

中国科大“智能科学家”助力全脂脂肪族手性碳中心精准构建

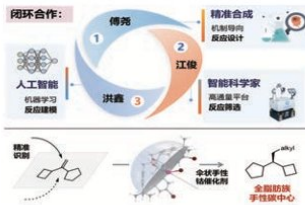
本报讯 中国科大傅尧教授团队、江俊教授团队联合浙江大学洪鑫教授团队，依托“智能科学家”自主实验室，在全脂脂肪族手性碳中心的精准构建方面取得突破。研究团队开发了一种高效和高选择性的钴催化体系，实现了脂肪族烯烃的不对称氢烷基化反应，突破了长期以来偶联反应对极性基团辅助手性控制的依赖，为手性碳骨架精准构建提供了新方法。相关研究成果发表在《美国化学会志》上。

手性碳-碳键的精准构建是合成化学的难题。尽管过渡金属、酶及有机小分子催化等方向取得了显著进展，但当底物取代基完全由脂肪族碳链构成时，由于缺少显著的电子和立体差异，底物对映选择性转化仍极具挑战。傅尧、陆嘉团队长期专注于碳-碳偶联反应，在本工作中提出了“伞状手性口袋”分子识别新模式，可精准区分底物中电子和空间结构相似的两个脂肪族取代基，实现了传统偶联反应与酶催化体系都难以达到的全脂脂肪族手性碳中心构筑。

在研究过程中，江俊团队的“智能科学家”平台发挥了关键作用。该平台可在短时间内完成数百组反应条件的高通量筛选，大幅提升了数据质量和研究效率。洪鑫团队则基于人工智能算法对实验与理论数据进行建模，从分子片段指纹和空间构型中提取关键描述符，建立了反应选择性的机器学习模型。

结合“智能科学家”平台与AI建模结果，研究团队发现了一类具伞状手性口袋的钴催化剂体系。该体系通过多重配位作用与空间限域效应协同提升了反应效率与选择性，实现了对结构高度相似的两个烷基基团（如环戊基/环丁基）的精准识别。本研究不仅揭示了弱相互作用调控手性识别的新原理，也为复杂脂肪族分子的立体可控合成提供了新策略。

研究团队表示，这一成果体现了以“智能科学家”为核心的精准智能化学研究范式在基础科学创新中的潜力。通过构建“设计-筛选-建模-推荐-验证-应用”的高效闭环体系，



“智能科学家”助力全脂脂肪族手性碳中心精准构建实现了从“人工实验广泛试错”向“数据与机制协同驱动”的跨越。未来，团队将进一步探索更多基于弱相互作用的精准合成反应，从而拓展该体系在药物分子、功能材料及碳资源高值化转化等方向的应用。

（精准智能化学全国重点实验室 化学与材料科学学院 科研部）

中国科大提出更精准且可解释的多模态癌症生存分析新方法

本报讯 中国科大苏州高等研究院、生物医学工程学院周少华教授团队，在人工智能领域知名学术期刊《IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence》上发表研究论文。这一突破性进展拓展了病理图像与基因组

数据的“语义鸿沟”，让癌症生存预测更精准且可解释，不仅能让更多癌症患者从精准治疗中获益，还可以避免过度治疗，助力医疗资源最优配置，为精准肿瘤诊治铺平道路。

癌症生存分析是精准医学的关键环节，它能帮助医生制定个性化治疗方案，但传统分析方法一直面临“病理图像和基因表达之间细粒度交互不足”的难题。过去的研究仅用基因表达数据（分子层面）或病理图像（细胞组织形态层面）单一模态预测生存，往往无法完整反映癌症的复杂机制。虽然部分方法曾尝试结合两种模态，但依然忽略了基因功能网络（生物通路、Pathway）与病理图像区域（图像块、Patch）之间的细粒度关联，导致预测效果受限。为解决这一问题，团队开发出了全新的“通路感知多模态Transformer（PAMT）”框架，通过三步实现多模态数据的细粒度交互和融合。第一步先让单模态数据内部“信息交流”，利用自注意力机制让生物通路间、病理图像块间充分传递信息。第二步通过全新的无

配对标签对比学习方法，让生物通路和病理图像的语义信息对齐，确保两者“说同一种语言”。第三步则遵循“基因型决定表型”的医学先验，以生物通路为指导，实现两种数据的精准融合，真正捕捉到癌症发展的核心关联。PAMT不仅预测效果突出，在膀胱癌、肺癌、乳腺癌、肝癌三种癌症数据集上，其生存预测性能均显著超越现有主流方法，并且展现出了优秀的“可解释性”。PAMT能够协助病理医生快速筛选影响生存的关键生物通路，定位全切片病理图像中受通路影响的区域，并挖掘与预后相关的病理图像特征。目前，团队已搭建公开网站可视化展示186条生物通路对WSI各区域的影响，为科研和临床提供直接助力。

论文第一作者为中国科大生物医学工程学院特聘副研究员顾悦，共同通讯作者为中国科大周少华教授、中国科学院计算技术研究所任非博士。

（苏州高等研究院 生物医学工程学院 科研部）

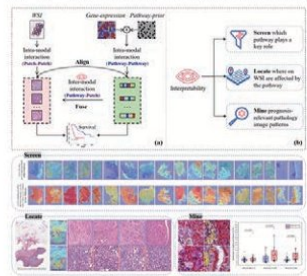


图:(a) PAMT的整体框架;(b) PAMT的可解释性

中国科大揭示岩石长期缓慢破裂新机制

本报讯 中国科大地球和空间科学学院张淮准研究员团队首次揭示了岩石在远低于破裂强度的低应力蠕变条件下，从微观缓慢破裂演化到宏观失稳的全新物理机制。这一发现为破解岩石“亚临界破裂”难题提供了精准的“力学解码器”，并为理解地壳成核、地壳应力演化等地质过程奠定了关键理论基础。相关研究成果11月13日发表在《物理评论快报》上，这是中国岩石力学领域率先在该刊发表聚焦岩石破裂物理机制的研究成果。

“亚临界破裂”是指岩石、冰、陶瓷等脆性材料在看似稳定的低应力环境中，经历漫长演化后突然破裂。这在岩石力学、地球物理学、航空航天材料等诸多领域是一个长期困扰学界的共性科学问题。针对岩石材料，传统理论认为其在低应力下的脆性蠕变主要由亚临界裂纹扩展控制，但该机理解释不了接近峰值强度的高应力环境，难以解释地壳中在极低应力下持续数百万年乃至更长时间的缓慢变形及破裂现象。

针对上述科学挑战，研究团队首先设计了恒定低荷教蠕变实验，模拟自然界中长期构造力的作用。实验采用脆性聚苯乙烯材料制备含预制闭合裂纹的试样，通过数字图像相关（DIC）技术精确测量裂纹周围的微应变演化，首次在缓慢滑动阶段直接观测到两个关键过程：一是裂纹界面在低于破裂强度的恒定应力水平下发生自相似性的持续滑移；二是此过程伴随着持续的剪应力松弛并向裂纹尖端方向转移，表现为裂纹膨胀区向初始压实区的逐步扩展，引发尖端局部应变的持续累积。

基于这一新机理，研究团队进一步开发了结合速率-状态摩擦与断裂力学的有限元模型，成功再现了岩石在脆性蠕变过程中从分布式损伤到应变局部化转变的这一普遍现象，并解释了一些大地震前兆数年的渐进性局部化演变过程。模拟结果表明，岩石中广泛存在的微裂纹在持续摩擦滑移的调控下，大多数会因应力松弛而逐渐衰减，而少数裂纹则会相互触发不断加速，最终形成宏观破裂。

微宏观断层带。基于上述发现，研究团队建立了从微观摩擦滑移到宏观失稳的统一物理框架，揭示了岩石“亚临界破裂”的本质是其内部永不停歇的微观摩擦主导的应力重分配与破裂的协同演化。

研究首次从实验与理论两方面完整揭示了岩石长期缓慢破裂的物理机制，成功破解了长期困扰岩石力学、材料力学、地球科学等领域的“亚临界破裂”难题，为岩石、冰、陶瓷等脆性结晶材料在任意受力条件下的长期变形与破裂提供了统一的解释框架，也为理解地震孕育、地壳应力演化及地下工程长期稳定性等领域提供了关键物理基础。

审稿人高度评价这项工作，认为其“为分布式损伤如何演变成局部的切变提供了宝贵见解，对理解地震成核的起始非常重要”“有助于拓宽期刊PRL的视野，促进地球物理学、材料科学和物理学之间的跨学科交流”。

论文第一作者是中国科大地球和空间科学学院博士蒋林柯，通讯作者是中国科大地球和空间科学学院张淮准研究员。

（地球和空间科学学院 科研部）

高海拔宇宙线观测揭示恒星级黑洞为宇宙极端粒子加速器

本报讯 近日，我国重大科技基础设施——高海拔宇宙线观测站（LHAASO，拉索）在银河系内多个黑洞X射线双星周边首次探测到能量高达百万亿电子伏特（ $\sim 10^{16}$ eV或100TeV）之上的超高能伽马射线辐射，包括SS 433、V4641 Sgr、GRS 1915+105、Cygnus X-1与MAXI J1820+070等5个天体，均为由恒星级质量黑洞与伴星构成的强引力系统。当恒星物质伴星物质时，能够以喷流的形式释放巨大能量，这种黑洞-喷流系统也被称为微类星体。拉索国际合作组这一研究成果11月16日发表在《国家科学评论》上，中国科大天文学系李剑伟任教授、杨善智教授、博士后于艳红为共同通讯作者。

拉索的观测显示，这些系统的伽马射线能谱延伸至数百TeV甚至接近PeV，表明黑洞-喷流系统是极端高效的粒子加速器。尤其值得注意的是，SS 433的辐射形态在100TeV之下与X射线波段观测到的形态吻合，而源于喷流与黑洞东西两侧的星际介质相互作用产生的瓣状结构加速的电子；而在100TeV之上，辐射形态产生了变化，在南北方向产生了延展，并与黑洞周边一团由原子氢组成的质量云团位置重合（图1），强烈暗示SS 433的超高能伽马射线起源于由该系统加速的PeV质子与物质的强相互作用。而拉索对SS 433的能谱测量也显示出电子辐射与质子辐射共存的迹象（图2）。

宇宙线是来自地外的高能带电粒子，主要

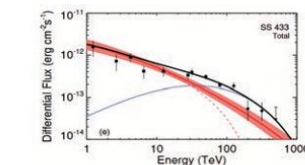


图2.拉索观测到的SS 433区域伽马射线能谱（黑色数据点）。红色虚线代表基于电子加速模型对能谱数据的最佳拟合值。红色虚线代表最佳拟合的误差范围。蓝色实线代表基于质子的辐射模型的理论预期能谱。黑色实线代表红色虚线与蓝色实线之和。

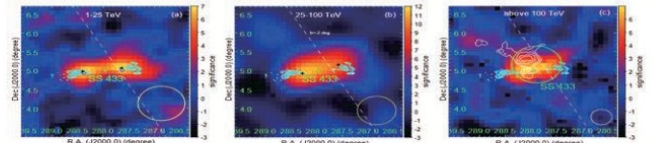


图1.拉索观测到的SS 433区域伽马射线能谱。左图：1-25TeV；中图：25-100TeV；右图：100TeV以上。图中青色十字代表黑洞的位置，青色的等高线为X射线辐射结构，产生于黑洞双吸流与星际介质的相互作用。右图中白色等高线代表与SS 433相距最近的原子云柱密度分布。

中国科大教授袁华、张格京研究组发现，鞭毛着生位置是决定推进型细菌“表面捕获”稳定性的关键因素，并揭示了鞭毛钩（连接鞭毛丝与细胞体的柔性接头）弯曲方向的差异如何影响细菌的表面驻留行为。相关研究成果日前发表于美国《国家科学院院刊》。

细菌在自然环境中频繁遇到固体表面，如管道内壁、医疗植入物或土壤颗粒等。当它们游动靠近这些物体的表面时，往往会“捕获”，在表面附近长时间盘绕运动。这一“表面捕获”现象对细菌的生态适应，尤其是生物膜的形成至关重要。以往研究大多以大肠杆菌为模型，认为这种现象主要由流体力学相互作用引起。然而，这些基于大肠杆菌建立的简化模型，虽然理论上适用于所有“推进式”，即由鞭毛推动前进的细菌，却无法解释为何其他形态相似的极性鞭毛细菌在表面停留的时间比大肠杆菌短得多，这表现出有物理模型中不存在被忽略的关键因素。

研究组首先排除潜在因素——鞭毛数量的影响。他们发现，即使只有一根鞭毛，大肠杆菌也能被表面稳定捕获。随后，研究组将焦点转向了不同菌株的另一显著差异——鞭毛的着生位置。他们通过基因编辑技术，构建了一种鞭毛着生位置不再局限于细胞极端的铜绿假单胞菌突变株。令人惊奇的是，当鞭毛生在细胞侧面而非极点的鞭毛钩产生时，细菌在表面停留的时间长了数十倍以上，其表面捕获行为变得与大肠杆菌非常相似。

为探究该现象背后的物理机制，研究组通过高分辨率的荧光成像技术，直接观测了细菌在表面附近的姿态变化，揭示了鞭毛弯曲力矩的关键作用。他们发现，当细菌“头朝下”撞向表面时，鞭毛钩会因受力而弯曲。对于鞭毛在极端的细菌，弯曲的鞭毛钩产生的力矩帮助细胞调整姿态，使其更容易通过热涨落从表面逃逸。而对于鞭毛在侧面的细菌，鞭毛钩的弯曲方向与极端鞭毛相反，其产生的力矩会抑制细胞体的姿态调整，使其稳定地被困在表面，难以逃脱。研究组的理论计算也定量证实了这一机制。

该研究不仅解决了长期以来理论模型与实验观测之间的矛盾，也为深入了解微生物生态、生物膜形成的初始阶段以及细菌感染过程提供了见解。此外，该研究为设计仿生微纳机器人和微生物介导的活性药物递送系统提供了新思路。

（转自《中国科学报》2025年11月12日 记者 王敏）

中国科大超材料研究团队创新性提出了一种电热晶格超材料，并首次通过单一结构平台，实现对电场和热场的协同与独立编程调控，破解了多物理场耦合调控的核心难题。相关研究成果日前发表于国际期刊《先进材料》。

在智能能源管理、高性能电子器件等众多高端技术领域，往往需要同时对电场和热场进行精确调控。然而，由于两种物理场本质上相互耦合，以及传统材料性能固定、结构设计静态化，实现二者的独立、协同调控一直面临巨大挑战。

针对这一瓶颈，由中国科大教授赵刚、何立群、叶安等组成的超材料研究团队从结构几何入手，独辟蹊径地提出了电热晶格超材料的设计新范式。研究团队采用模块化设计策略，将超材料构建为由大量相同晶格单元通过高导热、高导电“桥梁”连接而成的晶格网络。借助这一统一的拓扑框架，仅需调整晶格单元的空间位置与几何形态，即可实现电、热场的协同塑形，突破了传统双场超材料的静态设计局限与调控耦合难题。

“这类似于用乐高积木搭建复杂结构。”论文通讯作者赵刚解释，“通过精巧的几何设计，让连接‘桥’的截面远大于单元本身，确保了能量在传输时高效且不失真。最关键的是，在这个统一的‘骨架’上，我们无需改变材料本身，只需像下棋一样重新排布这些单元的位置和形态，就能命令电场和热场‘听指挥’，实现多种功能。”

研究团队基于这一创新架构在一个超材料器件上成功演示了电场与热场的多种功能。“这意味着，这种超材料能引导场线过某个区域实现‘隐身’，也能将场能量聚焦于一点实现聚焦，还能改变场的传播方向实现旋转。”赵刚说，研究团队还制备了心形、五角星等多种复杂形状的场调控器件，展现了其强大的按需定制能力。

赵刚表示，这项研究首次实现电、热耦合的可编程解耦调控，打破了“材料属性决定场调控能力”的传统认知，为复杂多物理场环境下的器件开发提供了核心技术支撑。

（转自《科技日报》2025年11月13日 记者 吴长伟）

新型超材料实现电场热场同时「听指挥」