

中国科大揭示河蚌铰链可变形硬组织耐疲劳机理

本报讯 6月23日，中国科大俞书宏院士团队和吴恒安教授团队揭示了双壳纲褶纹冠蚌铰链内的可变形生物矿物硬组织的耐疲劳机制，提出了一种多尺度结构设计与成分固有特性相结合的耐疲劳设计新策略，为未来耐疲劳结构材料的合理创制发展提供了新的见解。相关研究成果发表于《科学》。

脆性材料作为结构或功能部件被广泛应用于航空航天、电子器件和组织工程等领域。由于人工脆性材料对微裂纹和不易察觉的缺陷很敏感，在长时间的循环载荷作用下，材料很容易累积损伤产生疲劳裂纹，存在失效的风险。随着可折叠穿戴设备的发展，对具有高疲劳抗性的可变形功能材料的需求日益凸显。通过模仿典型的生物矿物材料如珍珠母、骨骼等的结构设计可以提升脆性材料疲劳抗性，但这常依赖于疲劳裂纹扩展过程中增韧行为，然而一旦裂纹开始扩展，就会对器件的性能产生不可逆的影响。因此，寻找并开发新的耐疲劳结构模型对未来可变形功能材料的设计制备具有重要的科学意义和应用价值。



河蚌铰链区域剖面图

双壳纲动物褶纹冠蚌又称鸡冠蚌，是一种常见的淡水蚌类。为了满足滤食、运动等生存需求，其外壳在一生中需要进行数十万次的开合运动。连接两片外壳的铰链部位也会经历反复的受压和变形，表现出优异的耐疲劳性能。

本项科研工作中，研究人员从宏观到微

纳米尺度上，揭示了鸡冠蚌铰链部位中的折扇形矿物硬组织所蕴含的跨尺度耐疲劳设计原理。揭示了含脆性基元的生物矿物材料在较大形变下的耐疲劳设计新机制，填补了国际上含脆性组元的仿生耐疲劳材料设计的空白。研究所提出的整合跨尺度结构特征与功能特性的设计策略，能够在不同尺度上充分发挥每种成分的固有特性，从而实现材料整体性能的优化。这种兼顾变形性和耐疲劳性的跨尺度设计原则有望为未来功能材料的仿生设计和创制提供崭新思路。

《科学》审稿人评价称：“它集成了诸多表征技术来理解双壳纲铰链组织的显著疲劳抗性”“这无疑激发了对生物复合材料的进一步研究，以设计抗疲劳性能增强的新材料”。同期《科学》观点栏目还专门对此项成果发表评述，称赞“这是令人兴奋的前景”。

论文共同第一作者为中国科大博士研究生孟祥森，近代力学系周立川博士（现就职于合肥工业大学）、化学系刘蕾博士。我校俞书宏院士、吴恒安教授和茅璞波副研究员为论文通讯作者。（陈婉婉）

中国科大发现非整倍体肿瘤细胞分裂期代谢调控机制

本报讯 6月22日，中国科大生命科学和医学部杨振业教授和附属第一医院国静副研究员团队在非整倍体肿瘤细胞分裂期的代谢调控领域取得进展，研究成果在线发表于《自然·代谢》。

非整倍体是人类肿瘤细胞中最普遍的特征，85%以上的肿瘤基因组是非整倍体，而正常细胞是二倍体，找到针对非整倍体肿瘤的特异性靶点，是实现精准杀死肿瘤细胞而不影响正常二倍体细胞的有效策略。非整倍体肿瘤细胞分裂时面临氧化和有丝分裂双

重压力，而其如何成功应对这些压力的机制尚不清楚。

该研究团队利用代谢物的活细胞探针、细胞和动物模型并结合临床队列样本的分析，深入地探究了非整倍体肿瘤细胞在分裂期氧化还原动态变化和调控机制，发现了核心代谢物NADPH在细胞周期的分裂期中的变化规律和重要意义，证明该代谢调控能够确保非整倍体肿瘤细胞染色体准确分离和维持基因组完整性。

研究完整地揭示了NADPH在分裂期的上

游调控激酶CDK1/AMPK通过磷酸化伴侣分子BAG3-T285释放并激活代谢酶G6PD，以及下游参与染色体分裂调控的代谢和周期信号，并且发现BAG3-T285磷酸化在微卫星稳定型（多数为非整倍体）结肠癌样本中比例高，且与不良预后相关。从而为通过干预代谢通路选择性抑制非整倍体肿瘤提供了新的标记物和治疗思路。

生命科学和医学部副研究员程傲星和博士生徐添为该论文的共同第一作者。

（生命科学和医学部）

中国科大揭示血小板激动剂和拮抗剂跨膜转运的分子机理

本报讯 6月20日，中国科大陈宇星教授和周从照教授课题组利用单颗粒冷冻电镜技术解析了人类ABCC4蛋白无配基结合（apo form）、三种底物结合（激动剂TXA2的类似物U46619、拮抗剂阿司匹林和双嘧达莫），以及同时结合U46619和ATP的三维结构。基于结构分析和生化实验，阐明了ABCC4结合广谱底物以及识别并转运血小板激动剂和拮抗剂的分子机制。相关研究成果在线发表于《自然·心血管研究》。该杂志同期发表评论文章，高度评价了该工作，认为ABCC4转运蛋白的结构解析是揭示血小板底物转运进入致密体以及从血小板外排药物关键分子机制的重要第一步，同时为理解血小板相互作用和特异性血小

板拮抗剂的设计奠定了基础。

在血管损伤出血时，需要血小板激动剂（ADP和血栓素TXA2等）激活血小板促进凝血。在病理条件下，血小板拮抗剂阿司匹林和双嘧达莫可以抑制血栓形成，是临床上用于心血管疾病治疗的常用药物。人类ABCC4蛋白属于ABC转运蛋白ABCC亚家族，不仅可以外排抗肿瘤、抗病毒和抗菌药物，导致多药耐药性，而且还可以转运很多生理底物，参与重要的生理功能。ABCC4在血小板中表达量较高，参与转运血小板激动剂和拮抗剂，因此是预防心血管疾病的潜在药物靶标。然而，ABCC4的三维结构及其转运广谱底物的分子机制未知。

ABCC4在无配基和底物结合时呈现向内开

口构象，此时两个核苷酸结合结构域（NBD）相互分离，两个跨膜结构域（TMD）形成一个朝向细胞质液开放的兼容性底物结合口袋。该结合口袋由中心的疏水腔和外围的极性氨基酸组成，其中疏水腔负责稳定底物的疏水核心，而极性氨基酸则与底物的极性基团形成氢键相互作用。ATP结合使得两个NBD发生二聚化，带动两个TMD相互靠近，ABCC4由向内开口构象转变为对细胞质液和细胞外均封闭的向外开口构象。通过结构分析结合生化实验，我们证明血小板激活剂TXA2和拮抗剂阿司匹林均是ABCC4的底物，同时发现双嘧达莫是ABCC4的强竞争性抑制剂，进而阐明了其与阿司匹林临床联用的分子机制。该研究不仅揭示了ABCC4识别广谱底物的分子机制，而且为理性设计靶向ABCC4的血小板拮抗剂以及预防心血管疾病的药物奠定了结构基础。

中国科大陈宇星教授、周从照教授和李琼特任副研究员为论文的共同通讯作者，博士生陈宇为论文的第一作者。（生命科学和医学部）

中国科大提出硼配位铜单原子催化剂高效制备甲烷

体的吸附能，预测了一系列硼、氮配位的铜单原子位点甲烷路径的热力学趋势，结果表明硼配位原子的引入将提升铜单原子位点对于关键一氧化碳中间体的吸附，进而促进二氧化碳电催化还原到甲烷的过程。对不同配位结构的铜单原子位点进行的投影态密度分析结果同样证实，相较于四氮原子配位铜单原子结构，硼、氮共配位的铜单原子位点与产甲烷关键氢化碳氧中间体的相互作用会明显增强。研究人员随后利用共掺杂热解的方式成功制备出了硼-氮共配位的铜单原子催化剂。球差电镜照片证实单原子为主要存在形式。对铜元素K边X射线吸收谱数据综合分析同样表明铜主要以单原子形式存在，主要配位结构为铜原子与两同时个硼原子和两个氮原子结合。

电催化测试结果表明，与四氮原子配位铜单原子结构相比，硼、氮共配位的铜单原子结构对甲烷产物表现出优异的性能，在-1.46伏时显示出73%的峰值甲烷法拉第效率，在-1.94伏

时显示了-462毫安每平方厘米的最大甲烷偏电流密度。电化学微分质谱测试也表明硼、氮共配位的铜单原子结构具有更高的本征活性。流动池中的稳定性测试及铜元素K边原位X射线吸收谱测试结果共同证明了所合成的硼-氮共配位的铜单原子催化剂的结构稳定性。

综上所述，凭借理论计算模拟和实验相结合，研究人员充分展示了如何通过合理调节铜单原子的配位环境来提升产甲烷性能：用低电负性硼原子部分取代四氮配位的铜单原子结构中的氮原子，以促进单原子位点对一氧化碳中间体和氢化一氧化碳中间体的吸附，进而提升铜单原子材料二氧化碳电还原产甲烷的性能。该项工作为提高铜基材料对特定二氧化碳电还原产物选择性提供了一条切实可行的指导思路。

论文的共同第一作者是博士生戴逸舟，李欢和王传浩。

（合肥微尺度物质科学国家研究中心化学与材料科学学院）

本报讯 6月22日，中国科大陈仙辉院士团队应剑俊特任研究员等人与南京大学孙建教授课题组合作，通过超高压技术手段，研究团队发现元素钪在高压下具有高达36 K的超导转变温度，刷新了元素超导最高转变温度的纪录。相关研究成果在线发表于《物理评论快报》。

元素超导体为研究超导电性提供了一个最简单、最干净的材料平台。自从1911年荷兰科学家昂尼斯在元素汞中发现超导电性以来，越来越多的元素被发现具有超导电性。目前，共有50多种元素在常压或高压环境下被发现具有超导电性。然而，大多数元素的超导转变温度都较低，之前最高的元素超导转变温度为26 K，是由元素钪在高压下所实现。

早期研究发现，元素钪在压力下会经历四个结构相变。在23 GPa以上，Sc-I相会转变为Sc-II相，并且Sc-II相的超导转变温度在100 GPa左右达到最高近20 K，其相对较高的超导转变温度被认为是来源于电子逐渐从4s轨道向3d轨道转移所致。由于早期高压实验技术的限制，元素钪在更高压力下的超导电性研究仍然十分缺乏。

针对这一问题，应剑俊等人对元素钪进行了超高压下的输运研究，确定了其高压下的超导相图。通过高压电输运测量发现在Sc-II相，超导转变温度（Tc）随压力增加而迅速增加，与早期的报道一致。而在进入Sc-III相后，Tc随压力几乎保持不变。当进入Sc-IV相后，Tc随压力的增加又继续增加，最高达到28 K。当体系最终在高压下进入Sc-V相后，其超导转变温度突然提升到36 K，并且随压力几乎保持变化。随后，研究团队通过第一性原理计算探索了高压下超导转变温度大幅提升的物理来源。计算结果表明：Sc-V相中d电子与中等频率声子之间的强耦合是导致其高Tc的最主要的原因。这些结果表明元素钪在压力下的超导转变温度与结构密切相关，在Sc-V相中发现的36 K超导转变温度不但刷新了元素超导转变温度的记录，而且也为在简单体系中寻找高温超导材料提供了一个新的思路。

中国科大应剑俊特任研究员为文章的第一作者和共同通讯作者，陈仙辉院士和南京大学孙建教授为上述文章的共同通讯作者。（宗和）

科研简讯

○近日，中国科大宋礼教授与何群特任副研究员团队，提出对分子型金属镍位点上发生二氧化碳电还原反应机理的新认识。相关成果发表于《自然·通讯》。论文的共同第一作者是博士生周煜筑，硕士生周权和特任高级工程师刘恒劼。

○中国科大张效初教授团队创新性地探索网络游戏成瘾在价值决策中损失厌恶的变化及其背后相关的大脑网络的变化，以及是否能够帮助于该疾病的诊断与分类。研究成果日前在线发表于《行为成瘾杂志》。

○近日，中国科大微电子学院胡诣哲与林福江课题组设计的一款基于全新电荷舵采样技术的极低抖动毫米波全数字锁相环（CSS-ADPLL）芯片入选2023 Symposium on VLSI Technology and Circuits。

中国科大发现最高超导转变温度的元素超导体