

中国科大在超冷化学量子模拟领域取得重要进展

本报讯 潘建伟教授及其同事赵博、陈宇翱等在超冷分子和超冷化学量子模拟研究领域取得重要进展，他们首次在实验上直接观测到超低温下弱束缚分子与自由原子间发生的态的化学反应，实现了可控态反应动力学的探测，从而向基于超冷分子的超冷量子化学的研究迈进了一步。7月4日，这一重要研究成果以研究长文的形式发表在国际权威学术期刊《自然·物理学》上。

量子计算和模拟具有强大的并行计算和模拟能力，不仅为经典计算机无法解决的大规模计算难题提供有效解决方案，也可有效揭示复杂物理系统的规律，为新能源开发、新材料设计等提供指导。对化学反应和材料进行建模是量子计算最先可能的应用之一。

可控化学反应动力学的一个重要方

向是对弱束缚分子化学反应的研究，近年来，随着超冷原子分子技术的发展，超低温的弱束缚分子可以从接近绝对零度的原子气中被制备出来，从而使得对其化学反应性质的实验研究成为可能。

在接近绝对零度的温度下，分子的德布罗意波长远大于相互作用的尺寸，因此化学反应完全由量子力学所主导，诸如量子散射、量子统计等量子效应将显著的改变化学反应的行为。超冷化学的研究为探索化学反应的机理和动力学提供了前所未有的量子态分辨率、能量分辨率和可调控性。近年来，超冷化学反应的研究取得了系列重要实验进展。然而，迄今为止，超低温下态态化学反应尚未被实验实现。

在该项研究成果中，中国科学技术大学的研究团队首次成功观测到了超低温下弱束缚的分子和原子发生的可控态

态的化学反应。在实验中，他们巧妙的利用弱束缚分子的束缚能可以调节的特性，精确控制反应中释放的能量，实现了对反应产物的囚禁。在此基础上，利用精密的射频场操作技术，成功探测了反应的分子产物和原子产物，并进一步研究了态态反应动力学。实验结果证实了弱束缚分子之间化学反应通道的选择性，验证了W.Stwalley约40年前的预言。

该实验的重要意义在于，这是第一次在超冷化学反应中观测到态的化学反应，从而将化学反应动力学的实验研究推进到量子水平。这一工作得到了《自然·物理》审稿人的高度评价：“探测超冷化学反应的产物是目前该领域的重大研究目标，本工作向这个目标迈出了第一步”；“该工作是超冷化学领域的一个重要的里程碑，将引起化学和物理研究者的广泛兴趣”。(综合)

首个光解水制氢储氢一体化体系设计： 再启“氢能经济时代”

本报讯 近日，合肥微尺度物质科学国家实验室罗毅教授领导的研究小组成员江俊教授，与微尺度物质科学国家实验室赵瑾教授合作，利用第一性原理计算，提出了首个光解水制氢储氢一体化的材料体系设计，该方案具有低成本、通用性、安全储氢的优点。相关成果发表在《自然·通讯》上。

江俊课题组长期深耕于光催化体系设计与模拟领域，聚焦于电子运动这一关键主线，通过结构设计精准调控材料体系中的电子被激发后演化行为，提出了一系列在实验中证明行之有效的光催化体系设计。而在这次的三明治结构体系中，碳氮材料夹在两

层官能团修饰的石墨烯中。第一性原理计算表明，这一体系可以同时吸收紫外光和可见光，利用太阳光能产生激子，光生激子迅速分离形成高能电子和空穴并分别迁移中间的碳氮材料和外层的石墨烯材料上。而吸附在石墨烯基材料活性位点上的水分子在光生空穴的帮助下，发生裂解，产生质子。这些产生的质子受碳氮材料上内建静电场驱动，可穿透石墨烯材料，运动到内部的二维碳氮材料上，并且遇到电子后反应产生氢气。由于石墨烯唯一放行的仅仅是氢原子（质子），而光解水产生的氢气不能穿透石墨烯材料，导致光解水产生的氢气

分子将被安全地保留在三明治复合体系内；同时 O₂、OH 等体系也无法进入复合体系，抑制了逆反应的发生，实现了高储氢率下的安全储氢。

这一研究体系以较低的成本，巧妙地抑制了光解水制氢的逆反应发生，实现了氢气的有效提纯，是首个安全制氢与储氢一体化的设计。文中所报道的三明治复合体系将不仅仅局限于石墨烯和碳氮材料，其他经官能团修饰的sp²杂化碳材料和光催化剂也可以用于这一复合体系中。这将为实现太阳能裂解水转换为氢能，以及氢能的大规模应用解决最困难的氢气分离和安全存储运输两个瓶颈问题，为再次启动“氢能经济时代”打开了大门。

该论文第一作者为化学学院博士生杨丽，李喜玉和张国桢博士为并列一作，江俊为通讯作者。(综合)

中国科大与北京大学合作发现： “线粒体炫”调控神经元突触水平的长时程记忆

本报讯 为什么有的记忆能铭刻一生而有的只能存在几分钟？短期的记忆如何转变为长期的记忆？近日，中国科学技术大学生命科学学院毕国强课题组与北京大学分子医学研究所程和平课题组合作，发现神经元树突“线粒体炫信号”在神经突触传递短时程记忆向长时程记忆的转化中可能发挥着关键作用，相关成果于6月26日在Nature Communications在线发表。

线粒体炫是程和平课题组于2008年首次报道的单个线粒体的量子化信号，它含有线粒体活性氧激增、基质瞬时碱化、膜电位瞬时下降等多重变化，时程为数十秒，是新形式的线粒体基本功能事件。线粒体炫广泛存在于多个物种及多种细胞，只要有功能性线粒体就存在线粒体炫信号。线粒体炫的发生，既是一个耗能的过程，又存在对细胞产生氧化应激损伤的风险。多年来，程和平-王显花课题组一直在苦苦探寻线粒

体炫为什么普遍存在的生物学解释。突触可塑性是学习记忆的神经基础。在不同类型的神经活动的调控下，短时程的突触可塑性只能持续几秒到几分钟，而长时程的突触可塑性可维持数十分钟到数小时甚至更长。联合课题组猜测，线粒体炫可能参与突触可塑性的某种信号转导过程。为此，研究者选取学习记忆的经典细胞模型——大鼠的海马神经元——为研究对象，发展了长时程线粒体炫连续成像以及双光子飞秒脉冲激活线粒体炫等新技术。他们惊喜发现，化学及电刺激方法诱发突触的长时程增强总是伴有突触附近一个或多个线粒体炫信号；人为激活线粒体炫信号，则能够稳定其附近的突触增大，从而产生从短时程增强向长时程增强的转化；有意思的是线粒体炫对突触可塑性的有效调控有着确定的时间窗口（刺激后30分钟内有效）和空间范围（2微米以内有效），显示了线粒体炫调控突触可塑性机制的特异性与精确性。进一步研究发现，线粒体炫的发生依赖于神经活动钙信号及钙依赖性激酶，其所释放的活性氧信号可能是促进突触长时程增强的信号分子。

该工作首次报道了在突触可塑性过程中，线粒体炫作为数字化的生物信号在线粒体接收、整合、传递信号中的重要作用，其科学价值在于首次揭示树突线粒体和突触之间的双向信号传导机制。同时，为理解线粒体炫的生物学意义提供了一个范例，即局部、瞬时的活性氧爆发为“烧制”突触水平的长时程记忆，提供了一种可能的分子与亚细胞机制。

本文共同第一作者为合肥微尺度物质科学国家实验室博士生付忠孝和中科大生命科学学院博士生谈笑，通讯作者为王显花副研究员（北京大学）、程和平教授（北京大学）和毕国强教授（中国科学技术大学）。(生命学院 科研部)

质子交换膜燃料电池阴极催化剂 研制取得重要进展

本报讯 近日，合肥微尺度物质科学国家实验室和化学与材料科学学院曾杰教授课题组与美国Akron大学彭振猛教授、上海应用物理研究所司锐教授合作，在质子交换膜燃料电池阴极催化剂研制方面取得重要进展。研究人员基于集团效应设计出一种铑原子掺杂的铂超细纳米线催化剂，其在燃料电池阴极氧还原反应中表现出高活性和高稳定性。该成果发表在《美国化学会志》杂志上，论文的共同第一作者是博士后黄宏文和博士研究生李衍。

质子交换膜燃料电池（PEMFCs）被认为是在运输工具和移动设备的高效电力输送中具有广阔前景的清洁能源转换技术。然而，其阴极氧还原反应由于动力学缓慢需要大量贵金属铂

作为催化剂，增加了相关部件的制造成本，从而限制了该技术的商业化。提高铂催化剂在氧还原反应中的质量活性可有效减少铂的用量，从而实现成本的降低。提升催化剂中铂利用率的策略层出不穷，许多已报道的铂基催化剂拥有卓越的质量活性，但是其中绝大部分催化剂的稳定性并不可观。这些铂基催化剂稳定性不足主要归结于高质量活性所依赖的结构在热力学不能够稳定存在，因此不能兼具高质量活性和优良的稳定性。

面对这一挑战，研究人员在通过

调节铂基催化剂的维度来改变对称性和与碳负载的接触面积的同时，引入铑原子增强其稳定性。铑原子掺杂铂超细纳米线的直径仅有1.3纳米，其铂原子利用率高达48.6%。碳负载的铑原子掺杂铂超细纳米线的质量活性和比活性分别达到了商用铂碳催化剂的7.8倍和5.4倍，同时该催化剂在氧气气氛下循环使用10000次后，只有9.2%的质量活性性能损失，而与之相对的商用铂碳催化剂在氧气气氛下循环使用10000次后，质量活性性能损失达到72.3%。(综合)

我校顺利通过质量管理体系 第一次监督审核和扩大范围审核

本报讯 6月26日至30日，中国新时代认证中心审核组对我校质量管理体系进行了第一次监督审核和扩大范围审核。

审核期间，审核组召开了首次会议，与学校主管机关代表进行了沟通，开展了领导层、部门和项目组的现场审核。我校质量管理体系最高管理者包信和校长、管理者代表朱长飞副校长以及相关部门和项目组负责人、技术骨干和质量管理人员参加了审核。

6月30日，审核组召开了末次会议，宣布审核结论。审核组认为学校领导高度重视质量管理体系建设工作，体系基本符合相关标准要求，运行总体有效。我校质量管理体系具有实现质量目标和自我完善的能力，资源配置能满足当前研制任务的需要；覆盖的产品的研制和服务过程受控，产品实物质量满足用户和法律法规的要求，能够按用户需求提供及时服务，用户对产品质量和售后服务等表示满意。待学校完成不符合项整改，经审核组书面验证符合要求后，审核组将推荐学校更新注册资格。包信和校长代表学校向审核组对我校质量管理体系提出的宝贵意见和建议表示衷心的感谢，对体系覆盖的部门、项目组的工作表示充分的肯定。（质量办公室）

11项成果获院教育教学成果奖

本报讯 近日，中国科学院公布了2016年中国科学院教育教学成果奖获奖名单，我校或我校为第一完成单位的“高性能计算创新人才培养的探索与实践”、“以核心能力为导向的研究生分类培养模式的探索与实践”、“科教结合英才班——物理创新研究型人才培养模式探索和实践”等3项教学成果荣获2016年中国科学院教育教学成果奖一等奖，“研究生科研能力培养物理实验教学体系建设与实践”、“研究型大学研究生英语学术论文写作课程体系建设”等8项教学成果荣获二等奖。（教务处 研究生院）

庄小威校友做客“大师论坛”

本报讯 7月1日至7月3日，国际著名物理学家、化学家、生物物理学家庄小威教授应邀回母校访问。常务副校长潘建伟院士会见了庄小威教授，认真听取了她对我校在人才引进和学科发展等方面的建议。

7月3日下午，庄小威教授在生命科学学院礼堂作题为“揭示生命中不可见的奥秘——利用超分辨率成像在纳米尺度上对生物系统的精细解析”的报告，“大师论坛”报告会由潘建伟院士主持，整个会场可谓“站”无虚席。

庄小威教授以人体到细胞内的分子的巨大空间尺度跨越为切入点，深入浅出地向听众阐述了细胞内的各个分子的间隔因为过小而显得“拥挤”，并结合光的波动性，解释了这些过于“拥挤”的分子在显微成像过程中的成像光斑相互交叠从而不能被清晰地分辨彼此的现象，即阿贝光学衍射极限。她创造性地采用分时、逐点地对细胞内“拥挤”的各个分子进行成像，并加以定位分析，最后把各个分子的定位点重构在同一张图像上，进而得到超分辨率的生物图像，她称之为随机光学重建显微技术。随后介绍了她的课题组利用该技术在细菌、细胞、组织切片上等各级生物系统的各项工作，重点介绍了神经细胞轴突内肌动蛋白骨架出人意料的环状周期结构。最后还介绍了她最近发表的关于细胞定量转录组相关工作的文章。

演讲结束后，庄小威耐心地回答了听众所提的问题。
(国际合作与交流部 生命科学学院 工程科学学院)

张益唐教授做客“大师论坛”

本报讯 6月27日至6月30日，著名数学家、加州大学圣芭芭拉分校数学系张益唐教授应邀来校访问并作“大师论坛”报告，报告会由陈初升副校长主持。

在报告中，张益唐教授由数学（线性代数课程）中常用的Cauchy-Schwartz公式出发，通过选取最优的中间函数，给出Riemann zeta函数单零点下界的估计；他讲授了如何将孪生素数猜想归结为一个和式的发散性质。当此和式对系数进行加权后，他再说明如何选取最优的系数，来给出素数间有界距离的最新成果，即存在无穷多差小于246的素数对。通过这些例子，他阐明解析数论“筛法”中的很多问题最终均归结为寻求最优的系数、参数或者函数这一中心思想。

访问期间，张益唐教授和数学学院师生进行了座谈。
(国际合作与交流部 数学科学学院)

Hans-Joachim Freund教授 做客“大师论坛”

本报讯 6月26日至30日，德国科学院院士、德国马普学会弗里茨-哈伯研究所所长和化学物理系主任Hans-Joachim Freund教授率弗里茨-哈伯研究所化学物理系研究团队一行访问我校。陈初升副校长会见了Freund教授并授予Freund教授“中国科学技术大学爱因斯坦讲席教授”聘书。当天下午Freund教授做“大师论坛”学术报告。

Freund教授系统介绍了他的研究团队利用模型体系在原子层次研究并理解多相催化作用机制取得的引领性研究成果，并展望了该研究领域的发展趋势。
(国际合作与交流部 化学与材料科学学院)