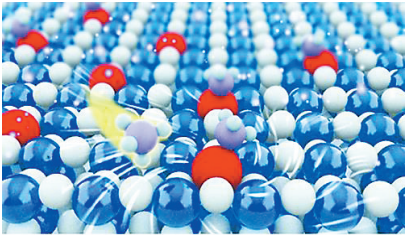


## 中国科大实现高选择性制造乙烷和氢气

**本报讯** 日前,中国科大熊宇杰教授、龙冉教授研究团队与杨金龙院士团队付岑峰副研究员、南京大学邹志刚院士团队姚颖方教授合作,创新了光催化甲烷无氧偶联的催化剂设计,实现了高选择性制备乙烷和氢气,效率达到中温热催化甲烷无氧偶联水平。研究成果发表于《自然·通讯》。

甲烷是天然气、可燃冰、沼气等的主要成分,广泛分布于自然界。如何将储量巨大的甲烷资源转化为具有更高经济附加值的燃料或化工产品,具有重要的科学意义和应用前景。

光催化甲烷无氧偶联方法可以在温和条件下将甲烷直接转化,同时获取多碳烃类和氢气,是一条极具吸引力的途径。熊宇杰介绍:“一方面,光催化甲烷无氧偶联方法无须通过成熟的甲烷重整和费托合成的两步间接转化法,避免了流程复杂、能耗大、生产成



单原子配位负载的甲烷无氧偶联光催化剂

本高的缺点;另一方面,该方法无须使用苛刻反应条件,避免了甲烷过度氧化生成大量二氧化碳等副产物。”目前常用于甲烷无氧偶联的光催化剂,主要是金属氧化物半导体材料。熊宇杰表示:“该光催化剂中的晶格氧原子,极易将甲烷过度氧化,所以依然会产生部分一氧化碳、二氧化碳等副产物,并

导致催化剂完全失活。”

为解决该问题,熊宇杰和龙冉团队提出通过单原子配位负载的方法来调控光催化剂的价带电子结构,形成了极为稳定的单原子和晶格氧的配位结构,避免晶格氧原子直接参与光催化甲烷无氧偶联反应,从而在提高光催化甲烷无氧偶联性能的同时,降低甲烷的过度氧化程度。

基于该策略,研究团队实现了每克催化剂每天产生0.7克乙烷,其选择性达到94.3%,同时还能产生同比例的氢气。研究人员进一步通过元素掺杂的方法,提高了催化剂中晶格氧的稳定性,进而延长催化性能的稳定性,为发展高效光催化甲烷无氧偶联催化剂提供 作使得以光催化路径将甲烷转化为乙烷成为可能,展示了单原子催化剂的魅力。

(丁一鸣 王敏)

## 中国科大学者系统评估多种空间转录组分析算法

**本报讯** 5月16日,我校生命科学与医学部瞿昆教授课题组通过设计一整套分析流程,系统性评估了16种空间转录组和单细胞转录组数据整合算法在预测基因或细胞类型空间分布方面的性能。成果在线发表于《自然·方法学》。

“细胞在组织器官内所处的空间位置,与其发挥生理功能或疾病产生过程密切相关。”论文共同第一作者、中国科大学生命科学与医学部特任副研究员郭阔介绍。

近年来,研究者开发了多种空间转录组技术,在保留细胞精确空间定位的同时,检测细胞内全转录组的表达情况,以此来研究在发育或疾病发生发展过程中起

关键性作用的细胞亚群及其分子机制。

但目前空间转录组技术存在两个不足,一是基于测序的空间转录组技术无法实现真正意义上的单细胞分辨率;二是基于成像空间转录组的技术能检测到的基因通量有限。为了突破技术的局限性,生物信息学家设计了多种算法整合空间转录组与单细胞转录组数据,预测细胞类型的空间分布和/或单个细胞的完整转录组信息。

这些算法大大加深了人们对空间转录组学数据及相关生物学和病理过程的理解。然而,这些整合算法的工作原理和适用范围存在显著差异,研究者很难选择出最佳算法。

瞿昆课题组长期致力于开发生物大数据分析算法和软件。在此项研究中,课题组收集了45对同一组织来源的空间转录组与单细胞转录组数据集、32个模拟数据集,并设计了多种指标,从准确性、鲁棒性、计算资源耗时等多维度系统性评估了16种整合算法的性能。

结果显示,Cell2location、SpatialDWLS和RCTD算法能更加准确地预测细胞类型的空间分布; Tangram、gimVI和SpaGE算法则是预测基因表达空间分布的最佳算法。Tangram、Seurat和LIGER计算效率相对较高,适合处理大规模数据集。

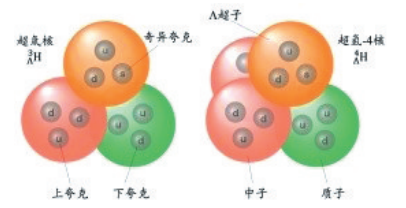
该研究总结了每种算法的属性、性能和适用性,以及高效算法的优势,为研究人员进一步提升算法性能提供了参考。同时,研究人员还在gitHub网站上提供了整合空间转录组和单细胞转录组数据的分析流程,有助研究人员在处理数据时选择最佳分析工具。

(生命科学和医学部)

## 中国科大高能核物理团队在超核研究中获新进展

**本报讯** 近日,中国科大高能核物理课题组与美国劳伦斯伯克利国家实验室(LBNL)、布鲁克海文国家实验室等单位合作,在RHIC-STAR 质心能量3GeV和7.2 GeV的重离子打靶实验中实现了超氦核(H3L)与超氢-4核(H4L)寿命目前最精确的测量,并首次测量了3GeV能量下这两种超核的产额。

组成原子核的基本单元是核子,即中子和质子。然而,人们发现一些原子核内部还有超子,超子不同于普通核子,是含有奇异数的重子。超子与核子形成的束缚态即超核。核子与超子之间是如何通过相互作用形成束缚态的,这一直是核物理领域的前沿基本问题。在天文学上,中子星致密核心内部是否也有超子存在,以及在极端致密的环境,超子与核子相互作用、



超氦核与超氢-4核的结构组成示意图

与中子星状态方程之间的联系,都是核物理与天体物理交叉领域的热点问题。超核被视作一个研究超子-核子相互作用的天然“实验室”,是我们研究的主要对象。理论上认为超子与核

子组成的超核是弱束缚系统,轻超核的寿命应接近自由Lambda重子的寿命。

相对论重离子加速器RHIC上的STAR实验,在低能区产生的核物质系统有较高的重子密度,有利于产生超核。STAR实验在质心能量3 GeV和7.2 GeV下进行了超核寿命的测量,得到了目前最为精确的实验结果,发现比自由Lambda重子的寿命要小约20%,这对进一步理解超核相互作用提供了精确的实验数据。同时STAR还首次测量了3 GeV下超核的产额,发现显著高于高能区(2.76 TeV)测量的结果,说明低能高重子密度区对研究奇异核的确更有优势。实验结果与强子输运模型相符,对理解低能区超核产生机制提供了重要的实验依据。

(物理学院 核探测与核电子学国家重点实验室)

在气体递质高分子材料领域

## 中国科大取得系列进展

**本报讯** 一氧化氮(NO)、一氧化碳(CO)和硫化氢是生物体内源性气体递质,具有重要的生理/病理功能,也具有优异的抗炎和抗菌活性。鉴于气体递质在治疗心脑血管疾病和呼吸系统疾病方面的独特优势和明确疗效,发展气体递质药物受到广泛关注。不同于传统的固体和液体药物,气体递质不能通过口服、注射、透皮等方式给药;在生理条件下易代谢、半衰期极短,吸入给药后主要作用于肺部,难以到达其它病灶部位。

近期,胡进明课题组与刘世勇教授课题组、肖石燕课题组开展合作,报道一种耐氧型光氧化还原催化调控NO释放的策略,并成功用于细菌感染治疗。以紫外光吸收N<sub>2</sub>N'-二亚硝基-1,4-苯二胺类光响应NO释放分子(BNN-NO<sub>2</sub>和BNN)作为研究对象;研究表明,BNN-NO<sub>2</sub>和BNN在可见光(500 nm)辐照下被光催化剂3(2-苯基吡啶)合铱(fac-Ir(ppy)<sub>3</sub>)激活并释放NO。有趣的是,NO释放后BNN-NO<sub>2</sub>和BNN可自发转化为相应的

脲二亚胺结构,原位清除产生的活性氧,实现了独特的氧气耐受性能。虽然光氧化还原催化已广泛用于有机合成中,但在生理环境下利用光氧化还原催化反应激活生物活性分子仍面临巨大挑战。

研究人员将BNN-NO<sub>2</sub>或BNN引入两性嵌段聚合物中,负载光催化剂fac-Ir(ppy)<sub>3</sub>后可得到均匀胶束纳米粒子。在可见光辐照下,在无需额外添加氧气清除剂的条件下成功实现了NO的触发释放,同时伴随着水中溶解氧含量的自发下降。体外抗菌实验结果表明:该NO释放胶束可使细菌膜电位超极化,并增加细菌膜渗透性从而达到杀灭细菌的效果。在小鼠全皮层细菌感染创伤模型中,光氧化还原催化触发NO释放可有效治疗耐甲氧西林金黄色葡萄球菌伤口感染并促进伤口愈合。

本工作为探索光氧化还原催化的生物医学应用提供有益参考,其独特的氧气耐受性有效避免生理环境下氧对光氧化还原催化的不利影响。

(化学与材料科学学院)

**本报讯** 为缩短电动汽车充电时间,科学家一直在积极寻找新方案。

近日,中国科大俞书宏院士团队与姚宏斌、倪勇教授团队合作,提出并制备出一种新型双梯度石墨负极材料,实现锂离子电池在6分钟内充电60%。相关成果近日发表于《科学进展》。

高能量密度与快充性能难以兼得

当前,锂离子电池驱动的电动汽车因节能、环保等优点受到人们的青睐。然而,电动汽车的充电时间远长于传统燃油汽车的加油时间,大大降低了用户体验的好感度。

“这主要是因为锂离子电池中石墨负极较差的倍率性能,限制了电动汽车的快速充电能力。”论文共同第一作者、中国科大合肥微尺度物质科学国家研究中心特任副研究员卢磊解释。

能量密度、功率密度是评价电池系统的两个重要参数。能量密度决定着单位质量/体积下可以储存的能量大小,功率密度则决定着电池充放的倍率。理想状态下,这两项参数越高,锂离子电池性能越好。然而,高能量密度与快充性能是一对矛盾,是一个“此消彼长”的过程。

“高能量密度通常意味着电池单活性物质质量比较高,电极比较厚,从而具有较长的锂离子传输路径,限制充放电倍率。”卢磊说。为提高石墨负极的倍率性能,传统策略通常是将石墨电极做到多孔或变薄。“但是,这些方法往往会‘牺牲’电池的容量。”

有没有一种使高能量密度与快充性能“鱼与熊掌兼得”的解决方案? 俞书宏团队决定从电极结构设计入手。

给石墨颗粒“排队”加快充电速度

研究团队首先构建了一种新型粒子级理论模型,用于同时优化电极结构中粒度分布和电极孔隙率分布两个参数,提高石墨负极的快充性能。

传统的二维模型通常将颗粒简化为均质球形并使孔隙均匀分布。事实上,石墨颗粒大小不一、形状不同,通常以相当随机的顺序排列。同时孔的形状和大小也非均匀分布。而新型粒子级理论模型是基于真实的石墨颗粒构建出的三维模型,与现实的电极结构很接近。

在粒子级理论模型中,研究人员按照石墨颗粒的大小顺序使其重新“排队”,同时调整电极孔隙率大小分布。越接近电池顶部,石墨颗粒越小,孔隙率越高;越接近底部,石墨颗粒越大,孔隙率越低。

研究人员将这种结构称为双梯度电极。模拟计算结果表明,在大电流密度充电条件下,这种新结构相对于传统的随机均质电极以及单梯度电极,展现出了优异的快充性能。

传统的电极制备方法中,浆料黏度很高,制备的石墨浆料稳定,不易发生沉降,因此制备出的电极(包括石墨颗粒大小和孔隙率大小)通常都是均匀分布。卢磊说:“就像速溶奶粉,取任何一部分都是均质的。”

如何构筑一种“异质”结构? 研究团队开发一种低黏度无聚合物黏结剂浆料自组装技术,混合铜包覆的石墨负极颗粒以及铜纳米线于乙醇溶液中制成浆料,利用不同尺寸石墨颗粒在浆料中沉降速度的差异性,成功构建出模拟计算优化的双梯度结构,得到电极。

研究人员发现,基于这种新型双梯度石墨负极材料制备出的锂离子电池在6分钟内从零充电到60%,在12分钟内从零充电到80%,同时保持高能量密度。

“通常评价电池快充性能都是考量充电到60%或者80%容量的时间。”卢磊说,电动汽车制造商通常建议将车辆充电至80%,以保持电池寿命。

6分钟快充技术离产业化有多远?

谈到研究最大亮点,卢磊磊表示,研究“完成了假设、理论模型建立到实验再验证的过程,为克服锂离子电池高能量密度和快充性能之间的矛盾提供新思路”。

卢磊磊坦言,目前实验室的制备方法很难实现大规模生产,双梯度结构的设计很难保持电极的一致性。“距离产业化还有一定距离。”

“目前,团队正逐步解决这些问题。希望有朝一日这种更高效的电池可以为电动汽车提供动力。”卢磊磊说。

“这种电极结构设计为解决快充难题提供了新思路,建议在大电池中应用以进一步评价其性能。”一位审稿人如是说。

(王敏)

我校在5G滤波器领域取得重要进展