

·成果简介·

# 自然科学基金推进我国计算地球化学 研究立足国际学术舞台

郭进义

(国家自然科学基金委员会地球科学部,北京 100085)

[关键词] 科学基金,推进,地球化学,国际舞台

经 *Geochimica et Cosmochimica Acta* (GCA, 地球化学与宇宙化学学报) 主编帕多瑟克(Frank Podosek)博士提名、美国地球化学学会审查批准,中国科学院地质与地球物理研究所段振豪研究员最近被聘请担任该刊副主编(Associate Editor)。GCA 是由地球化学学会(The Geochemical Society)和陨石学学会(The Meteoritical Society)两大国际性学会主办、爱思唯尔出版公司(Elsevier Science Ltd)出版的半月刊,属于国际地球化学领域最权威的期刊,在地球科学领域非评述性国际期刊中其 SCI(科学引文索引)影响因子(3.897)名列第一,其副主编均为国际地球化学和宇宙化学领域的顶尖科学家。段振豪是担任该刊副主编的首位中国科学家。

段振豪博士于 2002 年从美国加州大学圣迭戈分校回国后被中国科学院地质与地球物理研究所聘为“引进国外杰出人才”研究员,在国家杰出青年科学基金和中科院“百人计划”的支持下,迅速建立了一个计算地球化学实验室。四年来他在国际权威期刊上发表了 20 多篇论文,仅在 GCA 上就发表了 10 多篇第一作者论文。他的第一作者论文被 SCI 文章引用了近 500 次,被引次数以每年约 70—80 次的速度上升,这在地学领域是非常突出的。2005 年段振豪博士在中科院资源环境领域 23 个研究所中被评为三个优秀“百人计划”之一。在开拓国内计算地球化学领域研究的同时,他还培养了一支优秀的研究队伍,该所有史以来唯一的院长特别奖获得者即来自其研究组。2005 年段振豪博士继续得到了国家自然科学基金重点项目的资助。

段振豪博士主要从事地质流体物理化学和分子

动力学计算机模拟研究。在该领域多个研究方向取得了突出成果:(1)建立了多个具有预测性的状态方程,可用于计算由水-气-盐组成的地质流体的相平衡、化学位、焓、压力-温度-体积(PVT)性质等方面的物理化学性质。这些方程在实验的基础上具有很强的外延性和预测性,其中一个方程仅根据 500℃、2000 大气压以下的甲烷的 PVT 数据,结合一些分子动力学模拟的结果,就成功地从一个很小的温压范围外推到很宽的温压范围、从一个组分(CH<sub>4</sub>)外推到其他组分(如 H<sub>2</sub>O)、从纯体系外推到混合体系、从 PVT 数据外推到相平衡和自由能,预测的温压和组分范围超过世界上 30 多个实验室 100 多套实验数据的总和。该项成果为研究水岩反应、包裹体形成条件、油气形成和运移、油气和地热开发、多组分多相时空模拟、热液矿床成因、CO<sub>2</sub> 储藏和甲烷水合物形成条件提供了非常有用的理论工具,被世界上 30 多个国家的科学家引用,并被多个国际石油和地热公司所使用。(2)利用分子动力学的原理成功地模拟了地质流体的搬运、结构和热力学性质,首次用蒙特卡罗方法模拟了天然流体的相平衡和金属离子水合物的水溶特性,该项成果为计算机模拟地球化学研究开辟了新的途径。(3)结合物理化学模型和分子动力学原理,预测了超临界流体的多种物理化学性质,把实验研究的温压范围(小于 1000℃、1.013 GPa)扩展到 2000℃和 10.13 GPa,为高温高压地球化学定量研究创立了一个重要的理论工具,被国际同行誉为计算地球化学领域的一大成就。(4)利用物理化学模型成功地研究了许多地球化学问题,如柴达木盆地钾盐成因、墨西哥湾天然

本文于 2006 年 12 月 28 日收到。

气赋存状态、拉斯维加斯地热流体物化状态等。

近几十年以来,上百个国际实验室测试了数以万计的有关地质流体的物理化学数据,但这些数据仅局限于上地壳温压范围内,并且多局限于一元和二元体系。段振豪博士利用分子动力学、统计力学和热力学相结合的办法,把已有的实验数据应用范围扩大了近一倍,其科学意义和应用价值不言而喻。上述理论成果被许多后续实验所证实,并被世界上多个国家的研究者应用于地球早期大气演化、包裹体、地热、甲烷水合物、天然气、水岩反应、有机成因

分析、二氧化碳储藏等广泛领域的研究。此外,段振豪研究组建立的地球化学计算网站 [www. geochem-model. org](http://www.geochem-model.org) 被全世界 50 多个国际的科学家所利用,平均每月有 400—500 科学家访问。段振豪博士还多次担任国际学术会议主席。

段振豪博士在国家自然科学基金大力资助下,不仅建立了国内第一个国际领先水平的计算地球化学实验室,而且其领导的研究小组已成为立足计算地球化学领域国际舞台的一支生力军。

## NATIONAL NATURAL SCIENCE FUND PROMOTE THE COMPUTATIONAL GEOCHEMISTRY IN CHINA PLAYING A ROLE ON THE INTERNATIONAL ACADEMIC ARENA

Guo Jinyi

(Department of Earth Sciences, NSFC, Beijing 100085)

**Key words** Science Fund, promotion, geochemistry, international arena

·资料·信息·

### 化学研究所在有机场效应晶体管研究取得新进展

在国家自然科学基金委员会、科技部、中国科学院的大力支持下,化学研究所有机固体院重点实验室刘云圻研究员、张德清研究员、朱道本院士和他们的研究生,近期在利用有机氮氧自由基为半导体材料制备的场效应晶体管的研究方面取得新进展,有关研究成果申请了中国发明专利并发表在近期的 *J. Am. Chem. Soc.* (2006, Vol. 128, No. 40, pp. 13058—13059)上。

有机自由基通常是顺磁性分子,有一个或多个未成对电子,每个未成对电子向分子提供  $S=1/2$  自旋,已被广泛应用于有机导体,有机超导体,有机半导体和有机磁性材料方面。有机自由基具有优良的成膜性;对多种物质敏感,可作为传感器的活性材料;在固态下显示出良好的磁性,可用于制备多功能

器件。因此,在有机薄膜器件方面应用前景广阔。该研究首先合成了 2-苊氧-4,4,5,5-四甲基咪唑啉-1-氧自由基,研究了该有机半导体的磁性能表征和薄膜性能,并以它为半导体材料,以  $\text{SiO}_2$  (450 nm) 为绝缘层制备了场效应晶体管。结果表明,采用该化合物制备的器件显示出良好的 p-型场效应性能,场效应迁移率高达  $0.1 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ ,开关比为  $5 \times 10^4$ ;同时该器件具有较低的阈值电压(约  $-0.6 \text{ V}$ )和亚阈值斜率( $540 \text{ mV decade}^{-1}$ ),保证了器件可以在较低的操作电压下工作。这一研究进展,预示着 2-苊氧-4,4,5,5-四甲基咪唑啉-1-氧自由基将有可能成为新一类的有机半导体材料。

(中国科学院化学研究所 供稿)