晓明,因在发明新催化剂和新反应方面的创造性贡献,获得了 2018 未来科学大奖物质科学奖。

## 9 结论

化学的核心任务是实现化学合成、过程及功能的精准控制和规律认知。通过与其他学科的交叉融合,化学不断发现新问题、发展新方法、开辟新方向。此外

化学研究还需要面向社会,服务经济发展、国家安全。2018年化学的重要进展很多,本文主要集中在分子的性质、创造和转化等方面,难免挂一漏万;其他如纳米、光电功能材料等因篇幅所限更是未着墨太多,甚为遗憾。2019年化学一定会有更多令人眼前一亮的成果出现,也期待中国化学更大的原创性突破。

### 参考文献(References)

- [1] Ishigaki Y, Shimajiri T, Takeda T, et al. Longest C—C single bond among neutral hydrocarbons with a bond length beyond 1.8 Å[J]. *Chem*, 2018, 4: 795–806.
- [2] Moreno C, Vilasvarela M, Kretz B, et al. Bottom up synthesis of multifunctional nanoporous graphene[J]. *Science*, 2018, 360(6385): 199–203.
- [3] Jones C G, Martynowycz M W, Hattne J, et al. The cryoEM method MicroED as a powerful tool for small molecule structure determination[J]. *ACS Central Science*, 2018, 4(11): 1587–1592.
- [4] Gruene T, Wennmacher J T C, Zaubitzer C, et al. Rapid structure determination of microcrystalline molecular compounds using electron diffraction[J]. *Angewandte Chemie International Edition*, 2018, 57: 16313–16317.
- [5] Jiang Y, Chen Z, Han Y, et al. Electron ptychography of 2D materials to deep sub-ångström resolution[J]. *Nature*, 2018, 559(7714): 343–349.
- [6] Légaré M A, Bélanger-Chabot G, Dewhurst R D, et al. Nitrogen fixation and reduction at boron[J]. *Science*, 2018, 359(6378): 896–900.
- [7] Karp E M, Eaton T R, Sánchez V I N, et al. Renewable acrylonitrile production[J]. *Science*, 2017, 358(6368): 1307–1310.
- [8] Canfield P J, Blake I M, Cai Z L, et al. A new fundamental type of conformational isomerism[J]. *Nature Chemistry*, 2018, 10(6): 615–624.
- [9] Wendlandt A E, Vangal P, Jacobsen E N. Quaternary stereocentres via an enantioconvergent catalytic  $S_N1$  reaction[J]. *Nature*, 2018, 556(7702): 447–451.
- [10] Banerjee-Ghosh K, Ben Dor O, Tassinari F, et al. Separation of enantiomers by their enantiospecific interaction with achiral magnetic substrates[J]. *Science*, 2018: eaar4265.
- [11] Lee H E, Ahn H Y, Mun J, et al. Amino-acid- and peptide-directed synthesis of chiral plasmonic gold nanoparticles[J]. *Nature*, 2018, 556(7701): 360–365.
- [12] Ahneman D T, Estrada J G, Lin S, et al. Predicting reaction performance in C–N cross-coupling using machine learning [J]. *Science*, 2018, doi: 10.1126/science.aar5169.
- [13] Granda J M, Donina L, Dragone V, et al. Controlling an organic synthesis robot with machine learning to search for new reactivity[J]. *Nature*, 2018, 559(7714): 377–381.
- [14] Chen K, Huang X, Kan S B J, et al. Enzymatic construction of highly strained carbocycles[J]. *Science*, 2018, 360(6384): 71–75.
- [15] Zhang R K, Chen K, Huang X, et al. Enzymatic assembly of carbon-carbon bonds via iron-catalysed sp<sup>3</sup> C–H functionalization[J]. *Nature*, 2019, 565: 67–72.
- [16] Mirts E N, Petrik I D, Parisa H, et al. A designed heme-[<sup>4</sup>Fe-<sup>4</sup>S] metalloenzyme catalyzes sulfite reduction like the native enzyme[J]. *Science*, 2018, 361(6407): 1098–1101.
- [17] Taylor M T, Nelson J E, Suero M G, et al. A protein functionalization platform based on selective reactions at methionine residues[J]. *Nature*, 2018, 562: 563–568.
- [18] Nakamura A, Kaneko N, Villemagne V L, et al. High performance plasma amyloid-β biomarkers for Alzheimer's disease [J]. *Nature*, 2018, 554(7691): 249–254.
- [19] Ma T, Kapustin E A, Yin S X, et al. Single-crystal X-ray diffraction structures of covalent organic frameworks[J]. *Science*, 2018, 361(6397): 48–52.
- [20] Zhu J B, Watson E M, Tang J, et al. A synthetic polymer system with repeatable chemical recyclability[J]. *Science*, 2018, 360(6387): 398–403.
- [21] Peng J, Cao D, He Z, et al. The effect of hydration number on the interfacial transport of sodium ions[J]. *Nature*, 2018, 557(7707): 701–705.
- [22] Wu X, Zhao L, Jin J, et al. Observation of alkaline earth complexes M(CO)<sub>8</sub> (M=Ca, Sr, or Ba) that mimic transition metals [J]. *Science*, 2018, 361(6405): 912–916.
- [23] Yuan D, Guan Y, Chen W, et al. Observation of the geometric phase effect in the H+HD→H<sub>2</sub>+D reaction[J]. *Science*, 2018, 362(6420): 1289–1293.
- [24] Chen J, Gong X, Li J, et al. Carbonyl catalysis enables a biomimetic asymmetric Mannich reaction[J]. *Science*, 2018, 360(6396): 1438–1442.
- [25] Zhang J, Yu P, Li S Y, et al. Asymmetric phosphoric acid-catalyzed four-component Ugi reaction[J]. *Science*, 2018, 361(6407): eaas8707.
- [26] Hu A, Guo J J, Pan H, et al. Selective functionalization of methane, ethane, and higher alkanes by cerium photocatalysis [J]. *Science*, 2018, 361(6403): 668–672.
- [27] Zhang L, Chen J, Fan L, et al. Giant polarization in super-tetragonal thin films through interphase strain[J]. *Science*, 2018, 361(6401): 494–497.
- [28] Liu X, Zhang F, Jing X, et al. Complex silica composite nanomaterials templated with DNA origami[J]. *Nature*, 2018, 559(7715): 593–598.
- [29] Ye H Y, Tang Y Y, Li P F, et al. Metal-free three-dimension-

- al perovskite ferroelectrics[J]. *Science*, 2018, 361(6398): 151–155.
- [30] Yao L, Garmash O, Bianchi F, et al. Atmospheric new particle formation from sulfuric acid and amines in a Chinese megacity[J]. *Science*, 2018, 361(6399): 278–281.
- [31] Shen K, Zhang L, Chen X, et al. Ordered macro-microporous metal-organic framework single crystals[J]. *Science*, 2018, 359(6372): 206–210.
- [32] Li L, Lin R B, Krishna R, et al. Ethane/ethylene separation in a metal-organic framework with iron-peroxo sites[J]. *Science*, 2018, 362(6413): 443–446.

## Selected hot topics of chemistry in 2018

ZHENG Qiyu

Institute of Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China

**Abstract** In 2018, significant progresses have been made in traditional and interdisciplinary research fields of chemistry. In this article we review some selected hot spots, including design of new molecules, chemical imaging, catalysis and synthesis, chiral molecular science, machine learning in chemistry, chemical biology, and materials chemistry. We also introduce the outstanding advances made by Chinese chemists in 2018.

**Keywords** chemistry; progress in 2018; creating new molecules; interdisciplinary research ●



(责任编辑 田恬)