

中国科大在活性物质流变性质研究中取得进展

本报讯 徐宁教授研究组在活性物质流变性质的研究中取得重要进展，相关研究成果于6月6日在线发表在《美国科学院院刊》。

徐宁研究组系统比较了活性物质和剪切体系的流变性质，主要针对它们的稀释现象即粘度随活性力或剪切应力增大而减小的现象，发现活性物质的粘度随活性力的变化与剪切体系的粘度随剪切应力的变化

有非常相似的行为。它们的稀释都源于原本形成逾渗的颗粒团簇被打破的微观机理，团簇被打碎得越快，粘度下降得越剧烈。对于普通的牛顿流体、剪切作用只能使流体中的分子倾向于沿着剪切流场方向运动，由此形成逾渗团簇并一直维持，因此粘度无法随剪切应力变化。然而，活性物质的加入改变了这一局面。由于活性力的方向可以随机发生偏转，从而赋予了活性物质

破坏逾渗团簇的能力，造成溶液粘度的下降。该工作给出了大肠杆菌造成类“超流”现象的可能解释，并且进一步丰富了活性物质和剪切体系存在潜在关联的证据，为非平衡体系的统一描述提供了更多的素材。

博士研究生莫若阳为论文第一作者，徐宁教授为通讯作者。

（物理学院 合肥微尺度物质科学国家研究中心）

中国科大发现有机分子间相互作用的新模式

本报讯 近日，张国庆教授团队报道发现了有机分子之间相互作用的新模式：即芳香酰亚胺与脂肪胺之间能够形成稳定的光诱导电荷转移复合物，并通过稳态和时间分辨的发射光谱、吸收光谱、质谱、顺磁共振等手段系统性研究该复合物的性质及形成过程，并证明了该复合物可用于光诱导聚合、二氧化碳光还原、紫外储能等领域，相关研究成果发表于dmm。

张国庆教授课题组首先选取了苯酰亚胺和三乙胺为模型化合物，通过测量苯酰亚胺和三乙胺混合体系光照前后的谱学性质确定

了光诱导电荷转移复合物（PCTC）的存在，并通过高分辨质谱、时间分辨光谱，改变苯酰亚胺分子的取代基、更换电子给体等手段，研究了PCTC的形成机制，证明了其确实需要通过激发态的电荷转移和之后电子激发态的激发才能形成。

课题组将该体系成功应用于丙烯酸酯类单体的光诱导聚合，二氧化碳的光还原，以及光能存储及释放方面，通过在黑暗条件下将光照时储存的光能释放，使得原本需要光照才能进行的过程在黑暗条件下也能进行。

作者推测，通过电子激发态形成溶液中稳定的基态复合物这种分子间相互作用模式不应仅限于酰亚胺和胺分子之间，很有可能是一种比较普遍但是未被关注的相互作用，有望于在更多的分子结构中被发现并且能够用于新的光化学应用。

博士后黄文环为论文第一作者，中国科大合肥微尺度物质科学国家研究中心张国庆教授、陈颢副教授为论文通讯作者。

（合肥微尺度物质科学国家研究中心 合肥国家实验室）

“两束光”的交汇

微观世界，神秘难测。厚度仅以微米计的高分子薄膜，因原子、分子的排列组合方式不同，材料的性能、性质会迥然不同。想“看清”高分子薄膜的内部结构，需要用到不一样的“光”。

相距近500公里的“两束光”，在微米尺度上“交汇”，帮助中国科学技术大学国家同步辐射实验室党委书记李良彬所带领的团队，“看清”了薄膜生产加工过程中复杂结构与性能关系，也促进了更多科技成果转化。

这“两束光”，一束来自中国科学技术大学国家同步辐射实验室内的“合肥光源”，一束来自上海张江的“上海光源”。

同步辐射光源又被称为“超级显微镜”。“合肥光源”是我国建设的第二代同步辐射光源，“上海光源”则是第三代。

“两束光”的交汇，源于长三角一体化发展背景下，上海张江、安徽合肥两家综合性国家科学中心携手推进开放共建、

强化合作共享、进行协同创新。

利用“合肥光源”进行日常研究，不定期到“上海光源”开展实验，李良彬团队已经习以为常。

发展离不开协同，科研同样需要协同。登录中国科学院重大科技基础设施共享服务平台提交项目申请，通过评审后即可获批相应的在“上海光源”开展实验的时间，在团队成员、博士生朱健和看来，“到‘上海光源’做研究，和在中国科大一样方便”。

此前，为了研制出液晶显示屏中广泛应用的新型显示光学膜，李良彬团队联合相关企业全力攻关。“研究从溶液干燥过程到加工成偏光片背后的基础问题，大量的工作在‘上海光源’完成。”李良彬说。

不到3年，原料、配方、工艺等瓶颈被逐一突破，新型显示应用的关键产品PVA光学膜研制成功，国内第一家年产700万平方米PVA光学膜生产线也顺利投产。

“两束光”的交汇，照见了长三角科技创新策源地的加速打造。

联合更加紧密。2023年6月，“上海张江 安徽合肥综合性国家科学中心合作共建协议和长三角重大科技基础设施联动发展合作备忘录”签署，提出进一步提升上海张江、安徽合肥综合性国家科学中心合作共建水平，构建区域协作创新体系。大科学基础设施集群开放共享，科技创新一体化协同发展，将更加深入广阔。

能量持续升级。如今，“合肥光源”与“上海光源”正联合共建第四代同步辐射光源“合肥先进光源”。“相比第三代，‘合肥先进光源’的亮度将至少提高两到三个数量级，会让我们‘看’得更清晰。”李良彬说。

更多“光束”的汇聚，让长三角科技创新、产业创新协同发展的道路更明亮。

（原载于《人民日报》2024年6月10日头版 记者 曹雪盟 田先进）

中国科大发现铜晶面对二氧化碳还原反应快速步的调控现象

本报讯 近日，高敏锐教授课题组报道在二氧化碳电还原反应中，铜催化剂的决速步因晶面不同而表现出显著差异。利用主要暴露Cu(100)晶面的催化剂，研究人员在中性介质中实现了72%的乙炔法拉第效率和工业级的部分电流密度，并稳定将CO₂转化为乙炔超过100小时。相关研究成果于6月10日发表在美国科学院院刊。

研究人员通过等离子体处理策略，在CuO纳米片上营造氧空位，该空位的存在调节了费米能级附近的态密度，带来较小的功函数。密度泛函理论计算预测，氧空位的存在有利于CO₂吸附，促进催化剂还原过程中Cu(100)的形成。没有氧空位的CuO在还原过程中则倾向于生成能量较低的Cu(111)晶面。电镜结果显示，还原处理后的样品保留母体催化剂形貌，高分辨透射电镜及电化学氢氧根吸附实验表明，所获得的两种催化表面分别以Cu(100)和Cu(111)为主。

研究人员对在流动池与膜电极体系中对催化剂进行了性能评价，结果表明，在500 mA cm⁻²条件下，Cu(100)为主要暴露晶面的催化剂的乙炔法拉第效率为72%（多碳产物法拉第效率近90%），远高于Cu(111)为优势晶面的催化剂。

原位光谱及电动力学实验结果显示，在具有不同主体暴露晶面的样品上乙炔的生成具有不同的反应路径。Cu(100)为优势晶面的催化剂上CO₂覆盖度更高、CO₂吸附更强且以顶式吸附为主，乙炔转化的决速步是两个CO₂的偶联过程；而在主要暴露晶面为(111)的催化剂上，乙炔转化的决速步发生的是CO₂与H₂O分子的质子耦合过程。密度泛函理论计算结果同样佐证了这一实验结果。

博士研究生张玉才、博士后张晓隆、博士研究生吴志征是论文共同第一作者，高敏锐教授是论文通讯作者。

（合肥微尺度物质科学国家研究中心）

8个小技巧“用好”大语言模型

用大语言模型，还需要技巧？在人们的印象中，这是个极其简单的操作：只需输入一个问题，立刻就能得到回答。

但实际上，如何有效地与这些人工智能模型互动，发挥出它们的最大潜力，却是一个经常被忽视的话题。

中国科学技术大学心理学系特任研究员林志成关注到这一话题，并在他最近的评论文章中提供了一系列的策略和指导，希望帮助人们更好地理解“用好”这些先进的人工智能工具，生成更精准的回答。相关研究成果日前发表于《自然·人类行为》。

近日，《中国科学报》记者采访了林志成。“从本质上讲，大语言模型是一个数学模型，缺乏对语义的理解。它只能‘预测’下一个文字出现的概率，而不能生成‘真理’。”林志成建议，在输入指令时，可以使用分解复杂任务、增加相关语境、角色扮演、提供具体示例等8个小技巧。

分解复杂任务

由于缺乏对语义的理解，因此想要大语言模型自己“举一反三”，是很困难的。但是，它有海量的数据、珍贵的“记忆”，可以从中提取信息。这套记忆来源于训练数据——长期记忆，还有人们日常给予的指令——短期记忆。

因此，用好大语言模型，林志成给出的第一个小技巧是拆分复杂任务。

例如，不要直接给出“将文本翻译成中文”这样宽泛的指令，可以考虑把它拆解成两步：首先按字面意思翻译，保持含义不变；然后意译，让文本符合中文的语言习惯。

类似地，与其让它直接写出一篇1000字的论文，不如尝试把任务分解成任务，用具体的指令分别生成概述、结论和中心论点。

林志成说，“清晰、逐步的指令，会

降低模糊性和不确定性，因此可以生成更为准确的答案”。

添加相关语境

大语言模型比人类的“短期记忆”多太多了。因此，想要让它提供精准且符合问题语境的回复，在输入时提供相关的语境就很重要。这是第二个小技巧。

林志成说，一个限定语境的问题应当包含具体内容，将问题放在具体的细节中，这样才能引导大语言模型产生更为准确、相关的理解力，生成更有洞察力、更精确的回复。

例如，让大语言模型起草一份求职简历，事先要把企业发布的具体职位要求、个人基本情况等内容一并提供给它，如此一来，输出的简历则更具有针对性。

明确的指令

当你走进一间咖啡馆，想要点一杯喜欢的饮料，应该不会说：“请来杯咖啡”。而是会说，“来杯摩卡或者拿铁”。

同样地，你也不要期待大语言模型能读懂你的心。

林志成指出，要想降低模型预测时的不确定性，就要给出明确的指令。这是第三个小技巧。

例如，你让大语言模型修改文章，不要说“润色这篇文章”，而要具体到修改成什么风格、文章的目标受众是谁……

林志成说，一段更具体的指令甚至可以“像个顶级期刊的顶级编辑那样，润色这篇文章，让它更为清晰流畅”。

让它提供多种选项

大语言模型还拥有巨大的“长期记忆”，超强的生产能力。你可以让它提供多种版本的选项，而不仅仅是一个版本内容。

“很多时候，人们潜意识里认为，大语言模型给出的就是最优答案。但就文本

写作而言，它并不是一个简单量化的东西，它具备很多主观色彩。因此很难判断大语言模型第一次给出的就是最优答案。”林志成说。此时，可以让大语言模型提供多种选项，再鉴别出符合个人需求的答案。这是第四个小技巧。

此外，林志成建议，除了要求大语言模型提供多种选项外，还可以考虑重复用同样的指令多次生成回复。

设定角色

大语言模型特有的“长期记忆”还意味着它能够模拟各种角色，提供专业的反馈或者独特的视角解读。

例如，模仿典型读者，提供写作上的反馈；扮演一名写作教练，帮助修订文稿；甚至可以扮演一只擅长人类生理学的西藏牦牛，以其独特的视角解释海拔对心肺功能的影响。这是第五个小技巧。

林志成说，“让大语言模型扮演不同角色，不仅能获得更多针对性和符合语境的回复，而且在这个过程中，还能获得更多乐趣。”

提供具体例子

大语言模型擅长小样本学习。林志成说：“一个特别有效的手段就是使用具体的例子丰富想法。就像你去理发店，对理发师描述想要的发型，最好的方法是拿一张照片，胜过千言万语。”这是第六个小技巧。

例如，不要模糊地说“以这些数据制图”，而是提供一个例子，如“为这些数据画个条形图，类似附件论文中的图”。

另一个例子是，当你让大语言模型根据文稿生成摘要时，可以提供几个你打算投稿的期刊中的摘要样例。语言模型可以参考这些例子来生成符合期刊风格的摘要。

“这些具体的例子就像路线图一样，

指导大语言模型朝着与你期望一致的方向生成内容。”林志成说。

声明想要的输出格式

林志成说，大语言模型经常“废话太多”。例如，让它修改一篇文章，它可能会把修改的细节一并反馈，但其实你只需要最后的成稿。

此时，可以要求大语言模型仅输出修改后的内容。类似地，可以指定回复的格式，包括列表格式、阅读水平和语气等。用列表格式和通俗的语气能够提升回复的可读性；限制回复的长度可以使内容更加简洁；设定阅读水平则有助于更好地理解。这是第七个小技巧。

例如，与其让其“总结关键发现”，不如声明回复格式：“用列表形式总结关键发现，并使用高中能够理解的语言”。

实验、实验、再实验

“需要指出的是，如何使指令更有效，并没有确切的答案。有时，稍微调整一下，可能就会产生显著甚至意外的惊喜。”林志成说，实验、实验、再实验，是最好的办法。这也是第八个小技巧。

例如，在一系列推理问题中，在指令中简单加入“一步步思考”就可以让大语言模型表现得更好。

更有意思的是大语言模型还可以回应“情绪性的信息”。假如你要让它修改一篇未经同行审议的论文，可以在指令中加入一些短语：“深呼吸一下，这对我的职业生涯很重要”。

林志成说，这些例子证明大语言模型对指令非常敏感。但并非所有尝试都会成功，但每次尝试都会有新的收获，并在一定程度上提升工作效率，增加乐趣。

（原载于《中国科学报》2024年5月28日 记者 王敏）