

自然科学学科发展战略研究报告之八:分析化学

Strategic Research on Natural Science Disciplines:
Analytical Chemistry

国家自然科学基金委

一、战略地位

分析化学是人们获得物质化学组成和结构信息的科学,是“解决有关物质体系问题的关键”。它包括色谱分析、电化学分析、光谱分析、波谱分析、质谱分析、化学分析、热分析、放射分析、生化分析、生物传感器联用技术、采样分离富集方法、化学计量学和表面微区形态分析等分支学科。分析化学的发展与数学、物理学、生物学,以及生命、环境、材料、资源、信息、医药等科学的发展息息相关,其应用范围几乎涉及国民经济、国防建设、资源开发,以及人的衣、食、住、行和用等各个方面。可以说,当代科学领域的所谓“四大理论问题”,即:天体、地球、生命、人类起源和演化,以及人类社会面临的五大危机,资源、能源、人口、粮食、环境问题的解决,都与分析化学这一基础学科的研究密切相关。

当代科学技术和人类生产活动的飞速发展向分析化学学科提出了严重的挑战,也带来了前所未有的机会。目前世界范围内的大气、江河、海洋和土壤等环境污染正在破坏正常的生态平衡,甚至危及人类的发展与生存。为追踪污染源,弄清污染物种类、数量,以及研究其转化规律及危害程度等,分析化学在其中起着极其重要的作用。在新材料的研究中,表征和测定痕量杂质的含量、状态及空间分布等已成为发展高新技术或微电子工业的关键。在资源及能源科学中,分析化学是获取地质矿物组分、结构和性能信息,以及揭示地质环境变化过程的重要手段。煤碳、石油、天然气及核材料资源的探测、开采及炼制更离不开分析检测工作。分析化学在研究生命、生物工程、生物医学中,对于揭示生命起源、生命过程、疾病及遗传奥秘等方面具有重要意义。各种现代分析方法对于确定糖类、蛋白质、脱氧核糖核酸、酶、维生素、生物碱,各种抗原抗体、激素

和激素受体的组成、结构、生物活性及免疫性能等均起着决定性作用。在医学科学中,医药分析在药物成分含量、药物作用机制、药物代谢与分解、药物动力学、疾病诊断,以及滥用药物等的研究中,是不可缺少的手段。近些年来,关于微量元素及其形态对人体保健、疾病和免疫作用的研究日益深入。研究微量元素的必要性与毒性,微量元素间相互作用及其对机体的影响乃是分析化学的一项艰巨任务。在空间科学研究中,星际物质分析已成为了解和考察宇宙物质成份及其转化的重要手段。值得指出的是,在新近呈现的两项世界瞩目的尖端课题——高温超导材料及冷核聚变的研究中,分析方法的可靠程度和灵敏度已被认为是深入探讨其理论基础和解决争端的关键之一。

分析化学在工业生产中的重要性主要表现在产品质量检查、工艺流程控制和商品检验方面,其中产品质量控制可以认为是质量管理的主要手段及发展商品市场的最重要因素之一,也是企业永远保持活力的基础。在农业生产方面,分析化学在传统的农业生产中,在水、土成分调查,农药、化肥、残留物及农产品质量检验中占据重要的地位。在即将到来的以生物科学技术和生物工程为基础的“绿色革命”中,分析化学在细胞工程、基因工程、发酵工程和蛋白质工程等的研究中,也将发挥重要作用。在国防建设中,分析化学在化学战剂、武器结构材料、航天、航海结构、动力材料及环境气氛的研究中都有着广泛的应用。

总之,现代分析化学已发展成为由许多密切相关的分支学科交织起来的一个体系。分析化学自身的发展所涉及的诸如溶液反应、化学平衡、界面、胶束介质、固定化、吸附与解吸、萃取、免疫学、色谱学、电化学、传感器、联用技术、专家系统、过程控制、图象检测、机器人、自动化及化学计量学等方面的深入研究,具有重大的科学意义。

二、现状及发展趋势

分析化学学科的发展经历了三次巨大变革。第一次是随着分析化学基础理论,特别是物理化学的基本概念(如溶液理论)的发展,使分析化学从一种技术演变成为一门科学。第二次变革是由于物理学和电子学的发展,改变了经典的以化学分析为主的局面,使仪器分析获得蓬勃发展。目前,分析化学正处在第三次变革时期,生命科学、环境科学、新材料科学发展的要求,生物学、信息科学、计算机技术的引入,使分析化学进入了一个崭新的境界。第三次变革的基本特点,从采用的手段看,是在综合光、电、热、声等现象的基础上进一步采用数学、计算机科学及生物学等学科新成就对物质进行纵深分析的^{科学};从解决的任务看,现代分析化学已发展成为获取形形色色物质尽可能全面的信息、进一步认识自然、改造自然的科学。现代分析化学的任务已不只限于测定物质的组成及含量,而是要对物质的形态(氧化一还原态、络合态、结晶态)、结构(空间分布)、微区、薄层及化学和生物活性等作出瞬时追踪、无损和在线监测等分析及过程控制。随着计算机科学及仪器自动化的飞速发展,分析化学家已不能只满足于分析数据的提供,而是要和其它学科科学家相结合,逐步成为生产和科学研究中实际问题的解决者。

本文将现代分析化学学科的发展趋势和特点归纳为如下八个方面。

1. 提高灵敏度

当代许多新技术引入分析化学,都与提高分析方法的灵敏度有关,如激光的引入,促进了诸如激光共振电离光谱、激光拉曼光谱、激光诱导荧光光谱、激光光热光谱、激光光声光谱和激光质谱的应用,不仅大大提高了分析方法的灵敏度,使得检测单个原子或单个分子成为可能。又如多元配合物、有机显色剂和各种增效试剂的研究与应用,使得吸收光谱、荧光光谱、发光光谱、电化学及色谱等分析方法的灵敏度和分析性能得到大幅度的提高。

2. 解决复杂体系的分离、富集及提高方法的选择性

迄今,人们所认识的化合物已超过 1 000 万种,而且仍在快速增长。复杂体系的分离和测定已成为分析化学家所面临的艰巨任务。由液相色谱、气相色谱、超临界流体色谱和电泳等所组成的色谱学是现代分离、分析的主要组成部分,并获得了很快的发展。以色谱、光谱和质谱技术为基础所开展的各种联用、接口及样品引入技术已成为当今分析化学发展中的热点之一。在提高方法选择性方面,各种选择性试剂、萃取剂、离子交换剂、吸附剂、表面活

性剂、各种传感器的接着剂、各种选择检测技术和化学计量学方法是当前研究工作的重要课题。

3. 扩展时空多维信息

现代分析化学的发展已不局限于待测组分的分离和测量,而成为一门为物质提供尽可能多的化学信息的科学。随着人们对客观物质认识的深入,某些过去所不甚熟悉的领域,如多维、不稳态和边界条件等也逐渐提到分析化学家的日程上来。例如现代核磁共振波谱、红外光谱、质谱等的发展,可提供有机物的分子精细结构、空间排列构型及瞬态变化的信息,为人们认识化学反应历程及生命过程展现了光辉的前景。化学计量学的发展,更为处理和解析各种化学信息提供了重要基础。

4. 微型化及微环境的表征与测定

微型化及微环境分析是现代分析化学认识自然从宏观到微观的延伸。电子学、光学和工程学向微型化的发展,人们对生物功能的了解,促进了分析化学深入微观世界的进程。电子显微技术、电子探针 X 射线微量分析、激光微探针质谱等微束技术已成为进行微区分析的重要手段。表面分析方面,电子能谱、次级离子质谱、脉冲激光原子探针等的发展,已可检测和表征一个单原子层而在材料科学、催化剂、生物学以及物理和理论化学研究中占据重要的位置。此外,对于电极表面修饰行为和表征过程的研究,各种分离科学理论、联用技术、超微电极和光谱电化学等的应用为揭示反应机理,开发新体系,进行分子设计等开辟了新的途径。

5. 形态、状态分析及表征

在环境科学中,同一元素的不同价态和所生成的不同的有机化合物分子的不同形态都可能存在毒性上的极大差异。在材料科学中物质的晶态、结合态更是影响材料性能的重要因素。目前已报道利用诸如阳极溶出伏安法、X 射线光电子能谱、X 射线荧光光谱、X 射线衍射、热分析、各种吸收光谱方法和各种联用手段来解决物质存在的形态和状态问题。

6. 生物大分子及生物活性物质的表征及测定

70 年代以来,世界各发达国家都将生命科学及与其有关的生物工程列为科学研究中最优先发展的领域。在欧、美、日等国家,具有战略意义的宏大研究规划“尤里卡计划”、“人类基因组”及“人体研究新前沿”中,生物大分子的结构分析研究都占据重要的位置。我国在 2000 年前发展高技术战略的规划中,也把生物技术列为七个重点领域之一。一方面生命科学及生物工程的发展向分析化学提出了新的挑战;另一方面仿生过程的模拟,又成为现代分析化学取之不尽的源泉。当前采用以色谱、质谱、核磁共振、荧光、磷光、化学发光和免疫分析,以及化学传感器、生物传感器、化学修饰电极和生物

电分析化学等为主体的各种分析手段,不但在生命体和有机组织的整体水平上,而且在分子和细胞水平上来认识及研究某些大分子及生物活性物质在生命过程中的化学和生物本质方面已日益显示出十分重要的作用。

7. 非破坏性检测及遥测

这是分析方法的又一重要外延。当今的许多物理和物理化学分析方法都已发展为非破坏性检测。这对于生产流程控制,自动分析及难于取样的诸如生命过程等的分析是极端重要的。遥测技术应用较多的是激光雷达、激光散射和共振荧光、傅里叶变换红外光谱等,已成功地用于测定距离几十公里内的气体、某些金属的原子和分子、飞机尾气组成、炼油厂周围大气组成等,并为红外制导和反制导系统的设计提供理论和实验根据。

8. 自动化及智能化

微电子工业、大规模集成电路、微处理器和微型计算机的发展,使得分析化学进入了自动化和智能化的阶段。机器人是实现基本化学操作自动化的重要工具。专家系统是人工智能的最前沿。在分析化学中,专家系统主要用于设计实验和开发分析方法,进行图谱说明和结构解释。80年代兴起的过程分析已使分析化学家摆脱传统的实验室操作,进入到生产过程,甚至生态过程控制的行列。分析化学机器人和现代分析仪器作为“硬件”,化学计量学和各种计算机程序作为“软件”,其对分析化学所带来的影响将会是十分深远的。

三、我国分析化学发展现状分析

1. 我国分析化学的主要成就

迄今,我国已拥有数以万计的涉及生物、环境、材料、临床、医药、地质、冶金、宇航、商检、法医、侦破和考古等方面的庞大分析检验队伍。一支以中国科学院和高等院校及各部委研究所为核心的,具有科学积累,勇于创新,而且比较配套的分析化学队伍已经形成。一批在国内外知名的科学家在领导、组织、评议、开拓新的领域和培养人才方面作出了巨大贡献。

此外还拥有总值约为30亿元的现代化装备和测试手段。以10个国家分析测试中心、12个教委分析测试中心、21个省市测试中心、1个中国科学院开放实验室和1个国家兴奋剂检测中心为核心的全国分析检测网络已成为发展我国分析化学事业的重要基地。

分析化学各分支学科都已作出了各具自己特色的成就,初步形成了各领域的学科配套和全国范围内的较合理布局。

多年来,在我国重要矿产的发现及综合利用,能源开发和利用,半导体、原子能和某些高技术工业的建立和发展,农作物增产、农田污染、农药降解的调查,医药学研究和兴奋剂检测,环境保护和评价以及某些特殊功能材料的剖析和研制,以至在胰岛素的构造、脱氧核糖核酸构造分析以及高温超导材料的研究中,分析化学都发挥了重要作用。在色谱、电分析等的某些方面已达到了较高的水平。

2. 我国分析化学面临的形势和任务

今后十年我们面临的是国际上的科技竞争和国内工农业总产值翻两番的新形势。人口增长、耕地减少、能源紧张、企业效率不好、产品质量不高、生产效率低下、环境污染严重等问题的解决都需要充分发挥科学技术的作用。分析化学在跟踪世界科学技术的发展,迎接第三次变革及为国民经济建设服务中必将要承担更加艰巨和复杂的任务。但目前研究人才不足,人员素质较差,人员结构不合理,学术水平偏低,研究工作重复,科研经费短缺,设备利用率低,更新困难等许多因素严重制约我国分析化学学科的发展。需要制订切实的措施加以逐步解决。

四、战略设想和战略目标

建立一个又有重点、又有合理层次的分析化学学科体系是制定我国分析化学发展战略的基本出发点。建立起适合于我国国情和具有我国特色的学术方向和研究集体是制定我国分析化学发展战略的基本策略。以基础研究带动整个分析化学学科的发展是制订我国分析化学发展的正确途径。

我们的战略目标是,立足国内,面向世界,多学科、多技术、多方法相互渗透、融合和补充,争取在分析化学与数学、计算机科学的结合与交叉(包括化学计量学的开展,波谱、光谱、色谱和分析化学情报数据库的建立和发展,某些检测体系的过程分析,部分分析方法的自动化、智能化)及分析化学与生物学的结合与交叉(包括生命科学及医药科学中的分析化学,即从分子水平上研究生命过程)等某些前沿领域作出一批具有一定特色和创新的成果;同时结合我国经济建设的需要,促进高新技术向分析化学的渗透;在解决环境科学、新材料科学、资(能)源科学、食品科学及医药科学等领域中的问题进一步提高痕量分析、微区分析、表面分析、形态分析和结构分析研究工作的水平,不断积累和总结经验,上升到理论高度,建立起有自己特色的学术方向和研究集体,造就一批基础扎实并具有一定国际影响的学术带头人,为我国分析化学学科跻身于国际先进水平打下良好的基础。(下转第15页)

俎代庖,更不要做揠苗助长的事。相反,我们应该把力量更多地花在市场本身无能为力的地方。

总之,我们要注意改变长期在计划经济体制下工作和生活所形成的思维定式,充分认识和重视市场在产业结构调整中的作用。市场能够做好的事情,放手让市场力量发挥作用。在规划考虑产业结构从劳动密集向技术密集调整的时候,必须审时度势,切忌好大喜功。要清醒把握本地区在全国经济发展大局中的比较优势,充分利用,切勿轻易放弃。只要我们把社会经济效益放在第一位,看准了一个

项目可以较快回收投资,并且在随后的三五年内都能产生较大的利润,又不会产生外部不经济(例如破坏环境),那就要抓紧上,而不必管它是不是高科技。否则,我们就会贻误战机。在上述认识的前提下,我们当然鼓励产业结构向技术密集调整。

体制改革和计划工作的要点就是转变企业经营机制,培育良好的市场环境。这件事情做好了,比别的什么都重要。这件事情做好了,经济就一定腾飞。

(责任编辑 蔡德诚)

(上接第 25 页)

五、近 5~10 年内应优先资助发展的前沿课题和定向课题

1. 前沿课题

在近 5~10 年内,应优先资助发展以下前沿课题:

生命科学中的分析化学,新分析方法和联用技术的研究,激光和等离子体技术的应用研究,各种传感器及微电极的研究,新的分离和富集方法研究,化学形态分析、表面分析、原位现场分析,化学计量学的研究,分析化学基础理论的研究。

2. 定向课题

优先资助发展的定向课题应包括:

(1)原子光谱分析:发射光谱、吸收光谱、X—射线荧光光谱。

(2)分子光谱分析:分光光度、荧(磷)光光度、化学发光及生物发光、红外光谱、拉曼光谱、光声光谱。

(3)波谱分析:顺磁共振、核磁共振。

(4)质谱分析:同位素质谱、无机质谱、有机及生物质谱。

(5)色谱分析:气相色谱、液相色谱及离子色谱、超临界流体色谱、薄层色谱、毛细管电泳、场流分级。

(6)电分析化学:生物电化学、化学修饰电极、光谱电化学、伏安法及相关方法、库伦法、液/液界面电化学。

(7)放射化学分析:中子活化分析。

(8)分离,分析试剂和检测技术、装置,标准物质及样品前处理技术。包括:试剂:萃取剂、离子交换剂及吸附剂,衍生试剂、显色剂、生命科学所用特殊功能试剂及其它有机试剂,增效试剂;分离及检测技术和装置;分离膜;标准物质的研制;样品前处理技术。

(9)表面及微区分析方法的研究。

(10)热分析。

(责任编辑 刘先曙)