

## 省长王清宪在研究推进中国科大科技商学院、“科大硅谷”时强调 打造相互赋能的卓越创新生态

为贯彻安徽省委关于高水平创新型省份建设和人才强省建设部署要求，11月17日上午，省长王清宪主持召开专题会议，就深入推进科技创新平台建设，促进创新链产业链资金链人才链深度融合，听取中国科大科技商学院、“科大硅谷”、羚羊工业互联网建设情况汇报，研究安排下一阶段重点工作。

会上，中国科大科技商学院介绍了学院规划建设和发展情况，“科大硅谷”服务平台公司介绍了资源对接和项目入驻情况，羚羊工业互联网公司介绍了平台运行和

科技成果供需衔接等情况，中国科大、省发展改革委、合肥市政府和有关企业负责人围绕三个创新平台建设和更好相互赋能做了深入讨论。

王清宪指出，中国科大科技商学院成立一年多来，省、校、市齐心协力，积极推进学院软硬件建设各项工作，加强与“科大硅谷”、羚羊工业互联网对接互动，相互赋能、竞相发展的局面日益显现。要坚持打造世界一流科技型商学院的目标，高水准设计，高品质建设，注重布局科学、功能实用，融入

科技智能、绿色零碳、现代传播等元素，力争建成彰显独特定位和特色风格的城市地标。要坚守培养“五懂”复合型科技产业组织人才的办学初心，坚持开放合作办学，瞄准科技产业前沿优化课程设计，建强师资队伍，提升创新人才培养水平，激活创新发展的人才引擎。

王清宪强调，“科大硅谷”、中国科大科技商学院、羚羊工业互联网是省委、省政府打造的重要创新平台，要充分发挥各自优势，建立完善链接互动的工作机制，统筹用

好各级各类政策资源，深化项目、资金、人才、技术等要素对接，在共建共享中实现招商引资与招才引智同步落地、原始创新与产业创新协同并进。要强化品牌意识和传播理念，把握科技和产业发展规律，精心策划设计各类创新活动，努力在合肥发出科技产业的前沿声音，讲好创新创业的精彩故事，不断厚植创新生态，感召集聚更多优质要素资源，为“三地一区”建设注入新动能。

(原载于《安徽日报》2023年11月18日头版 记者 吴量亮)

## 合肥综合性国家科学中心三大平台建成完工



日前，合肥综合性国家科学中心“协同创新交叉研究平台”——医学前沿科学和计算智能前沿技术研究中心(以下简称“医算中心”)项目在中国科学技术大学(以下简称“中国科大”)顺利竣工，这标志着“落户”在中国科大的三大世界级研究中心全部完工。

作为合肥综合性国家科学中心建设的重要内容，“协同创新交叉研究平台”除医算中心外，还包含地球和空间科学前沿研究中心(以下简称“地空中心”)、物质科学交叉前沿研究中心(以下简称“物质中心”)。其中，地空中心主要研究深地、深空和气候探测，探索行星科学、地球物质演化和气候变化；物质中心着眼于物质微尺度层面，探索信息、能源、健康、环境、材料等领域重大基础科学问题。

据了解，近期完工的医算中心项目位于中国科大西校区内，总占地面积5324.14平方米，总建筑面积55812平方米，地上22

层，地下1层，该项目比合同工期提前53天竣工并通过验收。此外，项目同步完成的动物房、细胞间等专项实验室建设，比原计划时间提前近9个月，经验收满足科学实验需求，达到投入使用的目标。

值得一提的是，医算中心项目既是中国科学院“十三五”科教基础设施建设的重点领域，也是合肥综合性国家科学中心建设的重点项目，是依托重大科技基础设施集群、聚焦医学和计算智能前沿领域建设的创新平台。项目投入使用后，将支撑合肥综合性国家科学中心建设，搭建生命科学与医学、信息、人工智能等多学科前沿交叉研究的平台，为开展“生命健康+”新兴前沿领域研究奠定良好基础。

据介绍，这三大世界级研究中心为计算机科学、医学、物质科学和空间科学等领域研究提供创新平台。该项目通过创新人才高地、高水平科技智库和国际顶尖科研机构建设，面向国家重大需求以及国民经济主战场，进一步系统提升关键核心技术创新能力，为推动前沿科学创新发展提供良好平台，进一步系统提升合肥关键核心技术创新能力提供关键支撑。

(原载于《合肥晚报》2023年11月20日记者 吴奇)

## AI机器人为火星移民迈出重要一步

火星移民是人类的梦想。实现这一梦想，首先要解决火星大气中氧气缺乏的难题。

近日，中国科学技术大学(以下简称中国科大)教授罗毅、江俊和副教授尚伟伟团队与中国深空探测实验室研究员张哲等合作，通过前期研制的机器化学家“小来”平台，利用火星陨石制备出实用的产氧催化剂，“生产”出氧气。11月14日，该研究成果发表于《自然-合成》。

论文共同通讯作者罗毅表示，“这是使用火星原料制备出的第一个产氧催化剂。此次研究不仅验证了人工智能技术创新材料的超强能力，还向火星移民、星际探索等迈出了非常重要的一步。”

### “就地取材”制出催化剂

水、氧气是人类赖以生存的重要物质基础。科学家发现，火星上存在水资源，但没有氧气。

在地球上，通过电催化析氧反应，以水为原料，科研人员成功制备出了氧气。那么，在火星上是否也可以实现这一目标？由于目前人类无法在火星环境下长期生存，因此无法“就地取材”在火星上制备产氧催化剂。

人工智能机器人为此提供了一个完美的解决方案。2022年9月，中国科大机器化学家“小来”系统接到一项特殊任务——用火星陨石中的一些成分制备催化剂。

“实验中的陨石都真正来自火星。”论文第一作者、中国科大副研究员朱青介绍，火星陨石里包含铁、锰、镍、钙、镁、铝等元素，这些金属元素都是合成催化剂的必要成分。

“小来”利用自身装载的激光诱导击穿光谱设备，对火星陨石进行了详细的矿物分析，发现其中有很多金属适合作为产氧催化剂的有效成分。接下来，它通过强酸浸渍将矿物全部溶解，提炼出里面的金属组分；然后，加碱沉淀得到一个含多金属的氢氧化物；最后，以氢氧化物作为阳极催化剂，参与火星卤水的电解反应，从而制备出氧气。

论文共同通讯作者江俊表示，该工作成

功展示了地外星系上因地制宜创制化学品的智能化全流程，为未来地外文明探索提供了新技术手段，为我国在月球、火星空间站上实现星际资源的原位综合利用提供了独特方案。

《自然-合成》的一位审稿专家高度评价此项工作，称论文报道了“通过机器化学家系统在火星上合成产氧催化剂的令人兴奋的方法”。

### 2000年时间缩短至6周

火星陨石中的金属成分组合形成催化剂，大概有300多万种配方。如何在如此大的基数中快速找到最优配比？

“小来”展现出了超越人类科学家的理论与实践能力，首先利用它的“计算大脑”自主创建了一批理论构象，然后开始做大规模的理论计算。同时，“小来”通过其精准的自动化操作能力，快速高效地执行实验任务。

“理论模拟可以判断大致的优化方向，机器实验则能提供精准的实测数据。将理论大数据与实验小数据对齐，就建立起了一个理实交融的机器学习模型。”朱青说，该智能模型能更好描绘整个高维空间中的化学反应走势，这是依靠人类传统经验无法实现的。

也就是说，这个智能模型有“预测全局”的能力，可在数百万个配方中“推荐”出性能最好的配方。根据此配方，“小来”再进行实验验证。

最终，经过6周243次实验，“小来”成功利用5种火星陨石制备出一款实用的产氧催化剂。“如果人类化学家通过‘试错’的模式进行研究，这个工作可能需要2000年才能完成。”朱青说。

“这种理实交融的研究范式极大加快了新材料发现的过程，能够从数百万种可能的配方中迅速识别出最佳组合。”江俊表示。

### 原位综合利用星际资源

那么，用火星陨石制备的催化剂与地球上的催化剂有什么不一样？为何不直接将催化剂从地球带到火星上？

“这里强调的是一种原位资源利用策

略。在未来的火星移民、星际探索中，不太可能一直将地球上的物资运送过去。一是运输成本太高，二是地外环境下的化学反应情况跟地球上不一样，并且催化剂材料自身也有使用寿命。”江俊说，因此，最好的方法就是“就地取材”。例如，机器人在无人监管的情况下，可利用未知的物质自主发现并且创造出有用的化学品。

随着人类深空探测活动日益活跃，传统运载方式难以支撑未来空间任务的发展，需要不断减少对地球物质能源补给的依赖，原位资源利用技术就成为了重要手段。

江俊介绍，地外原位资源利用指的是在星际探索的过程中，因地制宜采集当地的物质资源进行物理化学方面的改造，使其变成有用的化学品、材料、设施。

此前，罗毅、江俊等人与其他团队协作，发现“嫦娥五号”取回的月壤可以进行原位资源利用，展示了机器人从制备催化剂到生产地外燃料和氧气无人化操作的全过程。

在该研究中，研究团队最大程度模拟了火星环境下的催化效果。在300立方米的空间站顶部铺满火星陨石催化剂，利用太阳光发电驱动电解水反应，15个小时后室内的氧气浓度即可达到人类生存所需的指标。

“未来，人类可以在火星上建立一个个产氧小工厂，在其屋顶铺满‘小来’制备的产氧催化剂，经过反应，就能得到氧气。”江俊说。

“下一步，我们计划为机器人配备更多的传感器和光谱设备，使其拥有探测感知和预测化学物质微观演化的能力，以更好适应不同的化学场景。”江俊说。此外，他们还计划建立一个有数百个机器人和数千个工作站的大型机器化学家实验室。这样一来，不仅能覆盖更广泛的科学研究领域，让更多科研人员参与和智能化学相关的研究，还能产生高质量、高通量的科学数据，助力建立跨学科、跨领域的通用科学智能模型。

(原载于《中国科学报》2023年11月14日头版头条 记者 王敏)

**本报讯** 中国科大高敏锐课题组通过原位还原铜硝石，研制了一种具有高密度堆垛层错的衍生铜催化剂。堆垛层错作为结构缺陷使铜的d带中心上移，增加d电子向CO的 $2\pi^*$ 反键轨道的捐赠作用，从而加强 $\star$ CO的吸附，提高 $\star$ CO覆盖度。这种高 $\star$ CO覆盖度促使反应通过 $\star$ CO-COH $\rightarrow$  $\star$ C=C=O途径向乙酸转化。相关成果近日发表于《美国化学会志》上。

电催化二氧化碳还原是二氧化碳资源化利用的有效手段，为实现“双碳”目标提供了重要的途径。当前，大量研究工作通过设计多相催化剂，在碱性或中性介质中将二氧化碳高效转化为多碳产物。然而，这些电解环境会伴随大量碳酸氢盐/碳酸盐的形成，导致碳效率利用率低。上述难题可以通过串联电解来解决：即先将二氧化碳转化为一氧化碳，然后再通过一氧化碳电还原来制备多碳产物。在各种多碳产品中，乙酸具有广阔的市场，年生产能力超过1800万吨，广泛应用于聚合物、药品和食品等领域。在工业上，目前主要通过甲醇和一氧化碳的热羰基化制备乙酸，然而这个过程会导致大量的碳排放。通过可再生电能驱动的一氧化碳到乙酸的转化在过去几年中取得了显著进展。为了进一步提高转化效率，研究人员需要开发更高效的催化剂，促进一氧化碳到乙酸的稳定生成。

研究人员通过激光辐照合成方法成功制备了纳米铜硝石 $\text{Cu}_2(\text{OH})_3\text{NO}_3$ 结构。分子动力学模拟和一系列结构表征表明，在电还原预处理过程中， $\text{Cu}_2(\text{OH})_3\text{NO}_3$ 可以经过显著的原子结构重排，产生丰富的堆垛层错缺陷结构。

一氧化碳还原性能测试结果表明，在100到500 mA cm $^{-2}$ 的电流密度范围内，堆垛层错铜催化剂对乙酸产物都具有非常高的选择性。值得一提的是，在400 mA cm $^{-2}$ 下，堆垛层错铜催化剂对乙酸产物的选择性达到56%；而在相同条件下，商业铜催化剂的乙酸选择性仅为31%。该堆垛层错铜催化剂在持续电解40小时后可以生产68.3 mmol的乙酸盐。

为了探明堆垛层错铜催化剂促进乙酸生成的内在机制，研究人员利用原位拉曼、原位红外及电化学质谱等技术对反应过程及CO吸附进行了监测。与商业铜相比，由于其丰富的堆垛层错缺陷结构，堆垛层错铜催化剂对 $\star$ CO有更强的吸附作用，提高了催化剂表面的 $\star$ CO覆盖度，这对随后的反应途径产生了重要的影响。

研究人员分别采用Cu(511)与Cu(111)作为缺陷位与平台位的模型进行理论计算。结果验证了缺陷位点对 $\star$ CO具有更强的吸附。此外，Cu(511)的d带中心比Cu(111)更接近费米能级，这意味着Cu(511)可以更有效地发生d $\rightarrow$ 2π $^*$ 反向捐赠，从而实现更高的 $\star$ CO覆盖率。催化剂表面更高的 $\star$ CO覆盖度促使反应通过 $\star$ CO-COH $\rightarrow$  $\star$ C=C=O途径生成乙酸产物。

论文的共同第一作者为中国科大博士研究生吴志征、博士后张晓隆、博士研究生杨朋朋和牛壮壮。(合肥微尺度物质科学国家研究中心)

## 中国科大实现一氧化碳到乙酸的高效电化学转化