

在揭示人类疱疹病毒的基因组包装机制方面

中国科大取得重大突破

本报讯 5月30日,中国科大合肥微尺度物质科学国家研究中心、生命科学学院刘云涛博士和毕国强教授等科研人员利用冷冻电镜首次解析了人类疱疹病毒基因组包装的关键机制以及病毒的DNA基因组结构,有助于预防和控制疱疹病毒引发的多种疾病,并可望改造疱疹病毒用于靶向治疗,相关研究成果发表于《自然》杂志。

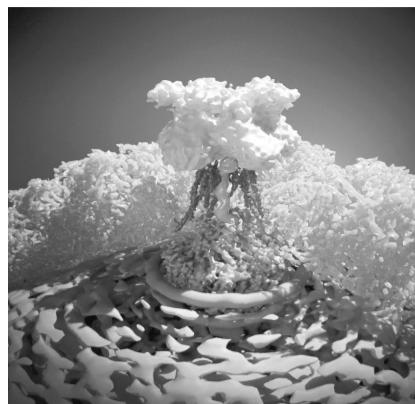
疱疹病毒是一类在自然界广泛存在的病毒,在感染人体后能够引发多种疾病,包括带状疱疹、出生缺陷、多种免疫系统疾病以及癌症。疱疹病毒包括囊膜、中间体蛋白层、衣壳和基因组四层结构,其中衣壳通常被视为一个正20面体,其上有一个独特的DNA通道,是病毒基因组进出的地方。

利用冷冻电镜解析生物大分子的原子分辨率三维结构已成常态,然而对于疱疹病毒基因组结构以及包装基因组的分子机器(即

DNA通道)的结构解析仍旧需要克服诸多困难。为了攻克这一难题,研究人员建立了一套基于连续局部分类和对称性释放的重构方法,有效地从病毒的冷冻电镜照片中重建出DNA通道的原子分辨率结构和大部分基因组的三维结构,发现病毒基因组具有左手超螺旋的缠绕方式和一个无序核心。

该研究展示了疱症病毒完整的非对称结构,获得了第一个真核生物病毒的DNA通道原子模型,也是第一次探测到DNA在通道里的扭曲状态。审稿人评论说,“作者采用最前沿的局部分类方法对疱疹病毒结构的完美解析,堪称高分辨冷冻电镜三维重建的匠心之力。”

这是中国科大合肥微尺度国家研究中心集成影像中心的又一里程碑式研究成果。集成影像中心是合肥微尺度物质科学国家研究中心与生命科学学院为推进交叉学科发展而



图为人类I型单纯疱疹病毒(HSV-1)DNA通道蛋白的原子分辨率三维结构
(作者 王国燕 马燕兵)

建设的创新研究与公共技术平台。
(合肥微尺度物质科学国家研究中心
生命科学学院 科研部 新闻中心)

中国科大在世界上首次观测到宇称时间对称

本报讯 5月31日,中国科大杜江峰院士领导的中科院微观磁共振重点实验室研究团队在世界上首次观察到宇称时间对称,该观测方法及其过程突破了传统量子体系中对量子系统的调控方法,加深了量子系统相互作用的理解,有助于人们更好认识微观世界的奇妙性质。相关成果刊登在国际权威期刊《科学》上。

实现对量子系统的调控是人类认识并利用微观世界规律的必然诉求,也是诸多前沿科学领域的核心要素。自旋作为一种重要的量子调控研究体系,在世界各国的量子计划中均被列为重点研究对象。杜江峰研究组长期在固态自旋量子调控及应用方面进行研究,系统性提出了固态自旋量子调控实验方法新理念,并立足国内自主研制了一系列国际领先的自旋调控实验装备,在自制装备上系统性地发展了单自旋量子调控技术,把微

观磁共振手段推广应用于物理、生物、化学等前沿科研中。本文是他们继实现世界最高精度的单自旋量子操控之后,将目标聚焦于如何在单自旋体系中实现非厄米哈密顿量的操控,以期实现新奇的物理学现象观测。

众所周知,量子体系的状态演化由哈密顿量确定并服从薛定谔方程。在传统量子力学框架中,实的能量本征值由哈密顿量满足厄米性所保障。然而,Bender于1998年提出一类满足宇称时间对称性的非厄米哈密顿量也可保证物理能量本征值为实数,可以描述包括开放系统在内更普遍的对象,从而拓展了量子力学的范畴。

杜江峰研究组提出了一种新理论方案,通过引入一个辅助比特在量子系统中研究由非厄米哈密顿量所支配的演化规律。该方法对非厄米哈密顿量本身没有任何限制,包括任何维度及含时演化,均只需要消耗一个辅

助比特的代价来实现。基于此方案,研究组将金刚石中的一个氮-空位缺陷中的电子自旋用作系统比特,一个核自旋作为辅助比特,实现了宇称时间对称哈密顿量,并观测到宇称时间对称性破缺现象。实验结果首次展示了单自旋量子态在宇称时间对称哈密顿量支配下的演化。通过调节哈密顿量的参数,可以清晰地观测到从对称性未破缺到对称性破缺的相变过程。实验结果验证了新方案的可行性,为进一步研究非厄米哈密顿量相关的新兴物理性质提供了坚实的基础。

该工作使得人们能够用一种更普遍的方式实现量子调控,从而开启了实验研究非厄米量子力学的新篇章。

博士研究生伍阳和硕士研究生刘文权为该文并列第一作者,杜江峰院士和荣星研究员为论文的共同通讯作者。

(范琼)

我校在高曲率碳负载铂单原子高效析氢方面研究取得进展

本报讯 近日,中国科大国家同步辐射实验室宋礼教授和合肥微尺度物质科学国家研究中心江俊教授合作,在低铂(Pt)负载催化剂设计及其电化学析氢性能研究方面取得了重要进展,揭示了局域电场效应对HER反应动力学过程的影响。相关成果发表在国际知名杂志《自然·能源》上。

电化学析氢(HER)作为水裂解过程的阴极反应是获得高纯度氢气并实现可持续分布式存储的重要途径。如何设计制备高效的催化剂驱动HER反应是推进此方法实际应用所面临的主要挑战。针对商业化Pt/C催化剂成本高难以规模化应用的劣势,研究人员开发了许多低成本过渡金属化合物作为替代催化剂并取得了一些成果。另外,随着近年来单原子催化剂制备和表征技术的发展,从降低金属负载量最大化

原子利用率角度出发,利用高本征活性的Pt设计制备催化剂也成为了可能。

单原子催化剂金属活性位点通常会均匀的分布在负载载体上。基于此,中科大宋礼教授课题组在前期纳米金刚石的工作基础上,与江俊教授及其他合作者通过精准合成结合理论设计,成功获得了高曲率 quasi-0D 碳纳米洋葱(OLC)负载 Pt 单原子催化剂。该工作提出了一种通过调控纳米碳载体结构增强单原子位点活性的新策略,也提供了一种基于同步辐射精细结构解析和理论计算的有效表征途径。

论文通讯作者是宋礼教授和江俊教授,共同第一作者为刘道彬博士和李喜玉博士。

(国家同步辐射实验室 合肥微尺度物质科学国家研究中心)

“无膜细胞器与细胞动力学”教育部重点实验室建设计划通过论证

本报讯 5月29日上午,教育部科技司组织专家在中国科大生命科学学院对“无膜细胞器与细胞动力学”教育部重点实验室的建设计划进行了可行性论证。中科院生物化学与细胞生物学研究所李林院士、上海交通大学陈国强院士、武汉大学舒红兵院士、清华大学陈晔光院士、中科院生物物理研究所许瑞明研究员、北京大学张传茂教授、中科院生物化学与细胞生物学研究所李党生研究员作为论证专家出席会议。教育部科技司基础处副处长李人杰、中科院前沿科学与教育局处长沈毅、安徽省教育厅副处长汪峰涛,中国科大校长包信和、副校长罗喜胜,学校科

研部、生命科学与医学部、生命学院等部门负责人及实验室科研骨干代表参加会议。

包信和代表学校致辞,感谢教育部、中科院和与会专家长期以来的支持。他充分肯定了无膜细胞器与细胞动力学重点实验室的科研定位与建设意义,指出学校已开始整合相关技术平台力量支持无膜细胞器与细胞动力学学科发展。希望实验室以颠覆性技术创新为突破口,凝聚研究创新能力攻关国际性难题,敢为人先、勇于创新,努力实现关键技术与理论的突破。

实验室主任姚雪彪教授汇报了实验室建设计划,介绍了新兴交叉学科细胞动力学诞

本报讯 最近,中国科大微尺度物质科学国家研究中心江俊教授,与罗毅教授和美国加州大学尔湾分校Shaul Mukamel教授合作,通过利用人工智能学习中的神经网络技术,模拟了蛋白质肽键结构与性质之间的构效关系,将计算量一下降低了上万倍。最后他们成功地预测了肽键紫外光谱,还用随机森林的办法揭示了具有化学内涵的结构描述子和构效关系。人工智能与量子化学理论计算的结合,为预测蛋白质的光学特性提供了一种高效的工具。相关成果发表在《美国科学院院报》。

蛋白质是生命的基石,生物的功能依赖于既稳定而又灵活可变的蛋白质结构。蛋白质的光谱响应信号,尤其是紫外光谱,可以称之为蛋白质骨架的“指纹”。这个“光学指纹”,经过理论模拟的解读,可以揭示出精确的蛋白质结构,为生命科学和医学诊断提供极其重要的信息。

然而,蛋白质的结构极其复杂多变,需要做大量的高精度的量子化学理论计算。由于计算量太大,即使是最厉害的超级计算机轻易也“吃不消”。所以蛋白质的光谱的理论解读是一个长期的困难与挑战,限制了光谱的准确分析和蛋白质结构的发现。

怎么样在光谱理论模拟中避免太昂贵的量子化学计算,解读蛋白质骨架的“光学指纹”,是一个重要的科学课题。而近年来,人工智能技术被广泛的应用到各个领域,用于大幅度降低复杂体系的计算量。

江俊课题组近些年致力于发展机器学习技术在量化领域的应用,努力探究使其成为解决量化问题的一种重要工具。在本工作中,研究人员首先在300K温度下通过分子动力学模拟以及量子化学计算,得到了五万组不同构型的肽键模型分子。

本项工作确立了机器学习模拟蛋白质肽键骨架紫外吸收光谱的可行性和优势,蛋白质的“光学指纹”解读也将变得更加轻易和有效。

该论文第一作者为博士生叶盛与博士后胡伟、李鑫,江俊与Shaul Mukamel为共同通讯作者。
(合肥微尺度物质科学国家研究中心)

生的历史背景、国际发展趋势、科大团队在关键共性技术领域已经开展的系列工作、重点实验室下一阶段科研目标与研究方向、实验室运行与管理等。重点实验室学术骨干臧建业教授、光寿红教授、王雪娟研究员、刘行副教授做了学术报告。专家组现场考察了实验室部分设施与运行机制。

经过质询和讨论,专家组认为无膜细胞器与细胞动力学教育部重点实验室建设任务目标明确、研究方向设置科学合理、预期建设目标切实可行、指标可考核,具备了建设教育部重点实验室的条件和要求,一致同意通过建设计划论证。

罗喜胜代表依托单位作总结发言。

根据《教育部重点实验室建设与运行管理办法》规定,教育部重点实验室的建设计划通过专家论证后,将进入建设实施期。

(无膜细胞器与细胞动力学教育部重点实验室 科研部)

中国科大人工智能预测蛋白质『光学指纹』