

知识图谱视角下的全球分子机器发展态势研究

张亚泽¹, 段黎萍², 李志荣¹

(1. 中国科学技术信息研究所, 北京 100038;
2. 科学技术部科技人才交流开发服务中心, 北京 100045)

摘要: 通过文献计量方法对分子机器的发展脉络和研究趋势进行分析, 发现国家、机构、科研人员的合作情况及热点的变化。使用科学知识图谱软件 CiteSpace 对 1959 年—2019 年 7 月 25 日、检索自 Web of Science 核心合集数据库中的文献进行分析, 挖掘分子机器领域的国家、机构、科研人员的合作情况, 并通过关键词聚类分析发现研究热点及发展趋势。美、英、法、意、荷、日是当前全球分子机器领域研究实力较强的国家, 中国发文量较大但影响力稍弱; 机构间的合作主要集中在美国和欧洲之间, 中国与日本、美欧之间的合作较少; 以斯图达特为代表的欧美国家研究人员具有较大的国际影响力, 相比之下, 中国研究人员在国际上的影响力较低; 分子机器目前正在从设计合成、控制复杂结构分子运动向新材料和新功能器件的突破方向发展。

关键词: 分子机器; CiteSpace; 机构合作网络; 作者合作网络

中图分类号: G350 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3772/j.issn.1009-8623.2019.10.008

分子机器 (Molecular Machines) 是继超分子化学之后化学领域又一新兴研究领域, 它的研究将会影响人类在纳米级空间内实施宏观世界的机械操作, 以及复制和操控生命体内部蛋白分子的运动和能量转换方式^[1]。在生物学领域, 研究人员很早就开始了关于生物发动机将光能和化学能转变为机械能现象的研究。受到生物分子机器的启发, 化学领域关于构建纳米水平, 可通过光、电、pH 值等控制分子运动的研究日渐增多。由于尺寸小、多样性、自组装、自适应等其他人造机器难以比拟的性能, 分子机器在生物医药、物理等领域具有极高的潜在价值, 对于生物学、医学、物理学等领域均有重大意义, 因此备受世界关注。2016 年的诺贝尔化学奖颁发给了对分子机器有卓越贡献的让-皮埃尔·索维奇 (Jean-Pierre Sauvage)、J·弗雷泽·斯

托达特 (J. Fraser Stoddart) 和伯纳德·L·费林加 (Bernard L. Feringa) 3 位科学家, 以奖励他们在分子机器的合成方案及结构设计方面的卓越贡献, 说明了科学界十分看好分子机器的广阔发展前景。

分子机器的概念最早可以追溯到美国物理学家理查德·费曼 (Richard Feynman) 于 1959 年提出的设想^[2], 之后, 法国、美国、荷兰、日本和中国等国的许多学者都对设计和合成分子机器做出了很多努力^[3]。经过多年发展, 分子机器经历了从机械键到机械分子互锁、从分子开关到分子机器、从分子马达到分子车的发展, 结构、种类不断增多。目前, 关于分子机器的研究, 已经进入到一个新的阶段, 面临着新的机遇和诸多不确定性, 相关领域的科研人员亟需对其研究现状和未来趋势进行系统梳理, 以更好地把握研发热点, 选择和确定研究方

第一作者简介: 张亚泽 (1994—), 男, 硕士研究生, 主要研究方向为产业竞争情报。

通讯作者简介: 李志荣 (1978—), 女, 博士, 副研究员, 主要研究方向为新材料与制造领域科技信息分析、创新评价。邮箱: lizr@istic.ac.cn

项目来源: 中国科学技术信息研究所重点项目“重点科技领域前沿跟踪与深度研究” (ZD2019-01)。

收稿日期: 2019-09-07

向^[4]。

有鉴于此, 我们从文献计量视角, 对分子机器领域的文献进行分析、总结, 挖掘分子机器领域的发展态势、研究热点、合作情况等, 以便为相关领域的机构和科研人员的未来研究及决策提供数据支持和参考。

1 研究方法和数据来源

1.1 研究方法

CiteSpace 可以通过文献中的作者、机构和作者关键词以及引用与被引用等信息进行文献的被引、耦合, 作者、机构的合作, 文献的时空变化等分析。其中, 利用 CiteSpace 进行学科热点和研究趋势的可视化分析正在被各领域的研究人员所熟悉。

石小岑等^[5]研究了 Web of Science 数据库中 2013 年至 2015 年的 234 篇关于 MOOC 的文献, 分析了 MOOC 相关领域的前沿热点与演化路径; 王娟等^[6]运用 CiteSpace 的时空图谱功能分析了国内外教育大数据的研究热点和发展趋势; 房慧莹等^[7]使用 CiteSpace 探讨了工作场所暴力现象的热点和趋势; 冯雪等^[8]利用 CiteSpace 分析了 1982 年至 2016 年中国生物质能源领域的研究成果和演进规律。这些研究, 为我们采用 CiteSpace 对分子机器的发展脉络和研究趋势进行分析, 发现国家、机构、科研人员的合作情况提供了很好的借鉴。CiteSpace 能够从宏观层面勾勒研究领域的发展概况, 不同机构、学者之间的合作情况, 但无法对涉及领域细节的部分进行描述, 因此还需要对图谱结果进行深度解读。

本文首先利用文献计量法对分子机器相关文献的论文情况进行了统计分析, 然后利用知识图谱分析软件 CiteSpace (版本: 5.5.R1) 对这些文献的作者、机构、国家间的合作情况和贡献程度进行了分析, 最后通过关键词的聚类 and 突变对研究热点的变化进行了梳理、分析。

1.2 数据检索及处理

文献检索式为: “((TS= (molecular machine) AND TS= (((((((((((rotaxane OR motor) OR catenane) OR muscle) OR pump) OR switch) OR assembly) OR pseudorotaxane) OR rotaxane-like) OR nanotechnology)

OR bond) OR device) OR chain) OR calculator)) OR (TS= (rotaxane)) OR (TS= (catenane)) OR (TS= ((“molecular motor”) AND(“molecular machine”))) OR (TS= ((“motor”) AND (“molecular machine”))) OR (TS= ((“molecular machine*”))) OR (TS= ((“molecular shuttle*”))) OR (TS= ((pump) AND (“molecular machine*”))) OR (TS= ((pseudorotaxane*”))) OR (TS= ((rotaxane-like”))) OR (TS= ((“molecular machine*” AND (assembl*))) OR (TS= ((“molecular machine*” AND (motor*))) OR (TS= ((“molecular machine*” AND (chain)))) NOT ((SU= (“Immunology”) OR (SU= (“Cell Biology”) OR (SU= (“Computer Science”)))”, 检索时间范围为 1959—2019 年, 检索日期: 2019 年 7 月 25 日 (下文所有 2019 年数据均指检索日期前的数据)。语种选择 “English”, 文献类型限定为 article 和 review, 在 Web of Science 核心合集数据库中共检索到 10 328 篇文献, 借助科睿唯安的 DDA 软件对数据中作者和机构的多种形式署名方式进行了归一整理和清洗。

2 研究结果

2.1 分子机器领域全球研究态势分析

2.1.1 论文发表趋势及被引情况

从费曼提出分子机器的构想之后, 在很长一段时间内相关研究论文较少, 仅 1960 年有一篇相关的理论文献, 从 1972 年开始陆续有少量文章出现。直至 1991 年有了技术突破后才开始有了大规模的增长, 1991 年之前累计的发文章量不足 30 篇。1970—2018 年的分子机器相关文献发表情况如图 1 所示。

1960—1990 年是分子机器相关研究的探索期, 从论文发表数量看, 进入到 20 世纪 90 年代之后, 文献的数量较以往成倍增长 (仅 1991 年一年发表的文献量便超过了之前 30 年的总和)。索维奇团队^[9]在 1983 年发现了一种利用铜离子合成索烃的全新方法, 斯图达特团队^[10]在 1991 年阐述了最早的基于轮烷的分子机器, 这二人的研究极大地推动了分子机器的发展。1990 年之后的快速发展, 得益于超分子化学的飞速发展, 以及索维奇和斯图达特的贡献。受到索维奇和斯图达特的启发, 费林加团队^[11]于 1999 年发表了关于可在光照下实现 360 度旋转的分子马达的文章。2000 年之后, 分子机器

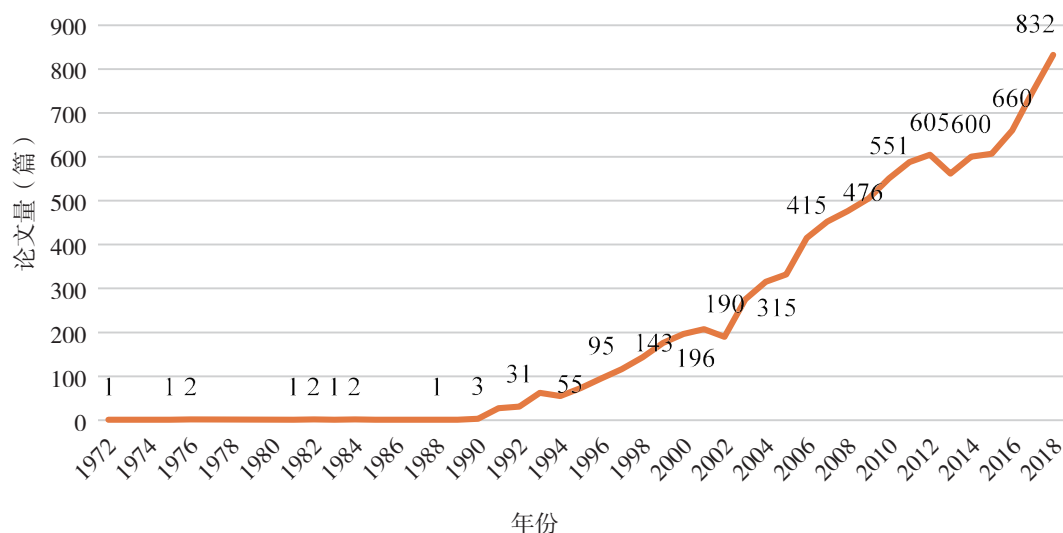


图1 分子机器论文逐年发表量

的研究迎来了爆发期,更多的科学家加入研究分子机器的队伍中,不仅设计制造了各种各样的分子机器,也开始探讨分子机器在生产生活中的应用。

为了发现论文研究主题之间的内在关系,我

们在 CiteSpace 中将网络节点选择为“reference”,获得了 10 328 篇被引次数最高的文献,具体情况如图 2 所示。

在图 2 中,每一个圆圈节点代表了一篇文献,

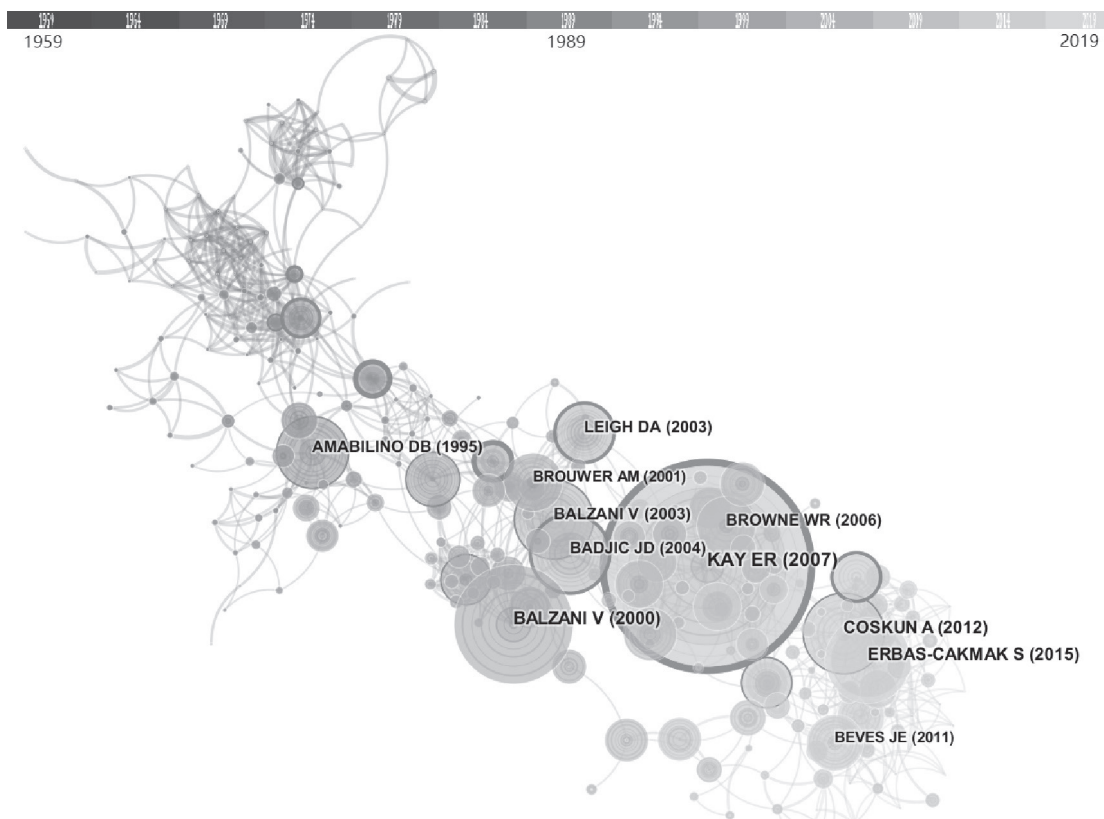


图2 10 328 篇文献的共被引关系图谱

节点靠左上的为发表年代较早的文献, 节点靠右下的为发表年代较近的文献, 被引次数越高, 代表文献的节点也就越大, 而节点外部的实线轮廓代表了该文献在共被引网络中属于重要文献。可以看到, 被引次数最高的一篇论文是 Kay ER 发表的题为 Synthetic Molecular Motors and Mechanical Machines 的文章, 被引次数为 835 次; 被引次数排第 2 的文献是 Balzani V 发表于 2000 年的文章; 排名第 3 的

是 Erbas-cakmak S 发表于 2015 年的文章。此外, 南开大学的学者刘育在 2005 年发表的文章被引 241 次, 在 10 328 篇文献中排名第 12, 薛敏博士 2015 年在浙江大学黄飞鹤课题组攻读博士后期间发表的文章被引 201 次, 排名第 20。具体的被引情况如表 1 所示。

从被引次数排名前 20 的文献类型来看, 共有 14 篇 review 和 6 篇 article。一般认为被引次数较

表 1 文献被引次数排名前 20 的文献情况

序号	标题	被引次数	第一作者	期刊名称	网络中心度	发表年份	期刊影响因子 (2018)	文献类型
1	Synthetic Molecular Motors and Mechanical Machines	835	Kay ER	Angewandte Chemie-International Edition	0.75	2007	12.257	review
2	Artificial Molecular Machines	513	Balzani V	Angewandte Chemie-International Edition	0.10	2000	13.257	review
3	Artificial Molecular Machines	359	Erbas-Cakmak S	Chemical Reviews	0.05	2015	54.301	review
4	Great Expectations: Can Artificial Molecular Machines Deliver on Their Promise?	342	Coskun A	Chemical Society Reviews	0.19	2012	40.443	review
5	Molecular Logic Circuits	340	Balzani V	Chemsuschem	0.2	2003	7.804	review
6	A Molecular Elevator	327	Badjic JD	Science	0.32	2004	41.037	article
7	Interlocked and Intertwined Structures and Superstructures	304	Amabilino DB	Chemical Reviews	0.16	1995	54.301	review
8	Making Molecular Machines Work	253	Browne WR	Nature Nanotechnology	0	2006	33.407	review
9	Unidirectional Rotation in a Mechanically Interlocked Molecular Rotor	248	Leigh DA	Nature	0.26	2003	43.07	article
10	Photoinduction of Fast, Reversible Translational Motion in a Hydrogen-bonded Molecular Shuttle	242	Brouwer A	Science	0.06	2001	41.037	article
11	Strategies and Tactics for the Metal-Directed Synthesis of Rotaxanes, Knots, Catenanes, and Higher Order Links	242	Beves JE	Angewandte Chemie-International Edition	0.09	2011	12.257	review
12	Linear Artificial Molecular muscles	241	Liu Y	Journal of the American Chemical Society	0.04	2005	14.695	review
13	Molecular Machines	240	Balzani V	Accounts of Chemical Research	0.18	1998	21.661	review
14	A [2]catenane-based Solid State Electronically Reconfigurable Switch	221	Collier CP	Science	0.19	2000	41.037	article

续表

序号	标题	被引次数	第一作者	期刊名称	网络中心度	发表年份	期刊影响因子 (2018)	文献类型
15	Active Metal Template Synthesis of Rotaxanes, Catenanes and Molecular Shuttles	220	Crowley JD	Chemical Society Reviews	0.13	2009	40.443	review
16	Macroscopic Transport by Synthetic Molecular Machines	214	Berna J	Nature Materials	0.03	2005	38.887	article
17	Photochemical Conversion of Solar Energy	213	Balzani V	Chemsuschem	0.02	2008	7.804	review
18	Artificial Molecular Rotors	205	Kottas GS	Chemical Reviews	0	2005	54.301	review
19	Sequence-Specific Peptide Synthesis by an Artificial Small-Molecule Machine	204	Lewandowski B	Science	0.27	2013	41.037	article
20	Development of Pseudorotaxanes and Rotaxanes: From Synthesis to Stimuli-Responsive Motions to Applications	201	Xue M	Chemical Reviews	0.04	2015	54.301	review

注：图 2 中实线中标注的热点文献在表中已加粗。

多的文献具有较大的影响力，能够较好地展现一定时间范围内的学科发展热点及专家对未来趋势的预测。结合图 2 及表 1 中的共被引网络中的关键文献，能够发现分子机器领域研究主题及其发展变化。

Amabilino DB (Stoddart JF 课题组) 于 1995 年发表在 Chemical Reviews 上的综述，阐述了机械互锁结构的发展。Collier CP (Stoddart JF 课题组) 于 2000 年发表在 Science 上的文章，介绍了利用 [2] 索烃在金属电极之间构造稳定分子开关的方法。Leigh DA 于 2003 年发表在 Nature 上的文章，介绍了通过控制机械互锁键组成小环围绕大环进行运动的方法，并总结了不同分子结构的优缺点；Badjic JD (Credi A 课题组) 于 2004 年发表在 Science 上的文章介绍了一种全新的复杂纳米级分子电梯，这种电梯能够传输的力量在 200 皮牛顿左右。被引次数最高的是 Kay ER (Leigh DA 课题组) 于 2007 年发表在 Angewandte Chemie-International Edition 上的一篇综述，该论文总结了至 2007 年为止在控制分子水平运动方面的成果以及利用合成分子进行机械运动的早期进展，同时文章也提出了一些困难与挑战。这些不同年代发表的文献，大致展现了分子机器研究从简单的机械互锁结构，到多个简单结构的组合及运动，再到复杂结构操控运动的演进过程。

2.1.2 国家 / 地区发文情况

为了了解分子机器相关研究在世界主要国家和地区中的分布情况，我们在 CiteSpace 中将网络节点设置为“country”，对数据集中的论文在 102 个国家和地区中的分布清理进行了统计，得到排名前 10 位的国家和地区的发文数量以及中心度情况，如图 3 所示。

中心度是指在网络中节点作为连接中介对于附近资源的控制能力^[12]，也就是作为媒介在网络中的重要程度，因此中心度越大则表明越重要，即影响力越大。在图 3 中，越靠近上侧，表明该国家发文数量越多，越靠近右侧，说明该国家发表的文章影响力更大。在图 3 中，纵轴为发表分子机器相关文献数量排名前 10 的各国家和地区的中心度，横轴为发表的文献数量，两条参考线分别为中心度为 0.1 和发表文献数量为 1 000 篇，参考线将图 3 分为 4 个象限。即处于第一象限内的国家可以被认为发文数量多且质量很高；处于第二象限内的国家则代表虽然发文数量不多，但是发文质量很高，影响力较大；处于第三象限内的国家表明发文数量相对较少且影响力较低；处在第四象限则代表了虽然发文数量很多，但文献的整体影响力较低。

从图中我们可以看到，处在第一象限的有美

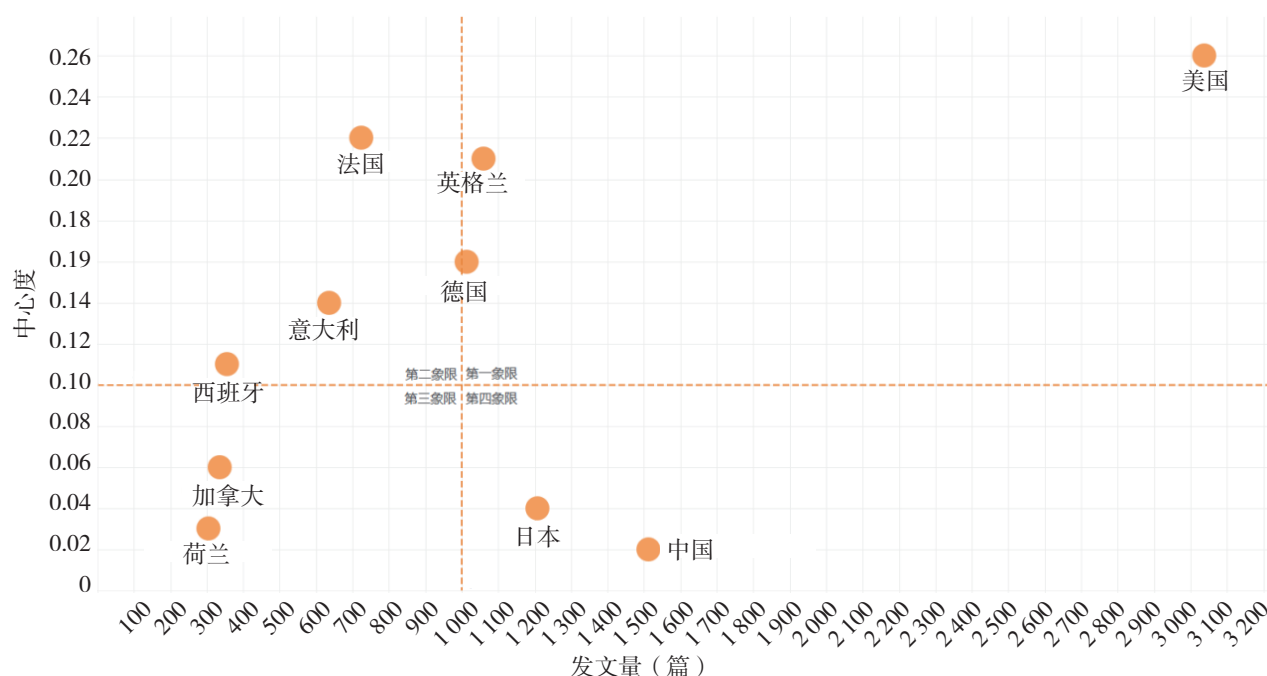


图 3 排名前十的国家发表数量和中心度情况

国、英格兰、德国,其中美国发文量最高(3 037篇)且文献影响力最大(0.26);处在第二象限的为法国、意大利和西班牙,这些国家都属于文章影响力较高但发文量较少;处于第三象限的为荷兰和加拿大,即发文量和影响力都相对较小;处在第四象限的有日本和中国,较为遗憾的是,中国虽然发文量仅次于美国,但文献的影响力即中心度只有0.02,与美国、法国、英格兰等地区相差较大。

为了获得各个国家/地区的研究人员在不同时间段开展分子机器研究以及合作情况的时间图谱,

我们在 CiteSpace 中将聚类方式选择为“timeline”,得到如图 4 所示的结果。

在图 4 中,每一个节点代表一个国家(地区),节点圆圈大,则说明该国家(地区)发文量较多,而外部有实线的节点则说明该国家(地区)在合作网络中处于重要的地位。占重要地位的国家有:美国、英格兰、法国、荷兰、意大利和德国,这 6 个国家在分子机器的研究中表现较为出色。

从时间线来看,美国、德国、英格兰、日本等国家和地区开展分子机器相关研究较早(1989 年

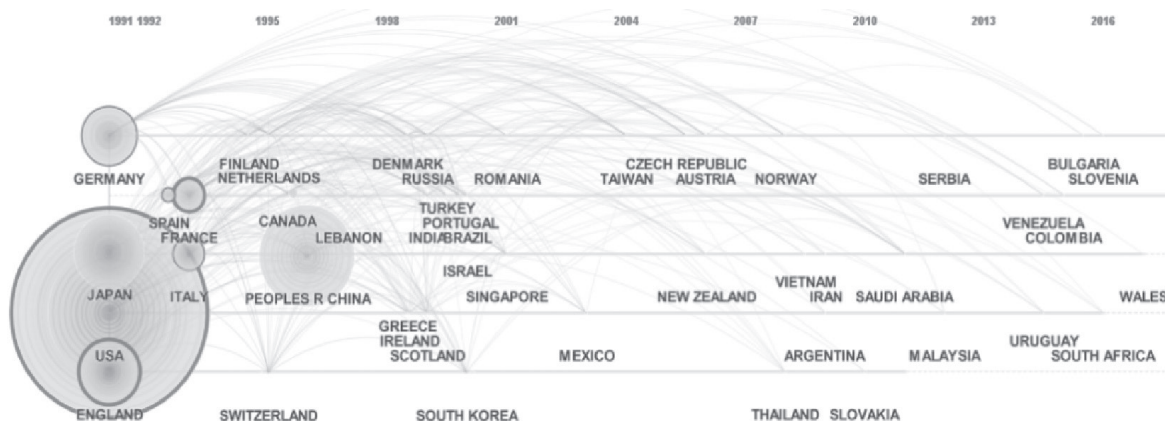


图 4 按时间线分布的国家和地区合作网络图

左右), 紧随其后的是法国、瑞典、西班牙等国家(1991—1992年), 这些国家和地区可以归类为最早开展分子机器研究的第一梯队, 由于开展时间早且发文数量大, 在国际上的研究地位也较高。1995年之后, 中国等国家才开始进行分子机器相关研究, 这些国家和地区可以归为开展分子机器研究的第二梯队。2000年之后, 陆续有其他国家和地区进入分子机器领域, 我们认为这些国家和地区可分类到分子机器领域的第三梯队。从图中的线条也能够看出, 合作较为紧密的国家和地区分布在第一梯队和第二梯队, 而从节点圆圈的大小和颜色深浅来看, 中国是第二梯队中研究实力最强劲的国家, 说明中国的科研水平正在贴近世界一流水平。

2.1.3 机构合作情况

检索到的10 328篇分子机器文献来自于3 585个机构。在3 585个机构当中, 发表文献数量超过100篇的有14个, 发表文章数量最多的3个机构是加州大学洛杉矶分校(305篇)、中国科学院(265篇)和博洛尼亚大学(240篇)。为了得到机构之间的合作关系, 我们在CiteSpace中将选择网络节点选为“institution”, 可得到如图5所示的图谱。

在图5中, 机构发文量的多少决定了圆圈的半径, 颜色的深浅代表了机构在不同时间段发文量的多少, 颜色越深则表示发文时间越早。而节点之间连线的深浅则代表了机构之间的合作紧密程度, 圈

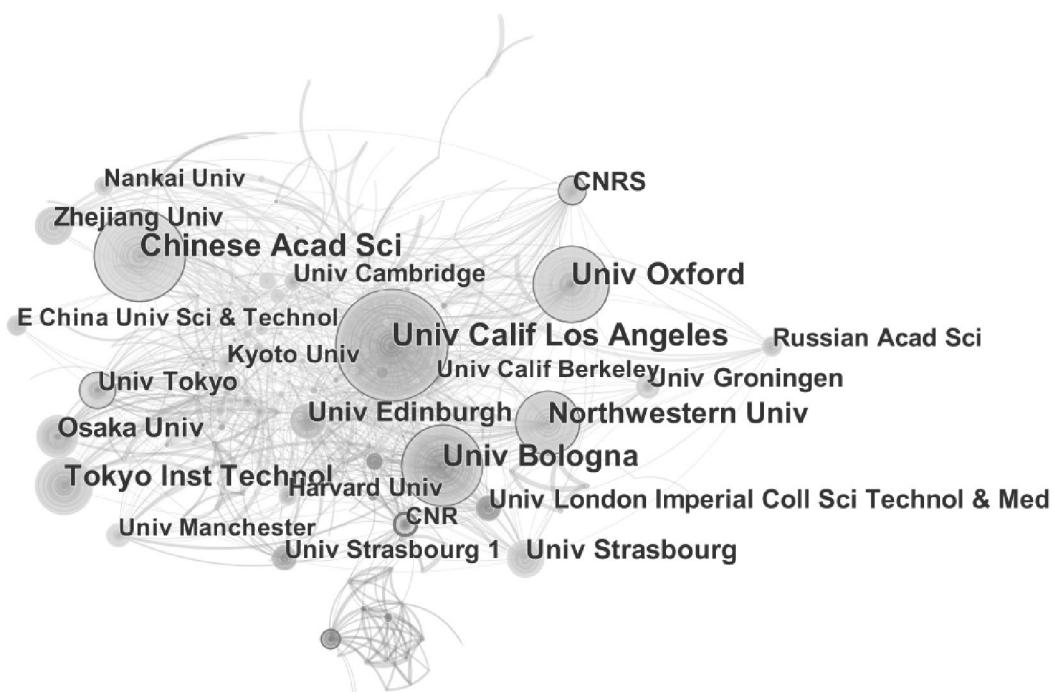


图5 机构合作网络图

外实线突出显示则表示该节点在网络中的影响力较大, 是关键节点。可以看出, 机构的合作网络情况与国家之间形成了对应, 美国、英国、法国、意大利、日本、中国的机构占据了网络的大部分。从机构之间联系的角度看: 欧美之间机构的联系较为密切, 美国加州大学洛杉矶分校、意大利博洛尼亚大学、英国牛津大学、法国国家科研中心、意大利国家研究委员会、美国西北大学、英国帝国理工学院、美国加州大学伯克利分校、法国斯特拉斯堡大学、

英国爱丁堡大学等机构之间的连线非常繁密。而中国的中国科学院、浙江大学和华东理工大学彼此之间虽有联系且发文量较多, 但与欧美之间的机构合作还是较少; 日本的几所机构发文量虽不及中国, 但开展研究更早且与欧洲联系比中国紧密。

处于机构合作网络中关键节点的机构有美国的西北大学和加州大学洛杉矶分校、中国的中国科学院、英国的牛津大学、法国的国家科研中心、意大利的国家研究委员会以及日本的东京大学, 除了

早期发表的文献外, 这几个机构参与了多数的论文合作, 也可以说明这几个机构在分子机器领域的研究实力较强, 聚集的人才较多, 因此发表的文献多。在关键节点中, 中国科学院延伸的连线颜色较浅, 说明其参与发表的文献年代较近, 也侧面说明了中国开展相关研究的时间晚于欧美日等国。中国的机构虽然在发文影响力上有所欠缺, 但近些年中国机构的合作发文量不断增加, 这说明中国学者的研究正逐渐被全球范围内的学者所认可。

2.1.4 作者合作情况

在检索到的 10 328 篇文献中, 发表文章数量

最多的 3 人分别是斯图达特、李和索维奇, 分别发表了 444 篇、160 篇和 157 篇。这三人之中斯图达特和索维奇是分子机器较早的探索者, Leigh DA 则是新一代分子机器研究者中的领军人物。在 CiteSpace 中网络节点选择“author”, 对获取的 SCI 数据之中的发表文章的作者合作关系进行分析, 得到作者合作网络图如图 6 所示。

图 6 中, 每一个圆圈节点代表了一个作者合作网络的个体, 节点大小表示作者的发文量, 节点颜色的深浅代表了作者开展研究时间的早晚, 节点之间的线条则表明了两个作者的合作关系, 线条越密,

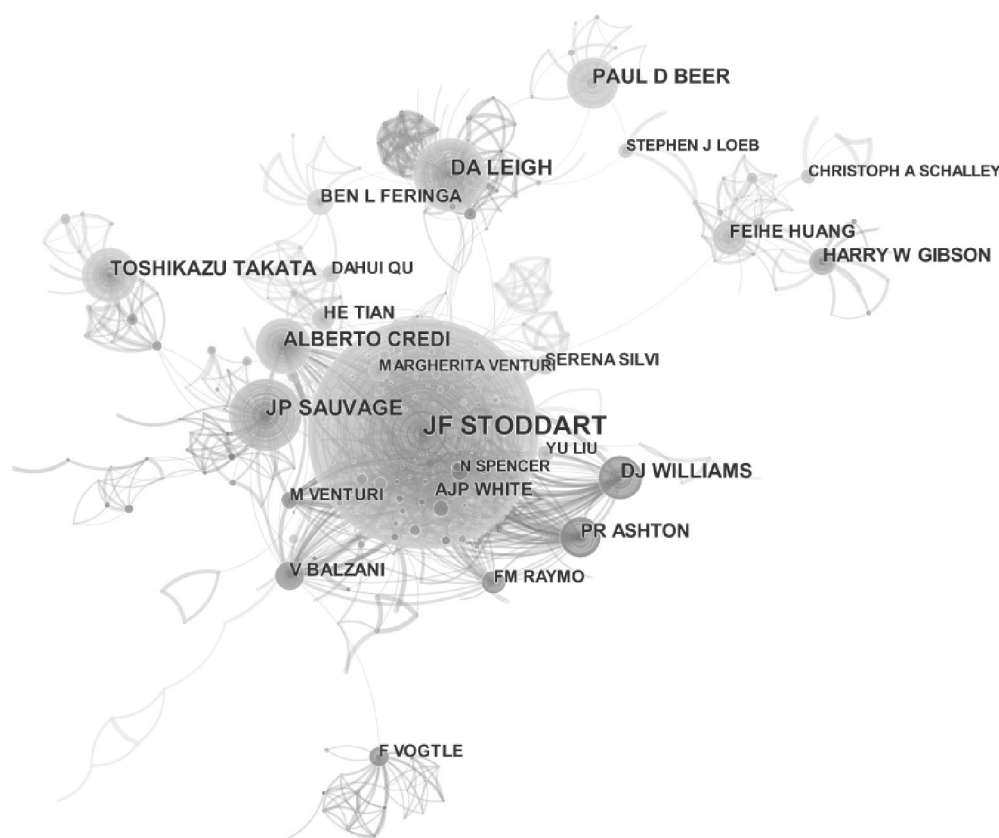


图 6 作者合作网络关系图

则代表二者之间的合作越密切。从图 6 中可以看到, 斯托达特占据了作者合作网络的中心, 影响力最大, 近半数的学者都与他有直接或间接的合作。李和索维奇的发文量和影响力仅次于他, 而与斯托达特同获诺奖的费林加的合作关系网络则显得相对独立。此外, 日本的学者与外界的合作也较少。

从图中能够看到中国在近 20 年涌现了一批在

分子机器领域做出较大贡献的学者, 如中科院的田禾、浙江大学的黄飞鹤、华东理工大学的曲大辉和南开大学的刘育等, 他们进行分子机器相关研究的时间同欧美知名学者相比较晚, 合作发文的数量却超过了大多数学者, 这说明中国在纳米科学、超分子化学等方向不断前进。从合作关系来看, 田禾和曲大辉都隶属华东理工大学, 二者之间的合作也较

为密切,此外,曲大辉曾经在费林加门下做过博士后。刘育与欧美学者之间的联系相对更加密切。黄飞鹤在博士期间师从于弗吉尼亚理工大学的 Gibson HW,两人的联系也较为密切。

2.2 分子机器研究热点及变化

2.2.1 基于作者关键词的研究热点分析

作者关键词是作者本人对于文章核心内容的概括和说明,体现了研究对象的特征,当多个作者使用同一关键词时,可以认为该关键词在一定程度上属于当下的研究热点^[13]。

根据分子机器的相关文献发表数量随年代的变化情况(见图1)能够看出,分子机器相关的研

究成果集中在1989年以后,故我们重点统计了近30年,即1989—2019年发表的论文的作者关键词,利用CiteSpace对每篇文献的作者关键词进行统计,在网络节点中选择“keyword”,将时间切片设置为1年,得到的1989—2019年作者关键词共现图谱(如图7所示)。

在图7中,每一个节点十字都是文献中出现过的作者关键词,这些关键词在所有的文献中重复的频次越多,它的十字就越大,关键词之间的线条越紧密就说明他们共现的强度越大,节点和线条的颜色越深则说明这些关键词出现和共现的时间越早。在1989—2019年的文献中,我们统

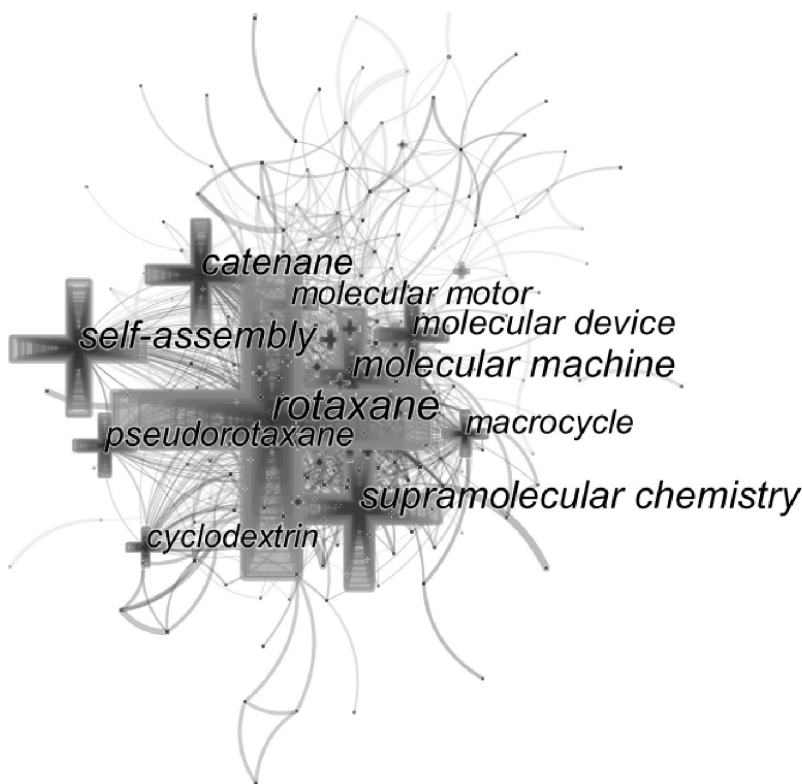


图7 1989—2019年作者关键词共现图谱

计得到了出现频率最高的前10个作者关键词和由CiteSpace计算得到的前10个中心度排名关键词,具体如表2所示:

从表2中可以看到,10个出现频率最高的作者关键词分别是:轮烷(rotaxane)、超分子化学(supramolecular chemistry)、自组装(self-assembly)、分子机器(molecular machine)、索烃(catenane)、分子器件(molecular device)、

类轮烷(pseudorotaxane)、分子马达(molecular motor)、大环(macrocyclic)、主客系统(host-guest system)。而根据中心度排名的前10个作者关键词分别是:分子机器(molecular machine)、自组装(self-assembly)、分子马达(molecular motor)、轮烷(rotaxane)、索烃(catenane)、分子器件(molecular device)、分子动力学(molecular dynamics)、超分子化学(supramolecular

表 2 1989—2019 年分子机器领域作者关键词词频与中心性前 10 名

序号	高频作者关键词			高中心度作者关键词		
	名称	频次	出现年份	名称	中心度	出现年份
1	rotaxane	690	1993	molecular machine	0.33	1997
2	supramolecular chemistry	361	1997	self-assembly	0.2	1993
3	self-assembly	314	1993	molecular motor	0.18	2001
4	molecular machine	311	1997	rotaxane	0.17	1993
5	catenane	273	1993	catenane	0.11	1993
6	molecular device	193	1997	molecular device	0.09	1997
7	pseudorotaxane	181	1996	molecular dynamics	0.09	1999
8	molecular motor	142	2001	supramolecular chemistry	0.08	1997
9	macrocycle	141	1995	dna	0.07	2002
10	host-guest system	124	2002	evolution	0.07	2009

chemistry)、脱氧核糖核酸(dna)、演变(evolution)。

无论是高频作者关键词还是高中心度作者关键词,出现时间都主要集中在1993—2002年,这段时间是分子机器高速发展的时期,这期间学者们较为关心的方面是分子机器的结构,如轮烷、索烃、分子马达;分子机器的自组装以及和分子机器相关的学科,如超分子化学、分子动力学等。从这些关键词也能够看出分子机器作为一个新兴的研究领域既独立发展又与其他学科保持着紧密的联系。

从图7中还可以看出,虽然“分子马达”出现的频次较高但是和其他关键词的联系没有“轮烷”和“索烃”那样密集,这说明“分子马达”的研究相对“轮烷”和“索烃”这两类结构更加独立一些,这在一定程度上合理解释了“分子马达”的开创者费林加(见图6)虽然发文量大但与其他学者的合作较少。

通过对作者关键词进行统计分析,我们发现:近年来,分子机器研究热点仍旧集中在轮烷、索烃和分子马达等结构及其衍生结构上。结合分子机器领域共被引文献的传递关系(见图2与表1),能够发现部分学者也在研究通过外界刺激更好地控制分子机器的运动方式。

2.2.2 研究趋势及相关突现词

通过统计方法来确定研究发展趋势的做法较为普遍^[14],CiteSpace使用了Kleinberg的突变检测算法来监测短时间内学科兴趣的突然增长^[15],该算法的特点是在一段时间序列内检测单个词语的突然出现,虽然具有一定程度的延迟性,但检测结果较为可靠。由于分子机器的实质性进展出现在1989年之后,故我们重点研究了1989—2019年之间的文献,将时间切片设置为1年,节点类型选择“keyword”和“burst terms”,在算法结果中选择“burstness”,选取突显强度为前10的关键词,所得结果如表3所示。

按照突现值排序的前10名分别是关键词分别是:索烃(catenane)、机器学习(machine learning)、自组装(self-assembly)、DNA纳米技术(dna nanotechnology)、阴离子(anion)、热力学(thermodynamics)、变构效应(allostery)、电子转移(electron transfer)、核糖体(ribosome)、点击化学(click chemistry)。我们可以看出,分子机器目前主要研究热点为构造更为复杂的分子机器结构及研究分子机器运动时的能量变化。此外,像机器学习、热力学、变构效应、点击化学等几个突现词,均是分子机器与其他学科交叉研究的相

表 3 分子机器相关研究的突现词前 10 名

序号	突现词名称	突现强度	突现时间段
1	catenane	25.766 7	1993—2001
2	machine learning	16.880 0	2015—2019
3	self-assembly	15.991 0	1993—1998
4	dna nanotechnology	9.928 5	2015—2019
5	anion	9.509 8	2009—2014
6	thermodynamics	8.403 3	2007—2009
7	allostery	8.109 8	2013—2019
8	electron transfer	7.632 9	2004—2008
9	ribosome	6.989 3	2014—2019
10	click chemistry	6.944 0	2011—2017

关热点。这也说明,分子机器的发展与计算科学^[16, 17]、热力动力学^[18-20]、超分子化学^[21]、点击化学^[22, 23]以及纳米技术等学科的交叉与融合越来越深入。

3 结语

利用 CiteSpace 软件对在 WoS 核心合集数据库检索到的 10 328 篇文献进行了分析,从引用关系、国家、机构和作者的合作关系,作者关键词以及关键词的突现词等角度进行了分析,得到了分子机器的全球发展态势情况。

从发文数量随年代的变化情况来看,1990 年之前分子机器相关文章很少,在 1990 年之后才开始出现线性增长,没有出现阶段性的爆发,表明分子机器目前尚处在基础研究阶段,该领域在未来还有很大的发展空间。

从发文数量在国家、机构的分布及其合作图谱来看,美国目前是分子机器研究实力最强的国家。法国的研究实力仅次于美国,不过自索维奇因年龄原因逐渐退出科研一线之后,法国的地位逐渐被英国赶超,英国曼彻斯特大学的李教授成为了新一代分子机器领域的领军人物。中国分子机器领域研究水平正在进入世界一线水平,但在国际间的交流合作较少,特别是与排名领先的美国西北大学、英国曼彻斯特大学等的合作不多,影响力有待提升。

从研究人员的合作情况来看,美国西北大学的斯图达特教授处在整个合作图谱的中心,无论是从发文量还是影响力,他都是目前分子机器学界的绝对权威。此外,英国曼彻斯特大学的李教授、荷兰格罗宁根大学的费林加教授、意大利博洛尼亚大学的克雷迪教授和巴勒扎尼教授是目前分子机器领域国际上较为权威的专家。中国在 2000 年之后涌现了诸如田禾院士为代表的学者,天津大学还聘请了斯图达特作为学校的客座教授。除了田禾外,还有诸如黄飞鹤、刘育、曲大辉等人近几年带领课题组不断攻克难题,与国际上的合作交流较多,在国际上也获得了一定的声誉

从对作者的关键词及突现词等的统计分析,可以看出,在 1989 之后,分子机器发展较为活跃,以轮烷、索烃和分子马达为基础的衍生物以及不同驱动方式(光、化学、电)对分子机器运动产生的影响是热点研究方向。伴随着机器学习和点击化学的兴起,复杂分子的合成又有了全新的解决方案。从关键词相关学科来看,与分子机器领域联系最为紧密是超分子化学和纳米科学,而机器学习、点击化学、热力动力学等为分子机器提供了新的合成及运动控制思路。目前为止,分子机器的研究热点主要集中在简单分子结构制备以及在外界刺激下的运动方式等方面,未来分子机器的研究将转向新结构、

功能材料的探索和突破, 以及在复杂运动方面打开新的局面。

总的来说, 对于分子机器领域, 未来的研究方向仍是合成分子结构的新突破, 以及在生物学、物理学方面应用的破局^[24], 例如 Leigh DA 团队曾在 2013 年做出了一个能够像人类细胞的核糖一样抓取氨基酸并按照序列进行连接的小型分子机器人^[25]。此外, 如果能够在研究生命体中蛋白分子的做功方式和机理方面有所突破, 对于生物领域的影响也将是巨大的。■

参考文献:

- [1] Browne W R, Feringa B L. Making molecular machines work[J]. *Nature Nanotechnology*, 2006, 1(1): 25-35.
- [2] 强璐莉, 蒋伟, 黄飞鹤, 等. 分子机器的设计与合成——2016 年度诺贝尔化学奖成果简介 [J]. *科技导报*, 2016, 34 (24) : 28-33.
- [3] Kay E R, Leigh D A. Rise of the Molecular Machines[J]. *Angewandte Chemie International Edition*, 2015, 54(35): 10 080-10 088.
- [4] Erbas-Cakmak S, Leigh D A, McTernan C T, et al. Artificial molecular machines[J]. *Chemical Reviews*, 2015, 115(18): 10 081-10 206.
- [5] 石小岑, 李曼丽. 国际 MOOC 研究热点与趋势——基于 2013—2015 年文献的 Citespace 可视化分析 [J]. *开放教育研究*, 2016 (1) : 90-99.
- [6] 王娟, 陈世超, 王林丽, 等. 基于 CiteSpace 的教育大数据研究热点与趋势分析 [J]. *现代教育技术*, 2016, 26 (2) : 5-13.
- [7] 房慧莹, 李鹏, 赵思奇, 等. 基于 CiteSpace 的职场所暴力领域研究热点分析 [J]. *中国医院管理*, 2019, 39 (1) : 43-46.
- [8] 冯雪, 吴国春, 曹玉昆. 基于 Citespace 的中国生物质能源研究知识图谱分析 [J]. *干旱区资源与环境*, 2018, 32 (1) : 35-42.
- [9] Dietrich-Buchecker, Sauvage J P, Kintzinger J P. Une nouvelle famille de molecules: les metallo-catenanes[J]. *Tetrahedron Letters*, 1983, 24(46): 5 095-5 098.
- [10] P L Anelli, N Spencer, J F Stoddart. A molecular shuttle[J]. *Journal of the American Chemical Society*, 1991, 113(13): 5 131-5 133.
- [11] Koumura N, Zijlstra R W J, van Delden R A, et al. Light-driven monodirectional molecular rotor[J]. *Nature*, 1999, 401(6 749): 152-155.
- [12] Freeman L C. Centrality in social networks conceptual clarification[J]. *Social Networks*, 1978, 1(3): 215-239.
- [13] 潘玮, 牟冬梅, 李茵, 等. 关键词共现方法识别领域研究热点过程中的数据清洗方法 [J]. *图书情报工作*, 2017, 61 (7) : 111-117.
- [14] Popescul A, Flake GW, Lawrence S, et al. Clustering and identifying temporal trends in document databases[C]. *Proceedings IEEE Advances in Digital Libraries 2000*, Washington, DC: IEEE, 2000:173-182.
- [15] 陈超美, 陈悦, 侯剑华, 等. CiteSpace II: 科学文献中新趋势与新动态的识别与可视化 [J]. *情报学报*, 2009, 28 (3) : 401-421.
- [16] Butler K T, Davies D W, Cartwright H, et al. Machine learning for molecular and materials science[J]. *Nature*, 2018, 559(7 715): 547-555.
- [17] Wu Z, Ramsundar B, Feinberg E N, et al. MoleculeNet: a benchmark for molecular machine learning[J]. *Chemical Science*, 2018, 9(2): 513-530.
- [18] Barato A C, Seifert U. Thermodynamic cost of external control[J]. *New Journal of Physics*, 2017, 19(7): 73 021.
- [19] Ragazzon G, Credi A, Colasson A. Thermodynamic insights on a bistable acid-base switchable molecular shuttle with strongly shifted co-conformational equilibria[J]. *Chemistry – A European Journal*, 2017, 23(9): 2 149-2 156.
- [20] Pezzato C, Cheng C, Stoddart J F, et al. Mastering the non-equilibrium assembly and operation of molecular machines[J]. *Chemical Society Reviews*, 2017, 46(18): 5 491-5 507.
- [21] Faulkner A, Van Leeuwen T, Feringa B L, et al. Allosteric [J]. *Journal of the American Chemical Society*, 2016, 138(41): 13 597-13 603.
- [22] Goujon A, Moulin E, Fuks G, et al. [c2]Daisy chain rotaxanes as molecular muscles[J]. *Chinese Chemical Society*, 2019, 1(1): 83-96.
- [23] Delavaux-Nicot B, Ben Aziza H, Nierengarten I, et al. Delavaux-Nicot, B., et al. A rotaxane scaffold for the construction of multiporphyrinic light-harvesting

- devices[J]. Chemistry – A European Journal, 2018, 24(1): 133-140.
- [24] Cheng C, Stoddart JF. Wholly synthetic molecular machines[J]. Chem Phys Chem, 2016, 17(12): 1 780-1 793.
- [25] Bartosz L, Guillaume D B, Ward J W, et al. Sequence-specific peptide synthesis by an artificial small-molecule machine[J]. Science, 2013, 339(6 116): 189-193.

Global Molecular Machine Development Situation in Terms of Knowledge Mapping

ZHANG Ya-ze¹, DUAN Li-ping², LI Zhi-rong¹

(1. Institute of Scientific and Technical Information of China, Beijing 100038,

2. Talent Center of Ministry of Science and Technology, Beijing 100045)

Abstract: This paper uses bibliometrics' method to analyze the development and the research tendency of molecular machines, and to find countries, institutions, researchers and the change of the research hotspots. This paper analyses articles between 1959 and 25.7.2019 which from Web of Science by CiteSpace, a mapping software of scientific knowledge, to explore the cooperation among countries, institutions and scientific researchers in the field of molecular machine. Hot topics and development trends through keyword clustering analysis are discussed too. The United States, Britain, France, Italy, Netherlands and Japan are the countries with strong influence in the field of molecular machine. Cooperation between institutions is mainly between the United States and Europe, while cooperation between China and Japan, China and the United States, China and Europe are less. The European and American researchers represented by Stoddart have great influence in the whole world. Research topics in the field of molecular machine are gradually turning from designing, synthesizing and controlling the movement of complex structural molecules to exploring new functionally materials and devices.

Key words: molecular machine; CiteSpace; institutional cooperation network; author cooperation network