

我国学者实现亿原子级拉曼光谱量子力学模拟

【本报讯】中国科学技术大学精准智能化学重点实验室商江毅教授、杨金龙教授团队与中国科学院计算技术研究所刘颖高级工程师、华东师范大学倪晓教授等团队合作完成的研究成果“Pushing the Limit of Quantum Mechanical Simulation to the Raman Spectra of a Biological System with 100 Million Atoms”成功入围2024年戈登·贝尔奖，这是2024年入围该奖的唯一中国团队成果，也是该团队继2021年后再次入围该奖项。戈登·贝尔奖是国际高性能计算应用领域最高奖，由美国计算机协会（ACM）颁发，用于表彰世界范围内高性能计算的杰出成就，尤其是高性能计算应用于科学、工程和大规模数据分析领域的创新工作，被称为“超算领域的诺贝尔奖”。此前，该成果也获得了2024年中国计算机学会（CCF）“中国超算年度最佳应用奖”。

拉曼光谱是研究生物分子结构的重要工具，被广泛应用于药物开发、疾病诊断等领域。然而，拉曼光谱量子模拟计算量巨大。此前的拉曼光谱量子模拟仅能处理数千原子的小

体系，研究团队开发的QF-RAMAN程序突破了这一限制，首次实现了包含1亿多原子的新冠病毒刺突蛋白在水溶液中的拉曼光谱量子模拟，与以往工作相比取得了4到5个数量级的提升。这一突破的实现得益于团队在算法设计和工程技术方面的多项创新。在传统密度泛函理论（DFT）和密度泛函微扰理论（DFPT）计算中，计算量随体系规模的增大呈现三次方增长，这使得计算通常只能局限于小型体系。

针对以上问题，团队开发了将全电子全势密度泛函微扰理论与量子分块算法深度融合的新方法，将复杂生物分子分解为多个子系统，显著降低了计算复杂度。同时团队针对海量分块计算的负载均衡难题，开发了分块体系敏感的多级调度技术，提高了海量分块计算的并行可扩展性；针对小规模运算的异构加速难题，设计了弹性任务卸载技术，通过小规模运算的灵活聚合，大幅提高异构加速器的硬件利用率。此外，QF-RAMAN程序采用OpenCL通用异构并行计算框架，能在不同硬件架构（CPU、GPU、SW等）的超级计算机上，借

助OpenCL编译工具链（oneAPI、rocm、swcl等）实现跨平台运行。在最新一代神威超级计算机上，该程序利用96,000个计算节点（超过3,700万个计算核心）实现了399.9 PFLOP/s的双精度峰值性能；在东方超级计算机上，使用6,000个节点（24,000个GPU），程序也展现了85 PFLOP/s的优异性能。在新一代神威超级计算机上取得了99%的弱可扩展性测试结果，充分展示了该方法的高效性和可扩展性。在此基础上，团队提出了适用于亿级原子体系的矩阵方程求解拉曼光谱的新算法，避免了对角化求解，为高精度拉曼光谱计算提供了全新方案，有效解决了大规模量子力学拉曼模拟中的关键技术难题。

此次技术突破不仅展示了中国在高性能计算和计算化学领域的领先地位，也为量子力学模拟的应用场景探索了全新的可能。这一成果为高性能计算与科学研究的深度融合奠定了坚实的技术基础，将推动生物分子模拟研究进入新阶段。

（精准智能化学重点实验室 科研部）

中国科大基于新型多模态单元实现磁控软体驱动器的模块化设计

【本报讯】近日，中国科学技术大学工程科学学院、人形机器人研究院李木军副教授、张世武教授等提出了一种模块化设计方法，利用多模态单元实现具有复杂变形和丰富功能的磁控软体驱动器的快速设计，拓展了硬磁性材料在机器人、流体系统、微细操作中的应用。相关研究成果发表在《先进材料》上。

研究团队受蚯蚓等环节动物的结构启发，提出了一种具有多模态变形的磁驱动单元，单元集成了收缩、弯曲、扭转、体积变化等多种变形模式，不同变形模式的单元可由同一匀强磁场驱动，从而实现了磁性软材料的简便编程设计，成功解决了磁控软体机器人的逆变形设计问题。该工作提出的模块集成设计策略具有多功能性和便利性，推动了硬磁性材料在智能体和集成机械系统中的应用。

该设计方法实现了磁控软体机器人的多场景应用，包括顺应性柔性抓取、软体机器人、流体系

统等，拓展了磁控软体机器人的应用潜力。研究团队使用收缩模态单元设计了无绳驱动的爬行人形机器人，可实现速度和方向可控的驱动运动。此外还利用收缩模态单元设计了磁控软泵，避

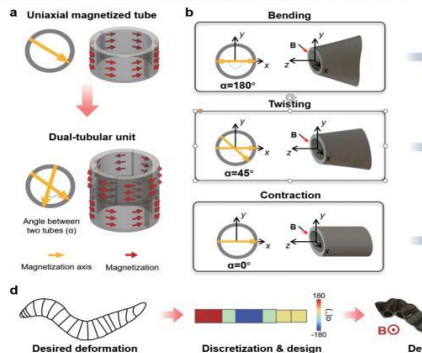


图1：磁控软驱动器的模块化单元集成设计

免了传统机械泵的磨损和锈蚀问题，且与电控系统隔离从而避免了在潮湿环境下使用的漏电等危险。利用弯曲模态单元设计的磁控软抓手，具有很强的形状适应性，能够轻松抓取薄壳类、生鸡蛋、鲜花、薯片等脆弱和易变形物体。而利用扭转单元设计的扭动机，则可以在弯曲狭窄的管道内拆卸螺钉。此外，研究团队还将不同变形模态的单元集成到一个流体系统中，实现泵送、搅拌、输出选择的协同工作。最后，研究团队还可将单元尺寸缩小到微米级，利用收缩和弯曲单元设计了毫米级的磁控钩爪，可深入窄缝中勾取掉落

的物品。中国科学技术大学精密机械与精密仪器系硕士生衣舒雪为论文第一作者，李木军副教授、张世武教授、孙宇轩博士后为论文通讯作者。

（工程科学学院 人形机器人研究院 科研部）

中国科大提出4个有关超临界流体标准 有助揭示其在地震等领域作用

“由于超临界流体只在高温高压状态下保持稳定的特性，如何准确识别某个区域曾经有超临界流体的活动一直是亟待解决的科学问题。”中国科学技术大学肖益林教授12月25日接受采访时介绍，其团队在通过大量的数据分析后，提出了4个方面识别俯冲带超临界流体的标准。

超临界流体（Supercritical fluid）是形成于高温—高压环境下，水和硅酸盐熔体完全互溶的一种特殊流体。其具有非常强的元素迁移能力，在地球内部物质循环的很多方面都发挥了巨大作用。然而，如何在处于常温常压状态下的天然样品中识别超临界流体是长期以来的研究难点。

近日，肖益林教授的研究团队与合作者系统总结了20多年来相关领域的进展，并进行了进一步的数据分析，提出了识别俯冲带超临界流体活动的4个方面标准。相关成果发表在最新一期的地球科学国际知名期刊《地球科学评论》上。

该研究首先从相图层面明确了超临界流体的概念，然后从多相包裹体、特殊的元素迁移、超临界流体的相分离效应和同位素分馏等方面详细阐述了天然样品中超临界流体活动的记录。最后，本研究提出了4个方面的识别超临界流体活动的标准。包括：（1）盐类矿物是富含流体包裹体的识别指标，对碳酸盐、硫化物/硫酸盐、磷酸盐和氧化物这类矿物，代表含水熔体的包裹体中这些矿物种类数 ≤ 2 ，而代表超临界流体的包裹体中这些矿物的种类数 ≥ 2 ；（2）计算获取的超临界流体相比源岩的元素富集系数具有 $\text{CaO}/\text{Al}_2\text{O}_3 \geq 1.15$ 、 $\text{FeO}/\text{Al}_2\text{O}_3 \geq 0.5$ 和 $\text{MgO}/\text{Al}_2\text{O}_3 \geq 0.6$ 的特征，而含水熔体则小于上述临界值；（3）微量元素特征，从超临界流体中结晶的金红石往往具有较低的Nb含量，此外，在 $\text{Log}[\text{Ta}]/\text{Log}[\text{Nb}]$ 图中，超临界流体交代后的榴辉岩成分与由玄武岩成分确定的线性拟合线之间的距离大于0.1；（4）超临界流体的Fe同位素组成（0.9–1.1‰）远高于其它流体（<0.4‰）。

据介绍，化学意义上的超临界流体可以分为单一组分（如水或二氧化碳）和多组分体系形成的超临界流体，其中超临界二氧化碳已经广泛应用于工业萃取等生产过程中，比如中草药有效成分的提取、色素的提取、化学混合物的分离等。

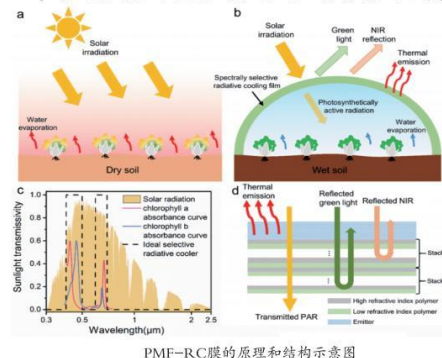
而地球科学领域，超临界流体兼有水和硅酸盐岩浆的物理化学特性，使得其在地球内部的物质迁移、伟晶岩和矿床的形成、气候和生态环境的变化以及地震的产生等方面都起到了巨大作用。

因此，虽然超临界流体在很多情况下看不见摸不着，但对超临界流体的深入研究有助于帮助人们理解气候的变化和地震的产生机制及预测等。

肖益林表示，在后续的研究中，该团队建立的识别体系可以作为鉴定超临界流体活动的参考标准，从而为揭示超临界流体在成矿、气候和地震等领域的作用奠定坚实的基础。

（转自安徽日报客户端2024年12月29日）

中国科大提出用于缓解农作物热胁迫的被动式辐射冷却策略



PMF-RC膜的原理和结构示意图

【本报讯】近日，中国科大光学与光学工程系刘文教授、李明特任副教授课题组提出一种基于聚合物多层干涉原理的光谱选择性辐射冷却策略（PMF-RC膜）。PMF-RC膜由两个不同的聚合物多层膜系和一种透明聚合物复合制材料组成，可选择性地透过用于农作物生长的光有光谱辐射，反射植物叶片利用率较低的绿光和近红外光，并具有优异的辐射制冷性能，实现了零能耗降低空气温度、土壤温度和土壤水分蒸发量，并显著提升了高温环境下作物的产量。相关成果发表在《ACS

Photonics》上。

在户外测试中，相较于传统的覆盖农膜（PE膜）和露天环境，PMF-RC膜覆盖后使空气温度下降了2.3–5.0℃、土壤表面以下3厘米处的温度下降了2.1–4.1℃、土壤水分蒸发量下降了11.2%–32.4%。在实际的作物种植实验中，PMF-RC膜生长有落葵、意大利生菜和中国小青菜的产量均有1–3倍的提升。相较于传统的真空镀膜技术，PMF-RC膜采用微纳层叠多层共挤技术制备，具有显著的成本优势和更快的制备速度。除此之外，PMF-RC膜具有优异的耐候化学性能和力学性能，十分适合在温室农业生产中广泛应用。本研究促进了聚合物辐射制冷材料在农业种植领域大规模实际应用的进程。

中国科学技术大学硕士研究生蒋树宝为论文第一作者，刘文、李明为共同通讯作者。

（物理学院 科研部）

【本报讯】近日，中国环境科学学会正式发布2024年度“环境保护科学技术奖”奖励公告。由中国科大工程科学学院刘诚教授牵头，中国科学院合肥物质科学研究院、安徽大学、北京雪迪龙科技股份有限公司等单位参与的科研成果“污染气体超光谱成像关键技术及装备”，由贺弘、王桥两位中国工程院院士提名，荣获2024年度“环境保护科学技术奖”技术发明一等奖。刘诚教授为该成果的第一完成人。

“环境保护科学技术奖”旨在推动我国生态环境领域科学技术发展，鼓励科技创新支撑引领，评选在生态环境科学技术研究工作中做出突出贡献的单位和团队。2024年度“环境保护科学技术奖”共颁发自然科学奖、技术发明奖、科技进步奖71项，其中技术发明一等奖2项。

地基超光谱成像遥感是获取污染气体立体分布信息的重要技术，也是验证国内外卫星遥感准确性的标准方法。随着我国大气污染防治进入深水区，空气质量持续改善亟需更高时空分辨率的靶向成像技术，将排放责任从公里级网格明确到米级尺度的具体设施，从而避免对合规排放企业正常生产的干扰，促进经济增长和空气质量改善双向并进。

刘诚教授团队在国家重点研发计划、国家自然科学基金重大研究计划等项目支持下，研制了一款超光谱分辨率、高信噪比、狭线函数稳定的超分辨率光谱仪，打破了大气环境遥感领域对欧美关键核心部件的长期高度依赖；研制了高光谱分辨率的多通道光谱吸收吸收性气体吸收截面检测装置，实现了对醛类、酮类、酯类和苯系物等吸收信号极弱的多种VOC特征“指纹”吸收信号的精确探测；研发了超光谱解析融合人工智能的靶向成像遥感算法，解决了羽流中极复杂光路精准刻画的问题，实现了排放羽流米级分辨率成像观测，将排放责任从公里级网格细化到具体设施尺度。团队通过一系列关键部件和技术突破，使超光谱靶向成像装备同时实现了污染源靶向成像、多组分气体水平与垂直成像功能，推动了我国自主可控的大气环境超光谱立体遥感技术创新，为我国“碳达峰碳中和”工作提供了必不可少的新技术和新装备支撑。

本次刘诚教授团队荣获技术发明一等奖，充分体现了我校在科学研究及技术创新、科技成果转化及产业化应用方面取得良好成效。

（工程科学学院 科研部）

中国科大提出一种仿墨鱼骨结构材料的跨尺度制备新策略

【本报讯】近日，中国科学技术大学俞书宏院士团队报道了一种利用预设形微纳结构的水凝胶进行组装的新策略，受天然墨鱼骨“刚性空腔-隔板”层状有序结构的启发，实现了仿墨鱼骨结构材料（以下简称：RCWSM）的跨尺度一体化构筑。RCWSM具有与天然墨鱼骨相似的微纳结构“刚性空腔-隔板”结构，比强度和比能量吸收性能优于传统吸能材料。相关研究成果于1月2日发表在《自然·通讯》上。

为了实现RCWSM的构筑，研究人员设计了一种不同结构的水凝胶：采用表面氨基化的微米级微米片与微米级微米片纤维，钙离子交联后形成水凝胶构筑隔板层；选用空心玻璃微珠和聚乙烯醇、季铵化纤维素纳米纤维原位组装，形成具有刚性空腔结构的水凝胶作为刚性空腔层，并将两种不同微纳结构的水凝胶进行层层交替组装。通过外力诱导组装脱水，被包裹在纤维素纳米纤维网络中的微米片发生致密化组装堆叠，形成具有传统结构的隔板层；被包裹在聚乙烯醇/纤维素纳米纤维网络中的空心玻璃微珠致密堆积，同步形成了刚性空腔层，由此实现了“刚性空腔-隔板”结构的制备。在材料内部，构筑单元之间通过氢键、表面共价作用和电荷相互作用等多重相互作用实现了紧密结合。

研究结果表明，仿墨鱼骨“刚性空腔-隔板”结构具有良好的应力分散效果，隔板层有助于整体结构在受压状态下保持良好的稳定性。通过预制异种结构水凝胶，实现仿生结构材料的跨尺度一体化组装，为复杂仿生结构的集成组装提供了新思路，为研发面向重要领域应用的轻质高强吸能防护材料的设计具有指导意义。

中国科大博士后杨怀斌，博士研究生路怡星、岳鑫为共同第一作者，合肥微尺度物质科学国家研究中心管庆方副研究员和俞书宏院士为通讯作者。

（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）