《自然》：中国科大创制新型一维碳基共价金属

中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家研究中心单分子团队王兵、范其塘教授及合作者，通过分步表面合成，制备出仅由五元环和七元环构成的金属性碳纳米带，即新的“戊庚环型”碳纳米带，并证实这种由碳原子通过共价键连接而成的亚纳米宽度一维结构能够实现高效电子输运。10月28日，相关成果在线发表于《自然》。

金刚石与石墨同由碳原子组成，性质却截然不同，奥秘在于原子的连接方式。石墨烯由六元环组成蜂窝网络，换成五元环和七元环会怎样？1996年，理论学家预言，这种碳五七环结构可能像金属一样导电。碳原子通过共价键连接，却呈现金属电子性质，因而被称为“共价金属”。近三十年来，如何精准制备这种纳米带，并使其在亚纳米的宽度下保持金属性，始终有待实验解答。

合成的难点，是获得由成对五元环构成的分子链（聚戊搭烯）。原计划使用的二溴代戊搭烯单体活性过高，难以稳定制备，团队因此改变了起点分子单体。第一步，先连成链：选用较稳定的含八元碳环分子为单体，在银表面将它们连接成链。第二步，重排碳环：通过加热，将八元环转变为一对五元环，获得此前难以制备的聚戊搭烯链，打通合成路线的关键环节。第三步，侧向融合：继续给聚戊搭烯链升温，使相邻链像拉链一样侧向融合，在链间形成七元环，最终得到五七环碳纳米带。高分辨显微成像确认了碳环排列：两条链的相对取向不同，形成CPHN1和CPHN2两种结构。

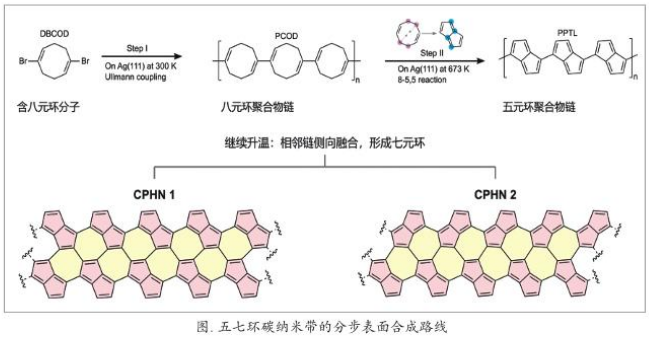


图. 五七环碳纳米带的分步表面合成路线

做出了预想的结构，下一步是检验电子能否顺畅通过。研究人员用扫描隧道显微镜针尖连接并提起纳米带一端，在针尖与银表面之间搭起一条纳米尺度的电流通路。在低温下测量得到CPHN1的电导最高约为0.9个电导量子，提拉长度增至约4纳米时仍基本不变。电导量子是衡量单个理想电子传输通道导电能力的基本尺度。测得的电导接近该尺度且随长度变化很小，表明电子在所测短距离内散射较少，呈现近弹道输运特征。CPHN1在零电压附近的电流–电压曲线近似线性；CPHN2的电导低约两个数量级，低电压电流明显受抑制。

团队还从电子的波动性中寻找金属性的答案。在纳米带与银表面间引入溴原子层，减弱衬底影响，测量电子波干涉形成的驻波图样，再通过准粒子干涉分析，还原电子能量与波长的关系。结合理论计算发现，CPHN1的能带穿过费米能级，呈金属性；CPHN2具有约0.22电子伏特的带隙，为窄带隙半导体，从能带结构上解释了两者的导电差异。

该工作建立了金属性五七环碳纳米带的合成路径，并在亚纳米尺度的碳骨架中实现了高效电子输运。这一成果将五七环碳结构的理论设想转化为可检验的实验体系，为理解碳原子的连接方式与材料金属性的关系、探索新效应，如Luttinger液体等一维关联电子态及其输运行为，提供了新的材料体系，也有望作为原子尺度导线和互连单元用于未来碳基芯片。（原载于央广网 2026年10月29日 记者 汪乔）

《自然》：中国科大构建结构引导的RNA基础模型，提升结构与功能预测能力

本报讯 11月5日凌晨，中国科学技术大学生物医学工程学院医学影像智能与机器人（MIRACLE）实验室周少华教授、熊鹏特任研究员，在《自然》上发表研究论文。研究团队在RNA基础模型研究上取得新进展，通过将二级结构中的碱基配对信息融入序列预训练，提高了模型在RNA结构预测与功能推断一系列下游任务中的性能。

RNA（ribonucleic acid，核糖核酸）是一种重要的生物大分子，存在于生物细胞以及部分病毒、类病毒中，广泛参与蛋白质合成、基因表达调控和RNA剪接等生命过程，其功能与序列和折叠结构密切相关。本研究旨在将结构知识融入大规模序列学习，同时保持模型在不同结构与功能任务中的适应性和泛化能力。研究团队提出了结构引导的RNA基础模型structRFM，首先利用多来源二级结构集成方法MUSES，整合不同二级结构预测方法的结果，降低单一预测器的偏差，构建了约2100万条经计算注释的序列–二级结构的配对数据。在此基础上，设计结构引导的掩码语言建模策略，通过碱基配对关系联合遮蔽相关位置，并动态平衡结构引导掩码与随机掩码，使模型在恢复被遮蔽核苷酸的过程中，同时学习序列上下文与结构依赖。预训练后的模型仅需输入序列，即可提取序列级、核苷酸级和核苷酸对级特征，用于多种结构与功能推断任务，并在多项任务中达到前沿水平。

实验显示，structRFM在零样本同源性分类中表现良好，并提高了二级结构预测性能；将其特征融入三级结构预测模型后，也改善了三维结构及其对应二级结构的预测结果。在功能推断方面，模型支持剪接位点预测、内部核糖体进入位点识别和非编码RNA分类。此外，模型在新发布的RNA家族上保持了较好的二级结构预测表现，并通过分段策略扩展至长非编码RNA分类。消融实验进一步验证了结构信息的引入及掩码策略对模型性能提升的作用，为算法设计提供了实验支持。

实验室已开放完整配对数据、模型权重和源代码，为研究结果的复现和相关模型的开发提供了可复用资源。

中国科大生物医学工程学院博士毕业生朱河勤为论文第一作者，周少华教授和熊鹏特任研究员为该文章共同通讯作者。（生物医学工程学院 苏州高等研究院 科研部）

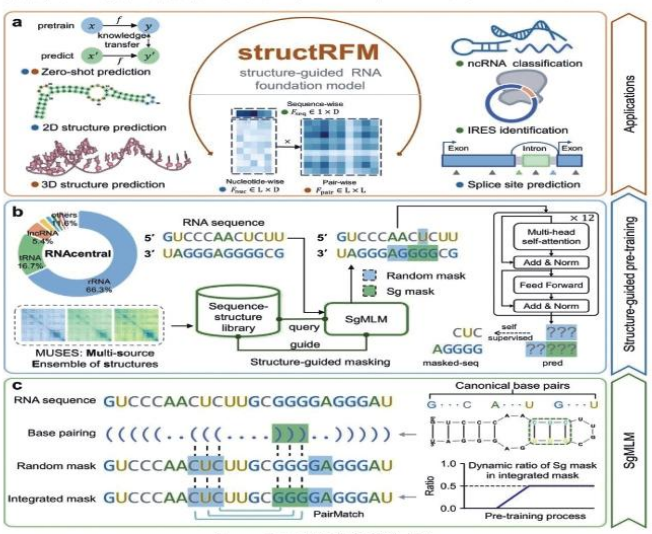


图. structRFM 结构引导预训练框架

中国科大在离子阱中实现自动量子纠错超越盈亏平衡点

本报讯 中国科学技术大学自旋磁共振实验室林毅恒教授与量子信息实验室邹长铃教授等合作，在量子纠错领域取得重要突破。研究团队利用单个离子的多能级编码逻辑比特，首次在离子阱平台实现多轮自动量子纠错，逻辑比特相干时间优于系统的最佳物理比特，超越了盈亏平衡点。相关成果于10月23日发表在《自然·物理》上。

量子纠错通过将量子信息编码到高维希尔伯特空间，利用冗余信息识别并抑制噪声，是构建实用量子计算机的关键技术。离子阱系统具有长相干时间、高保真量子门等优势，是实现容错量子计算最具潜力的体系之一。该体系的量子纠错方法通常依赖错误症状测量和实时反馈，这显著增加了实验复杂度。研究团队采用自动量子纠错方案，以耗散工程的方式替代测量与反馈，从而规避这一难题。通过引入一个初始处于低熵状态的辅助系统，当量子信息受到噪声干扰后，使用相干操控将错误引入的熵转移至辅助系统，将量子态恢复至编码空间；随后利用耗散过程将辅助系统重新制备到低熵状态，为下一轮纠错做好准备。通过反复执行这一循环，便可持续抑制噪声对量子信息的影响。

研究团队在两个$^{40}Ca^{+}$离子系统中实现了这一方案。其中一个离子的四个内部能级用于编码逻辑比特，另一个离子用于辅助，两个离子共有的振动模式则充当熵转移的载体。通过对辅助离子的操控，即可实现对共有振动模式的初始化与重置。针对磁场波动引起的S_Z相位翻转噪声，研究团队设计了四能级量子纠错码，将逻辑比特编码在单个$^{40}Ca^{+}$离子$3^2D_{3/2}$流形的四个寒曼能级上。

在自动纠错过程中，研究团队施加多频激光操控，将处于错误空间的量子态恢复至逻辑空间，同时激发共有振动模式，原本处于逻辑态的分量则不受影响。通过这种方式，错误引入的熵便被转移至振动模式。随后，通过协同冷却即可清除这些熵：由于两个离子共享振动，仅需对辅助离子进行冷却即可带走共有振动中的多余能量，使其重返低熵基态。这种相干转移与冷却重置的交替进行，构成了可连续重复执行的自动纠错循环。

衡量量子纠错是否产生实际收益的关键，在于纠错后的逻辑比特能否比系统中性能最好的物理比特更长时间地保存量子信息，这一指标被称为量子纠错的“盈亏平衡点”。研究团队系统比较了最佳物理比特、未纠错逻辑比特以及多轮自动纠错逻辑比特的相干时间表现。实验结果表明，在实验室环境噪声条件下，重复自动纠错后的逻辑比特相干时间约为42毫秒，优于最佳物理比特的29.4毫秒和未纠错逻辑比特的24.7毫秒，寿命比约为1.45。考虑到实验室环境噪声的波动，研究团队进一步施加可控的低频磁场噪声，检验纠错方案的保护效果。在这一情形下，最佳物理比特的相干时间缩短至0.98毫秒，未纠错逻辑比特为0.83毫秒，而自动纠错后的逻辑比特达到11.7毫秒，是最佳物理比特的11.9倍。

该工作将单个离子的多能级编码与自动纠错相结合，为减少量子纠错的编码资源及控制开销提供了新思路。目前方案主要针对单个逻辑比特的相位错误，未来仍需进一步探索多个逻辑比特之间的量子操作及其纠错保护。这一成果为发展更加稳定的量子存储单元和离子阱容错量子计算提供了实验基础。

中国科学技术大学研究生李易、梅清远和揭庆暄为本文共同第一作者。（物理学院 科研部）

『「九章四号」光量子计算原型机』项目获2026年世界互联网大会领先科技奖

11月2日下午，2026年世界互联网大会领先科技奖颁奖典礼在浙江乌镇举办，来自全球的20个获奖项目发布。中国科学技术大学、合肥国家实验室、济南量子技术研究院、九章（济南）量子科技有限公司申报的“‘九章四号’光量子计算原型机”项目获奖。

量子计算是下一代信息革命的重要方向，从量子计算优越性实现到可扩展升级，每一步突破都在重塑计算能力的边界。中国科学技术大学九章团队成员、九章量子首席技术官刘华亮介绍，2020年，中国科大团队研制的“九章”量子计算原型机首次基于光子实现量子计算优越性这一里程碑目标。此后，九章系列不断升级迭代、探索光量子计算的能力边界。

刘华亮介绍，最新研制的“九章四号”采用创新性的时空混合编码架构，同时做到了物理成本的大幅缩减和系统规模的跨越式提升，实现了量子计算优越性从实现到可扩展的突破。基于高斯玻色采样模型，其求解速度按照最优经典算法估算，比最强超级计算机快约10的54次方倍。

“这种量子与经典的动态博弈正是量子信息科技进步的重要动力。”他说，面向未来，团队将继续攻坚大规模量子态制备和量子纠错等工程难题，向通用容错量子计算稳步迈进。

（原载于光明网2026年11月2日 记者 孙满桃 范子川）

中国科大实现AI引导的自组装单分子智能筛选与钙钛矿界面稳定调控

本报讯 近日，中国科大团队联合南方科技大学、香港城市大学、中国科学院宁波材料所团队，在钙钛矿太阳能电池界面材料智能设计领域取得重要进展。研究团队建立了融合人工智能（AI）、高通量理论计算与专家知识的自组装单分子层（SAM）智能筛选框架，创新性构建8描述符综合排序体系，从庞大化学空间中系统发现兼具合成可行性与界面稳定性的界面材料。相关成果于10月29日发表在《自然·合成》上。

通过调整SAM分子结构，研究人员能够改变界面能级、促进空穴提取，并减少缺陷引起的电荷损失。但分子设计需要同时满足多种要求：能级要匹配，界面相互作用要合适，合成路线要可行，还要适应后续的溶液加工。某一项计算指标出色，并不意味着这个分子就能成为好用的器件材料。传统试错式开发周期长，难以兼顾多个相互制约的指标。研究团队因此将合成可行性纳入筛选过程，使计算设计从一开始就与实验条件相衔接。团队从PubChem数据库收录的吡唑衍生物中提取出308个功能片段，这些片段对应超过9万种潜在组合结构。结合合成路线、溶解性和界面功能等化学知识，研究人员先选出24个片段，再通过模块化组装构建300个候选分子。随后，图神经网络逆合成模型从目标分子出发，推演可能的制备路径，评估目标分子能否利用可获得的原料合成；高通量密度泛函理论计算则用于评价候选分子的电子结构。经能级初筛获得124个候选分子后，团队进一步开展多指标分析。最终，研究团队将合成可行性、分子能级、空穴重组能、芳香性和杂原子含量等8项指标纳入综合评分，确定优先开展实验的候选分子。AI、理论计算与化学知识由此共同参与候选筛选，将实验资源集中到更具潜力的分子结构上。这一设计思路的重要性也得到了对照分析的支持：去掉合成可行性约束后，一些计算评分更高的候选会进入榜单，却因所需前体难以获得而难以完成实验制备。

基于该框架，团队筛选并合成了3个高排名候选分子，其器件性能排序与8描述符综合评分排序高度一致，验证了评分体系的有效性。综合排名最高的分子实现27.2%的光电转换效率。机制研究表明，多功能甲硫基侧链可与钙钛矿界面未配位Pb^{2+}形成Pb–S相互作用，增强界面结合，协同实现缺陷钝化、界面电场调控与载流子提取。界面稳定性显著改善，在65℃、连续光照和最大功率点跟踪条件下，器件运行2000小时后仍保持约95%的初始效率。

研究表明，高性能SAM设计需综合平衡电子性质、界面功能与合成可行性。描述符综合排序体系的核心价值在于：将逆合成预测纳入筛选流程，在设计早期识别更具合成潜力的候选分子子，缩短从“理论候选”到“可实验材料”的距离；多描述符均衡加权避免了单一指标最大化带来的偏倚。该框架采用模块化设计，可拓展至其他界面材料体系，为高效稳定光电材料的设计与发现提供新思路。

中国科学技术大学蔡逢春、南方科技大学曲歌平、中国科学技术大学张百成和南方科技大学张乐天为论文共同第一作者。中国科学技术大学徐集贤教授、江俊教授、陈林江教授，南方科技大学徐宗祥教授以及香港城市大学任广禹教授为论文通讯作者。

（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）