



# 修改化學物骨幹 藥物生產更便利

## 科學講堂

化學家經常需要修改有機化學物的結構，特別是在醫藥研究之中，化學家需要探索不同結構化學物的醫藥效能；或是在研究如何靠着修改化學物的結構，以找出有效率生產該種化學物的方法。有機化學物結構複雜及多變，一直以來我們只能修改結構的較邊緣部分；有幸的是，近年科學家們已在開發新方法直接修改化學物的骨幹部分。今天我們討論一下這些新技術。

先來簡單介紹有機化學物的特徵。有機化學物主要由碳和氫兩種元素組成，再配上氧、氮、硫等其他元素以構成各種化學結構。每顆碳原子可與最多4枚其他原子連結，因此當許多碳原子聚在一起，就可以連結成一條長長的碳鏈條，成為有機化學物的主要骨幹；再加上其他元素不同的組合和連結方式，就形成了各種各樣的有機化學物。

化學家經常運用魚骨一般的結構圖來代表有機化學物的構造：當中Z形線條上的每個「轉角」就是一個碳原子，每個線段則代表原子和原子之間的化學鍵；各種字母表示了特別元素的種類（例如氧或氮），但為了避免結構圖看起來過於複雜，氫原子一般來說都不被標註出來。

有機化學物的結構可以相當複雜，涉及成千上百的原子，因此要生產它們絕不容易。一般來說，化學家們要先仔細端詳化學物的結構，再想想有哪些已知的、可靠的化學反應，能夠把較小、較簡單的化學物組合成我們想要的結構。化學家不斷重複這些步驟，慢慢把需要的化學結構分拆成容易得到的化學原料。

### 以「鈀」作催化劑

因此，能有更多可依賴的化學反應運用，

就可以更有效地製造出想要的有機化學物。一直以來，這都是化學家熱烈研究的課題，而2010年的諾貝爾化學獎，更是頒予了這領域的學者：在上世紀六七十年代，化學家們開發了新的方法，利用鈀（palladium）這種金屬作為催化劑，修改碳原子之間的化學鍵，大大幫助了藥物分子的製造。

時至今日，化學家們已發明了好些直接修改有機化學物主要骨幹的技術。例如吡啶（pyridine）這種有機化合物經常被用作藥物成分，其化學結構的特徵，就是一個由5個碳原子和1顆氮原子組成的六角環構造。化學結構上，吡咯（pyrrole）是吡啶的「親戚」，也有一個由碳和氮構成的環，不過卻比吡啶的環少了一角：是由4枚碳原子加1顆氮原子組成的五角環。

現代的技術，容許科研人員在五角環結構中再多加1枚碳原子，因而把吡咯轉變成吡啶。含有六角環構造的吡啶製造起來要比吡咯困難，因此這個在化學結構中添加碳原子的技術便利了不少藥物的生產。

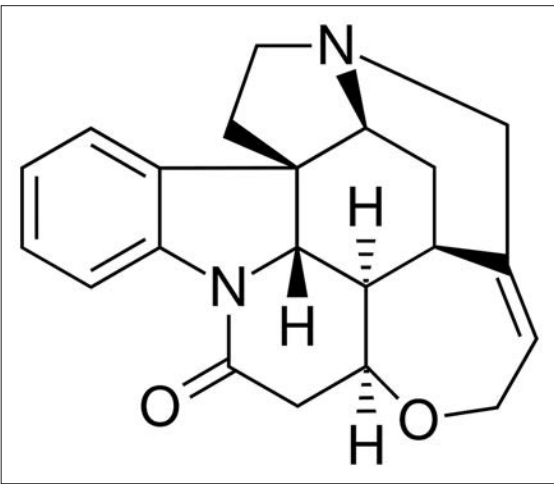
現在的技術能做到的自然不止於此，除了添加碳原子外，還可以添加氮原子、氧原子，還可以刪減原子，甚或將原有的碳原子換成其他元素。不過，不少的這些技術，現階段只能用於某些化合物之上，還未能完全普及。



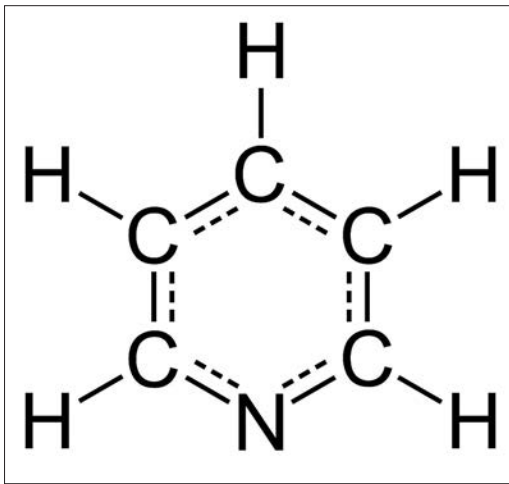
▲鈀這種金屬可以作為催化劑，修改碳原子之間的化學鍵。 網上圖片



▶在醫藥研究之中，化學家需要探索不同結構化學物的醫藥效能，以找出有效率生產該種化學物方法。圖為藥廠生產成藥。 資料圖片



◆這些結構圖代表了有機化學物的構造。 網上圖片



◆吡啶化學結構的特徵，就是一個由5個碳原子和1顆氮原子組成的六角環構造。 網上圖片

## 小結

今次介紹的這種技術，有人將它比擬為化學版的基因改造技術；不少科學家都清楚，要走的路還有很遠。如前所述，世界中的化學作用、化合物太多，要找出能廣泛應用的技術，還需更多的努力。

◆杜子航 教育工作者

早年學習理工科目，一直致力推動科學教育與科普工作，近年開始關注電腦發展對社會的影響。

## 新概念推論迴文距離

### 奧數揭秘

這次嘗試引入一些新概念，讀者可以看看做起來怎樣。

問題：對於十進制表示的四位數 $ABCD$ ，其中 $A \neq 0$ ，定義「迴文距離」 $L$ 為 $L = |A - D| + |B - C|$ 。問有多少個四位正整數，迴文距離為1？

答案：1只能分拆為1與0相加。

若 $A$ 與 $D$ 相差1，比如 $A$ 為1，則 $D$ 可為0或2，有兩個選擇，再取 $A$ 為2, 3, ... 直至 $A$ 為8， $D$ 仍有兩個選擇，但 $A$ 為9時， $D$ 則只能選8。這時 $B$ 與 $C$ 相同，可取0至9，有10個選擇。故此這情況下，有 $(8 \times 2 + 1) \times 10 = 170$ 個選擇。

若 $A$ 與 $D$ 相同，則 $A$ 與 $D$ 可同時為1至9，有9個選擇。而 $B$ 與 $C$ 相差1，則 $B$ 較小時可以是0至8，有9個選擇，同理， $C$ 較小時亦有9個選擇。故此這情況下，有 $9 \times 2 \times 9 = 162$ 個選擇。

兩情況綜合而言，共有 $170 + 162 = 332$ 個這樣的四位正整數。

題目做起來，順着迴文距離的定義，了解到四位數上，千位與個位的關係，之後在列舉之中，看清楚規律，然後用上乘法，再由分類討論之中，找到兩個情況各自有多少個選擇，就得到了答案。

這裏用到的迴文距離的概念，大概只是題目裏創造出來的，其他中小學奧數書裏也沒見過。有時奧數題裏，想在一些普遍情況之中，加入限制條件，然後做些估算，或者數算之類，就會定義一些新概念來，這是挺常見的做法。

順着題目新定義的概念，再計算一番，也可以練習一下如何靈活運用新概念去做推論。這個跟課內的題目多數是用上已有知識去解題，要求又高一點。有時新概念定義出來有一些條件，若學生理解力未夠，連開始解題也有困難。

談起今次定義的迴文距離，也有相關概念——迴文數，就是那些12321之類的，由左到右讀，或是由右到左讀都是一樣的那些數。這個迴文距離，看來是跟迴文數有關係。若迴文距離為0的

四位數，那就是 $A$ 和 $D$ 相同， $B$ 和 $C$ 相同，就是那些形式如 $ABBA$ 的迴文數，例如是1221或者2332之類。

那麼這個迴文距離，可以看成是四位數有多像一個迴文數的度量方式。若果距離剛好是0，就是一個迴文數，要是距離大一些，跟迴文數就差得遠些。只是這樣理解，其實也只是參考而已，比如仔細看4332和4563，兩者的迴文距離都是2，但前者的百位和十位都是一樣的，倒過來讀有兩個數字是一樣，看來比後者更似迴文數，只是這個在迴文距離的角度看來，是一般的相似，所以數字表面看來，似不似一個迴文數，跟它的迴文距離是否相同，是不同的概念。

若要表達剛才提到，表面看來似不似的意思，是要定義另一些度量相似度的方式。

今次的題目提到了一種量化相似度的想法，就是除了平常看一個數是否迴文數之餘，又引入了有多相似的量化方式。這種量化差異，然後減少差異的想法，在數學裏也不時會見到。



▲尋找失蹤兒童已成為國際性的議題。圖為內地一對母子失散32年後終於團圓。 資料圖片

▲人臉識別技術為尋找失蹤人口的調查提供了新方向。圖為一智能科技展上，觀眾在體驗人臉識別技術。 資料圖片

## AI助尋失蹤童 照亮家庭團圓路

### 智為未來

兒童失蹤使得家庭變得離散，失去至親的家長只好在一次又一次的尋覓和失望中期盼孩子的歸來，而尋找失蹤兒童已成為國際性的議題。

隨着人們對人工智能（AI）技術的了解不斷加深，愈來愈多的新技術應用在公益領域，包括成為國際性議題的尋找失蹤兒童上。這些案件時間跨度大，人的臉部特徵（臉型和皺紋等）差異顯著，同時容貌亦會受拍照時的表情、姿勢、方向或光線影響，以至原始數據的質量（照片清晰度及完整度）等對識別效果造成影響，加深了人臉數據比對和匹配的難度。

對此，跨年齡人臉識別或年齡不變人臉識別技術為尋找失蹤人口的調查提供了新方向。為減少年齡差異造成

的影響，跨年齡人臉識別技術利用已有的失蹤人口照片作為數據訓練集，使用臉部識別演算法尋找相片的臉部區域，對人臉的重點做出標記及校正，並對這些重點提取局部特徵，透過神經網絡的訓練對相中人五官特徵的衰老做出可靠判斷，從而提高人臉數據的配對效能和準確性。

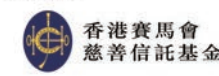
即便如此，該項技術在實際應用與普及上仍面臨着多項挑戰，一方面需要大量失蹤兒童的人臉數據供數據訓練使用，另一方面需要更好的深度神經網絡演算法去處理因年齡增長令臉部數據變化所帶來的權重問題。

儘管尋親之路的終點仍以基因分析確認血緣關係，但跨年齡人臉識別技術作為警方辦案的技術手段之一，大大提升了跨年齡尋親的成功率。隨着該技術的不斷迭代，相信科技的力量可以照亮更多走失孩子的回家團圓之路。

聯合主辦:



捐助機構:



◆中大賽馬會「智」為未來計劃 <https://cuhkjc-aifortfuture.hk/>

由香港賽馬會慈善信託基金捐助，香港中文大學工程學院及教育學院聯合主辦，旨在透過建構可持續的AI教育生態系統將AI帶入主流教育。通過獨有且內容全面的AI課程、創新AI學習套件、建立教師網絡並提供AI教學增值，計劃將為香港的科技教育寫下新一頁。

◆張志基

簡介：奧校於1995年成立，為香港首間提供奧數培訓之註冊慈善機構(編號：91/4924)，每年均舉辦「香港小學數學奧林匹克比賽」，旨在發掘在數學方面有潛質的學生。學員有機會選拔成為香港代表隊，獲免費培訓並參加海內外重要大賽。詳情可瀏覽：[www.hkmos.org](http://www.hkmos.org)。



香港數學奧林匹克學校  
Hong Kong Mathematical Olympiad School