

本报讯 中国科大李晓光团队一直致力于铁性隧道结信息存储原型器件研究，在磁电耦合、超快、多阻态、低功耗、非易失信息存储等方面取得了重要进展。在前期研究基础上，团队基于铁电隧道结量子隧穿效应，实现了具有亚纳秒信息写入速度的超快原型存储器，并可用于构建存算一体人工神经网络，该成果近日在线发表于《自然·通讯》杂志上。

在大数据时代，海量数据的低能耗、快速存储处理是突破和完善未来人工智能、物联网等技术发展的关键之一。为此，迫切需求一种既像SRAM一样能匹配CPU处理数据的速度(<1ns)，又像闪存一样具备高密度、非易失的信息存储。更进一步地，如果该存储器还具有优秀的忆阻

中国科大解析人类胆汁盐外排蛋白ABCB11的电镜结构

本报讯 3月20日，我校微尺度物质科学国家研究中心和生命科学与医学部陈宇星教授、周丛照教授、孙林峰教授课题组合作，利用冷冻电镜技术解析了人类胆汁盐外排蛋白ABCB11的近原子分辨率三维结构，为深入理解该类膜蛋白的转运机制以及其突变引发的致病机理提供了基础。其成果在线发表在《Cell Research》上。

胆汁盐为人体胆汁的重要组成部分，由胆固醇作为前体在肝细胞中合成，经膜蛋白将其转运至胆小管中参与胆汁的形成。胆汁主要在小肠中帮助脂肪类物质的消化和吸收，胆汁盐的外排阻塞会导致一系列的胆汁淤积相关病症。比如，进行性家族性肝内胆汁淤积(PFIC)，良性复发性肝内胆汁淤积(BRIC)，妊娠期肝内胆汁淤积(ICP)，药物

中国科大解析致病菌细胞壁成分胞壁酸翻转酶的结构和功能机制

本报讯 3月17日，中国科大陈宇星教授、周丛照教授和孙林峰教授课题组合作阐明了金黄色葡萄球菌胞壁酸翻转酶 TarGH 转运 WTA 的机制和 TarGH 特异性抑制剂 Targocil 的抑制机制。研究成果在线发表在微生物领域专业杂志mBio上。

耐甲氧西林金黄色葡萄球菌（MRSA）是主要的临床致病菌之一，其引发的感染难以治愈甚至可能致死。由于近年来抗生素滥用，出现了对所有的β-内酰胺类药物都具有抗性的MRSA菌株。研究表明S.

本报讯 3月18日，中国科大管理学院在时空面板数据模型的研究中取得重要进展，突破经典的广义极大似然估计和广义矩估计理论框架，提出了基于空间权重矩阵特征分解的估计和模型选择方法。相关论文发表在《美国科学院院报》上。

现在很多大数据(环境,疫情,犯罪,物流,区域经济等)呈现出时间和空间的复杂相依关系,由于时空的交互影响提高了对应的时空模型的估计难度。有别于已有的复杂估计方法,文章改变传统的估计思路,充分利用时空数据的空间结构特征,采用空间权重矩阵的特征分解,极大的简化了估计方法,提高了估计精度和运算速度,并提出了

中国科大团队报道驱动肿瘤发生的表观遗传调控新机制

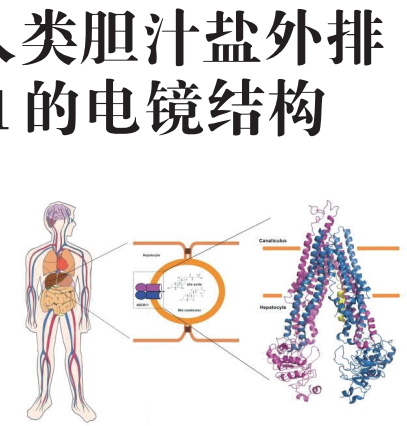
本报讯 癌基因cMyc是一个重要的转录因子,调控约15%的人类基因表达,在肿瘤细胞的增殖、凋亡以及代谢重编程等方面发挥重要作用。然而,目前尚不清楚,cMyc是否通过转录以外的机制,来广泛调控基因的表达以及肿瘤的发生发展。

中国科大张华凤课题组、高平课题组联合军事医学科学院段小涛课题组的研究发

在铁电量子隧道结亚纳秒超快忆阻器研究中 中国科大取得重要进展

特性,从而实现人工突触器件的功能,则可用于构建存算一体的计算系统,并有望突破冯诺依曼架构,为人工智能提供硬件支持。

研究人员制备了高质量Ag/BaTiO3/Nb:SrTiO3铁电隧道结,其中铁电势垒层厚为6个单胞(约2.4nm)。结果表明,该铁电隧道结非易失存储器具有超快、超低功耗、高密度、长寿命、耐高温等优异特性,是目前综合性能最好的非易失存储器之一。特别是,该存储器还由于铁电隧穿



诱导的肝损伤(DILI)。其中PFIC最为严重,该病多发于儿童,伴随肝肿大,肝硬化,以至肝功能衰竭最后导致成年前死亡,大部分该病患者需要进行肝移植得以存活。

研究表明,胆小管上的ABC膜转运蛋白ABCB11是胆汁盐外排到胆小管中最重要的

中国科大解析致病菌细胞壁成分胞壁酸翻转酶的结构和功能机制

aureus细胞壁主要成分WTA是引起耐药性的关键因素之一。在革兰氏阳性菌中,WTA是一类共价连接在肽聚糖上的阴离子多聚物。WTA在细菌分裂、生物膜形成、宿主定殖以及细菌感染等过程中起着重要作用。因此,WTA合成途径中的关键酶是新型抗菌药物的重要靶点。

基于结构,作者计算出了底物转运通道,通过对组成通道的氨基酸残基性质分析并结合生理实验,阐明了底物特异性识别机制。作者进一步通过生化实验和计算

在空间面板数据模型的估计和选择上

中国科大获得新进展

相应的模型选择方法。理论部分模型的示意图如下图所示:

文章于2008年1月到2013年12月(72个月)138个美国匹兹堡行政地区的犯罪数据为例做了示范。在这个例子中,犯罪数据重罪(Part I)和轻罪(Par II)在138个行政区的平均犯罪个数分布如下图:

文章还选取了15个区域社会经济变量作为解释变量,包括区域总人口、收入、失业率、贫苦率、非裔比例、教育水平等。模型

中国科大团队报道驱动肿瘤发生的表观遗传调控新机制

现,cMyc能够促使琥珀酸脱氢复合酶中的重要亚基SDHA乙酰化以及SDH复合酶失活,导致底物琥珀酸的积累,进而上调组蛋白H3K4的三甲基化水平以及基因的表达。这一发现揭示了cMyc驱动的肿瘤发生过程中SDHA乙酰化修饰发挥的重要病理学作用。SDHA被认为是抑癌蛋白,它的失活突变体与多种肿瘤,例如副神经结瘤、乳腺癌、肾癌

层中畴的可连续翻转特性能实现电阻的连续调节,而且这一忆阻特性可用于构建超快的人工突触器件,从而用于开发超快人工神经网络存算一体系统。人工神经网络的模拟结果表明,利用该铁电隧道结忆阻器构建的人工神经网络可用于识别MNIST手写数字,准确率可达90%以上。

李晓光教授和殷月伟教授为论文通讯作者。博士生马超、罗振为论文共同第一作者。

(物理学院 合肥微尺度物质科学国家研究中心 科研部)

蛋白。该蛋白编码基因突变会导致上述提到的各种胆汁淤积病症。自发现该基因的近20多年来,对ABCB11的研究报道持续不断,但人们对该蛋白转运胆汁盐的机理仍然不清楚。作者借助冷冻电镜技术解析了该蛋白开放状态下的3.5 Å 高分辨率的三维结构,发现临床样本的突变会破坏蛋白质分子内部的相互作用,或使蛋白错误折叠,导致蛋白质转运功能降低或者完全丧失,最终引发相关疾病。作者还对一系列胆汁盐以及两种抑制剂(利福平、格列本脲)的刺激ATP水解活性的进行了验证,发现利福平和格列本脲以竞争方式抑制该蛋白的活性,这也是服用这类药物导致肝损伤的主要原因之一。该项研究不仅对于该类蛋白的分子结构研究具有重要的参考意义,也为相关疾病的致病机理分析以及药物开发设计提供了理论指导。

陈宇星、周丛照和孙林峰三位教授为论文共同通讯作者。在读博士生王亮和特任副研究员侯文韬为共同第一作者。

(微尺度物质科学国家研究中心 生命科学与医学部 科研部)

中国科大解析致病菌细胞壁成分胞壁酸翻转酶的结构和功能机制

机模拟确定了Targocil结合TarGH的精确位点,并阐明了其抑制TarGH转运胞壁酸的分子机制。研究结果将为设计和优化针对MRSA的新型抗生素提供结构基础和理论指导。

陈宇星教授、周丛照教授和孙林峰教授为论文共同通讯作者。博士毕业生陈黎和特任副研究员侯文韬为共同第一作者。

(中国科大微尺度物质科学国家研究中心 生命科学与医学部 科研部)

在空间面板数据模型的估计和选择上

中国科大获得新进展

的拟合程度指标R平方(接近1时,拟合程度高)达到0.98,表明选择的模型非常好的拟合了数据。数据分析结果可以用于以轻罪发生率预测重罪发生率,解释犯罪学的“破窗理论”,分析重罪发生率和总人口、收入和贫困等的量化关系。

论文第一作者为我校金百锁副教授,合作作者为加拿大约克大学Yuehua Wu教授,纽约州立大学C.R. Rao教授及我校博士生侯丽。

(管理学院 科研部)

等,有一定程度的联系。我们的这项研究表明,至少在弥散性大B细胞淋巴瘤中,SDHA通过乙酰化失活而极大地促进了cMyc异常表达的肿瘤的进展。因此,靶向SDHA的乙酰化将可能为此类肿瘤的临床治疗提供潜在的策略和手段。

该论文,3月16日在线发表于《自然·代谢》Nature Metabolism 期刊。李世庭博士和黄的博士为论文共同第一作者、张华凤教授、高平教授和段小涛教授为共同通讯作者。该工作得到了安徽医科大学蔡永萍课题组、军事医学科学院李爱玲课题组、周荣斌课题组和暨医课课题组的大力帮助。

(生命科学与医学部 科研部)

本报讯 3月25日,中国科大阳丽华副教授课题组首度发现,当把表面带负电荷的纳米球与细菌混合在一起时,纳米球会选择性地吸附到球菌表面、却不吸附到杆菌表面,而且这种基于细菌形貌选择的识别机制受熵增驱动、且普遍适用于组成和表面化学不同的多种纳米球。相关研究成果发表在期刊《物理化学快报》上。

基于这种物理识别机制、以及ROS极度有限的有效活性半径,研究者猜想如果纳米球具有光动力效应,就能在光照下高效清除球菌、却不干扰杆菌。这一猜想得到了采用不同光动力纳米球和多种细菌所做抗菌实验的证实。

细菌抗药性的出现与扩散严重威胁全球公共卫生安全。应对这一挑战亟需开发新型抗菌物和抗菌疗法。窄谱抗菌物/疗法可特异性地识别并清除目标病菌,从而减少对宿主共生菌群的脱靶干扰、并降低对细菌的抗药性进化压力。但是,由于区分病菌与益生菌的固有难度、以及制药公司对窄谱抗菌缺乏投资热情(出于成本—收益平衡考虑,他们自然地希望能开发一个可以杀灭所有细菌的抗菌物),窄谱抗菌物/疗法的发展一直处于极度迟滞状态。针对这一问题,中国科学技术大学阳丽华副教授课题组提出赋予现有的广谱抗菌物/疗法以辨别目标细菌的能力,从而将其转变成一种窄谱抗菌物/疗法。

这项工作不仅首次揭示了细菌形貌在相似电荷纳米球/细菌相互作用中的关键作用,还有望为过敏性皮炎等由于球菌在杆菌主导健康共生菌群的微环境中过度繁殖所引起的疾病提供一种新疗法。

阳丽华副教授为论文通讯作者、硕士研究生杨彬倩为论文第一作者。

(化学与材料科学学院 科研部)

在揭示水热合成的流体行为研究中 我校获重要成果

本报讯 近日,我校俞书宏院士团队与丁航教授课题组和吴恒安教授课题组合作,在间歇式水热合成的流体行为研究领域取得重要进展。研究人员首次利用氧化石墨烯(GO)的液晶行为和凝胶化能力,借助酚醛树脂(PF)的固化定型作用,获得具有环形极向结构的凝胶,根据凝胶的微观结构来揭示水热合成中的流体行为。该成果发表于Cell Press材料学旗舰期刊Matter上。

研究人员发现,在水热条件下,GO纳米片在流体剪切力的作用下可以沿着流场的方向进行排列。此外,GO纳米片能够通过与酚醛树脂的原位交联固定形成具有环形结构的轴对称凝胶。通过对凝胶形貌和结构的直接观察分析,进而推测出水热合成中的流体行为。据此,研究人员开展了加热温度、溶液粘度和反应釜尺寸/形貌等多个因素进行了研究。

研究结果表明,无论反应釜聚四氟乙烯内衬的大小和几何形状如何,水热合成中的对流总是存在。对于特定的反应,温差和反应釜内衬大小是影响对流的最主要因素。反应釜体积越大,其中反应液体的传热就更不均匀,温差越大,对流就更强烈。增强对流的作用与机械扰动相同,产物均匀性变差,尤其是会对运用水热法规模化合成纳米线、纳米片或大块凝胶材料等产生不可忽视的影响,更强的流场会产生更多的杂质或导致三维块材内部结构不均匀等现象。

近百年来,水热合成法得到了广泛的应用和发展,已成为合成单晶、金属氧化物、陶瓷、沸石和纳米复合材料等多种材料的常用方法。该研究进一步增进了对水热合成法制备不同尺度和形状的微纳材料过程及机理的理解,对今后水热法合成纳米材料技术的发展具有重要指导意义。

(合肥微尺度物质科学国家研究中心 化学与材料科学学院 科研部)

我校在窄谱抗菌领域取得突破