

2024 年度 IUPAC 化学领域十大新兴技术

2019 年，IUPAC（国际纯粹与应用化学联合会）启动了一项计划，旨在遴选化学科学领域中最具潜力的新兴技术【1】。如今，这项备受认可的计划年复一年地进行，不断增加那些拥有巨大潜力、能够变革材料科学、能源、医疗、农业和计算等多种领域的创新技术【2】。总体而言，IUPAC 的“化学十大新兴技术”与联合国的可持续发展目标相一致，致力于确保可持续的未来，并为循环经济铺平道路【3】。这份新名单探讨了新材料、尚未开发的物理现象以及应对全球挑战的创新解决方案，其中包括流行性疾病以及仍在持续的能源与燃料危机。正如首份“十大新兴技术”中所提到的，这些技术处于跨越实验室发现到商业应用的不同成熟度状态，因此被称为“新兴技术”。但所有这些技术都是由 IUPAC 提名的专家小组精心筛选的，且同样令人兴奋。继续阅读吧。

受阻路易斯对

2006 年，受阻路易斯对（FLP）化合物推翻了一个已有百余年历史的化学“教条”——过渡金属并非唯一能够活化并裂解氢气的物质。受阻路易斯对结构使用更轻的元素，如磷和硼，甚至在温和条件下就能启动反应【4】。这一概念令人信服——由于空间位阻或电子阻碍，路易斯酸和路易斯碱无法形成经典的加合物，导致它们最具反应性的片段暴露出来，准备与其他分子反应【5】。这种独特的反应性为无金属催化开辟了新的可能性，并催生了一个很快扩展到多个底物

和反应类型的新领域，包括手性选择性反应【6】。这种多样性使其在多种应用中得以实现，包括在合成有机化学中至关重要的碳-氢键和碳-氟键的活化，尤其是在药物功能化和氟-18 成像剂的应用中【7】。其他应用还包括可降解聚合物、自愈材料和传感器的合成，进一步拓展了 FLP 在材料科学领域的可能性【8】。此外，FLP 不仅成功活化氢气，还能活化二氧化碳分子，这可能为碳捕集和将其转化为增值产品（如甲烷、甲醇和乙酸）带来新的能力【9】。尽管距离商业应用尚远——可能是因为大多数 FLP 化合物对空气和湿气敏感——但一些研究表明，FLP 化合物和催化剂在工业规模上的实施具有巨大潜力。例如，FLP 可以修饰金属有机框架(MOF)，并仍然能够催化化学转化，如氢化反应和亚胺还原。使用后，MOF-FLP 组合很容易过滤分离并可循环利用多达七次而不降低催化活性【10】。类似的成功可能会推动该技术在不久的将来实现工业化应用。

摩擦电纳米发电机

摩擦电是一个引人入胜的特性——它会在气球与头发或聚苯乙烯泡沫与毛茸茸的猫之间产生静电粘附。更技术性地讲，摩擦电将机械能转化为电能。摩擦电纳米发电机则充分利用这一特性，从微小的运动和振动中发电。这种技术应用于传感器、能量收集、可穿戴设备和医疗保健领域。在过去的十年里，摩擦电纳米发电机从一个早期的想法和概念验证，逐渐发展成多种商业项目和技术。据一些初步研究，预计到 2030 年市场规模将翻倍【11】。到目前为止，化学家已

经从各种材料中制造出摩擦电纳米发电机，包括聚合物（聚二甲基硅氧烷、聚四氟乙烯、聚偏氟乙烯）、氧化石墨烯、金属（金、银、铜）和纺织品——以及通过多种化合物组合制作出具有协同效应的复合材料【12】。最近的研究重点是使用天然材料设计更环保的设备，这些设备成本低、可降解且生物相容，是合成解决方案的替代品——尽管它们仍然表现出较高的不稳定性、较短的使用寿命以及较低的功率密度【13】。虽然摩擦电纳米发电机在能量收集和储存方面表现出有趣的应用，但最令人兴奋的应用出现在传感领域，并扩展到了机器人技术【14】、致动器、可穿戴设备以及更重要的医疗设备等领域【15】。摩擦电特性允许从最微小的振动中自充电，从而实现自充电并以前所未有的精度和灵敏度检测生命体征和病原体【16】。早期研究还表明该技术可应用于可持续发展领域，包括水和空气净化。美国、英国和中国的几家公司目前正在研究扩大规模和商业化的可能性，这项技术有望颠覆多个传感领域乃至更广泛的行业。

适配体

在 20 世纪 80 年代发现的适配体，已经从早期阶段的技术发展为在临床试验中取得多个成功案例的解决方案。“适配体”字面意思是“匹配的部分”，指的是能以高亲和力和特异性结合其他分子的短链单链核酸（DNA 或 RNA）。这些单链核酸在形状和适应性方面具有独特的多样性，使得适配体能够采用多种不同的形状并与目标分子结合，目标可以包括蛋白质、肽、糖、毒素，基本上可以是从小分子到整个细胞

的任何物质【17】。其应用范围包括分析系统、分子成像、药物递送和靶向治疗。由于一种被称为 SELEX 的过程，适配体能够针对不同的目标表现出极高的特异性和灵敏度【18】。在第一步中，将单链寡核苷酸库通过装有目标分子的亲和柱进行洗脱。通过选择表现最佳的序列，DNA 和 RNA 链通过 PCR 扩增【19】，然后重复这个过程，直到最终筛选出最佳候选序列并对其进行纯化和表征【20】。适配体的选择性和灵敏度与抗体相当，能够检测纳摩尔和皮摩尔范围内的物质。然而，适配体的活性更加均一，且生产成本更低、可重复性更高。在药物递送和先进治疗领域，适配体还具有其他优势，表现出更好的组织穿透性，同时引发较低的、较温和的免疫反应【21】。在分析化学中，适配体已成功检测出可卡因等药物、四环素类抗生素【22】，并且通过与微流体阵列的结合，甚至能够在清醒动物的血流中实现许多分子的实时、连续监测【23】。此外，适配体在作为特异性治疗药物方面展现了巨大的潜力。美国食品药品监督管理局（FDA）已经批准了两种适配体用于药物治疗：用于治疗黄斑变性的佩加他尼（商品名为 Macugen）【24】，以及用于治疗地图样萎缩（另一种导致视力丧失的退行性疾病）的阿瓦辛卡普（商品名为 Izervay）。其他适配体目前正在进行临床试验，用于治疗癌症、心血管疾病、神经退行性疾病和病毒感染等【25】。新的研究还表明，适配体可能有助于为化疗提供更好的药物递送系统，包括治疗和监测恶性肿瘤如胶质母细胞瘤【26】。总体而言，适配体为更安全的健康解决方案提供了重要进展。

MXenes

2004 年石墨烯的分离引发了对二维材料的探索，这些材料也被称为层状材料，因为并非所有的这类材料都在技术上是平的【27】。在这些奇妙材料中，MXenes 作为一种新兴的层状过渡金属碳化物、氮化物和碳氮化物，于 2011 年首次被报道【28】。在短短十年内，研究人员报告了 MXenes 在能源存储、环境修复、电子学、通讯、气体吸附、水过滤等多个领域的应用【29】。其拥有超过一百种制备成分的可能组合并且在制造策略方面即将实现量产，MXenes 被誉为二维材料中的“影响者”，并推动了由半导体和电子行业巨头如英特尔和三星等公司授权的专利发布【30】。

MXenes 的部分潜力依赖于其显著的多功能性（可由组成成分定制的导体或半导体性能）、耐用性和弹性。像石墨烯一样，MXenes 的分散液和油墨使得各种设备的生产成为可能，如打印和喷涂。但与石墨烯不同的是，MXenes 膜和柔性设备保持了分散片层结构的优良性质——这被专家称为“致命优势”【31】。MXenes 最有前景的应用之一是电化学和能源存储，包括关键技术如电池和超级电容器。无论在液体还是固体电解质中，MXenes 似乎都能提升氧化还原反应性、催化活性以及其他通常在包括析氢反应和二氧化碳还原反应在内的电化学反应中研究的性能指标，。MXenes 掺杂的电解质在固态电池和超级电容器中也展示了提高的性能——这两种关键技术可能有助于解决能源危机和可再生能源的间歇性问题【32】。MXenes 的能源存储能力还可能应用于功

能性记忆体和人工神经元——未来充满了惊喜【33】。

水合润滑

这个概念是一种特殊的悖论。在某些材料和条件下，层间因静电相互作用而保持粘合，但在剪切力的作用下迅速放松，这提供了显著的流动性和极其高效的润滑。这就是水合润滑——一种在被夹在表面间的水合离子、表面活性剂、脂质体及其他分子中观察到的现象，常见于生物系统中，例如润滑关节的滑液【34】。水的显著特性可以减少摩擦能量。尽管确切的机制仍在研究中，但一些研究表明，在压力下，粘度会以某种方式增加而不导致固化——这可能是因为固态水的密度低于液态水，这与其他溶剂相反【35】。这引发了在生物医学领域的应用研究，主要集中在与关节周围软骨润滑相关的运动问题上。关节，尤其是髋关节和膝关节，承受着巨大的压力，这反过来导致退化和疾病如骨关节炎，根据世界卫生组织（WHO）的数据，骨关节炎影响了超过五亿人，并且患病率正出现令人担忧的上升【36】。一些初创公司正在相关技术领域工作，主要是在脂质体润滑方面，这似乎能够提供与健康软骨相当的效果。具体来说，以色列公司 **Liposphere Ltd** 成功完成了一项临床试验，确认了在骨关节炎患者中减少疼痛的效果，并且没有报告不良反应。该公司还启动了一项多中心、双盲、随机试验，共 150 名受试者。其他研究者正在探索水合润滑在低摩擦凝胶生产中的应用，这些凝胶可用于软性隐形眼镜、导管涂层以及其他系统，如组织工程和康复用的支架。此外，这些用于水合润滑的合成水

凝胶可能有助于揭示生物润滑剂的真实工作机制【37】。即使仍处于起步阶段，对水合润滑的理解和研究可能在不久的将来带来非凡的成果。

仿生纳米流体离子电子学

模仿大脑行为是开发更高效计算机的基础，而在这一探索中，化学起着关键作用。2021 年，研究人员描述了仿生纳米流体离子电子学，这是一项可能催生基于化学的计算系统的技术，并进而促进脑机接口、人工神经元、感官假体等的发展。研究人员通过模仿神经突触的机制——在这种机制中，离子传递信号和信息——设想了一种充满电解质的纳米流体系统，该系统可以像记忆效应晶体管（或称忆阻器）一样工作。模拟的电解质单层显示出类似于突触的行为——具有自发的电压尖峰。尽管最初的概念验证纯粹是计算性的【38】，但它激发了一系列领域内的研究。例如，在第一次研究之后的几年内，纳米流体离子电子学成功展示了信号处理和传输，这通过调节牛蛙心脏的心脏活动得到了证明。这表明，纳米流体设备可能会变得生物相容——能够有效地在生物系统和人工系统之间传递和翻译刺激和信号【39】。不久后，研究人员还发现了实际应用，例如一个作为忆阻器工作的纳米流体设备的实验例子——这是朝向类脑计算的有希望的一步【40】，这种计算系统旨在复制生物大脑处理信息的方式，包括并行处理、学习、沟通和适应。这类系统将减少经典计算机的能源需求，而这些能源需求在人工智能（尤其是大型语言模型）和基于云的物联网解决方案不断兴起背景下，成为

一个日益令人担忧的环境问题。此外，纳米流体离子电子学可能为生物医学设备提供关键功能，特别是在需要高灵敏度和准确度的分析系统中，以及在能量收集和储存方面【41】。这些可能性看起来非常有前景——甚至是无限的。毫无疑问，纳米流体离子电子学可能很快会绕过摩尔定律的限制【42】。

KRAS 抑制剂

根据世界卫生组织（WHO）的数据，癌症是全球第二大致死原因【43】。而 KRAS（Kirsten 大鼠肉瘤病毒的缩写）是最常见的致癌基因——一种具有引发癌症潜力的突变基因。因此，理解 KRAS 及开发和设计药物以阻断其作用，已成为药物化学和药理学领域的巨大挑战。然而，直到最近，抑制 KRAS 的努力被认为没有成功，甚至有许多人称该致癌基因为“不可药物化”【44】。幸运的是，2013 年，研究人员发现了首批可以共价且选择性地结合 KRAS 相关蛋白中突变的半胱氨酸残基的分子【45】。然后在 2016 年，一小系列成功的抑制剂进入了市场【46】。很快，临床研究开始了，令人惊讶的是，使用如 sotorasib(Lumakras®)和 adagrasib(Krazati®)等药物获得了积极而鼓舞人心的结果——其中前者在 2021 年成为首个获得临床使用批准的 KRAS 抑制剂。事实证明，这些分子的作用机制之前是未知的，但通过化学家、生物学家和医学专业人员的多学科合作，终于揭示了这一机制，这是药物发现中的一个重要里程碑。专家表示，许多患有 KRAS 突变癌症的患者可能会因这些简单的小分子药物而获得更长、更好的预后【47】。显然，首批 KRAS 抑制剂引发了该领

域的创新。目前,许多新分子已经加入了 sotorasib 和 adagrasib 的 KRAS 抑制剂库中,制药公司继续开展这些新药物的临床试验——以及与现有化疗和免疫疗法药物的组合。KRAS 抑制剂的进展为应对肿瘤学中的主要和最常见挑战之一铺平了道路【48】。

神经网络势

近年来,机器学习 (ML) 和人工智能 (AI) 已经彻底改变了化学和材料科学,这在 2020 年和 2023 年的“十大前沿”中得到了突出展示【49】。再次,算法与我们同行,带来了神经网络势 (NNPs)——一种开创性的工具,能够以速度和准确性模拟分子尺度的系统。NNP 专家的梦想是实现保罗·迪拉克的愿景——利用量子力学统一物理学和化学,可能为更好地理解材料科学、生物学、地球科学等领域提供强大的工具【50】。NNPs 通过使用如薛定谔方程解等数据集进行训练,成功展示了在计算化学中的多个应用,简化和加速了否则复杂且耗时的任务,并且取得了更好的结果【51】。NNPs 的优势包括充分利用机器学习、大型语言模型和其他技术,加速分子模拟,从基本输入中学习预测如能量水平和力等属性,获取以前无法达到的结果。传统上,这类计算需要庞大的资源和功率。由于 AI 和计算能力——特别是高性能计算机——的获取日益有限,并且与环境、能源和气候问题相关联【52】, NNPs 可能绕过多个问题,尤其是与模拟规模相关的问题。大型科技公司已经开始在 NNPs 领域进行研究,包括谷歌的 DeepMind 等【53】。这种创新的 ML 方法有可能催生

更快速的模拟，因此推动更具创造性的化学思想。

主动吸附

在 20 世纪 30 年代物理化学的鼎盛时期，欧文·朗缪尔和约翰·伦纳德-琼斯制定了吸附的规则和定律。他们确定了吸附剂附着在表面上的两种不同方式——物理吸附 (physisorption)，即由范德华力产生的吸附，以及化学吸附 (chemisorption)，即由电子相互作用产生的吸附。此外，吸附被分析为一种“被动”过程，其中吸附剂趋向于从高浓度区域转移到低浓度区域以维持总体平衡。然而，2021 年的一项发现挑战了这一教条【54】。化学家能否使吸附成为一个主动过程？显然，主动吸附确实发生了——这要归功于诺贝尔奖获奖的分子机器。固定在表面上的合成分子机器可以“抓住”并移动分子，从而对抗平衡状态，这一过程仅需少量外部能量推动。主动吸附（也称为“机械吸附”，因为其机械机制）的第一个例子使用氧化还原反应在修饰有分子机器或“泵”的金属有机框架的表面吸附和脱附一种缺电子联吡啶环蕃化合物【55】。尽管仍处于基础概念验证阶段，但一些研究已利用机械吸附的概念开发了自组装材料和其他超分子结构【56】。此外，由于主动吸附对抗平衡状态，一些研究人员推测它可能创造出新的能源生成和储存技术，并使化学计算成为可能，因为这些合成系统与电容器等组件相似。其他应用可能出现在表面和界面作用频繁的溶液中——如催化、气体捕集、水净化和药物输送。机械吸附可能为以控制方式操控分子创造新的方法学——这有可能成为真正的游戏规

则改变者。

电化学氮循环

可持续合成氨——作为对传统能耗巨大的哈伯-博施工艺的替代方案，该工艺直接产生全球 1.5% 的二氧化碳排放【57】——在 2021 年进入了“十大新兴技术”名单【58】。随后，电催化作为一种强大的工具出现，用于去碳化哈伯-博施工艺，并利用太阳能和风能等可再生能源提供电力。然而，合成氨只是一个更大问题——氮循环——的一部分。其他反应，如氨氧化为硝酸盐（奥斯瓦尔德工艺）或将这些硝酸盐还原为氮气，仍然面临若干电化学挑战。因此，氮循环的整体电气化离现实还很远【59】。但这种电气化可能在可持续性方面带来丰富的优势。例如，过量使用合成氮肥引发了污染问题，如富营养化，即在营养丰富的区域中不需要的微生物过度生长，它们与作物争夺养分和氧气。将硝酸盐还原回氨可能有助于减少农田的污染，并提供比大气中 N_2 更具反应性的氮源。就像电化学氮还原一样，研究表明金属铜可以催化硝酸盐转化为氨【60】。这种方法遵循绿色化学和循环经济的原则，并可能真正“变废为宝”【61】。除了铜之外，其他基于丰富元素如锌、镍和铁的金属催化剂在硝酸盐还原为氨以及其他物质（包括尿素、一氧化二氮和氮气）的研究中也取得了成功。尽管氨是一种良好的肥料，电化学家仍在研究大气氮直接转化为硝酸盐的可能性——主要是因为盐类更易于运输和分配。此外， N_2 的氧化还可以获得硝酸，这在化学工业中是一种重要的原料。以钨、钛、锌、铁和钴为基础

的电催化剂已显示出有前途的结果【62】。最后，另一个有趣的反应是将氨转化回氮，这除了在环境修复中的应用外，还可能为电力生成和绿色燃料提供新的可能性。氨是一种常见的氢“载体”，是环保能源的宝贵载体【63】，因为它具有高的体积和质量能量密度，并且储存和运输成本更低、更安全。然后，氨要么转化回氢气和无害的氮气，要么直接作为燃料电池中的能量来源。在这里，基于贵金属如铂、钯和铱的催化剂表现优于基于更丰富元素的替代催化剂。然而，进一步的研究肯定会通过更清洁的催化剂取得更好的结果【64】。面临许多不同的障碍——电气化氮循环意味着重新塑造和重新思考当前化学工业的核心【65】。不过，这是一个有趣的想法。

结论

令人着迷的是，年复一年，“十大新兴技术”揭示了具有真正潜力的化学技术，这些技术有可能改变我们的世界。这反映了化学作为连接科学的真实多样性，它作为一种跨学科催化剂，能够并将加速我们社会的可持续解决方案【66】。这一 IUPAC 倡议正在不断发展，成为创新的灯塔，同时也激发了新的合作机会，最终“弥合”学术实验室和具有影响力的工业应用之间的差距。“十大新兴技术”家族现在已经扩展到六十项技术。如果您发现了化学科学中的任何有意义的发展，请花时间向我们提交您的想法！IUPAC 通过一个公开可用的链接收集推荐，请关注并提交您对 2025 年的提名。

致谢

F.G.-B. 要感谢所有为 2024 年《十大新兴技术》提供想法和提交内容的人员，以及参与最终评选的专家评审团，包括：Ehud Keinan、Javier García Martínez、Molly Shoichet、Juliane Sempionatto、Mamia El-Rhazi、Jorge Alegre Cebollada、Bernard West、Natalia Tarasova、Zhigang Shuai、Rai Kookana 和 Kira Welter。特别感谢 Michael Dröscher，自 2019 年倡议启动以来，他一直负责协调这一活动；感谢 Fabienne Meyers 在编辑过程中的全力支持；感谢 Greta Heydenrych、Wolfram Koch、James Liu 和 Arasu Ganesan 在会议中的贡献。最后，特别感谢 Bonnie Lawlor，她以无限的耐心组织会议、记录会议纪要，并修订了这篇文稿，大大提高了其可读性和质量。