

科研进展*

提出研究光晶格中原子共振散射的新方法

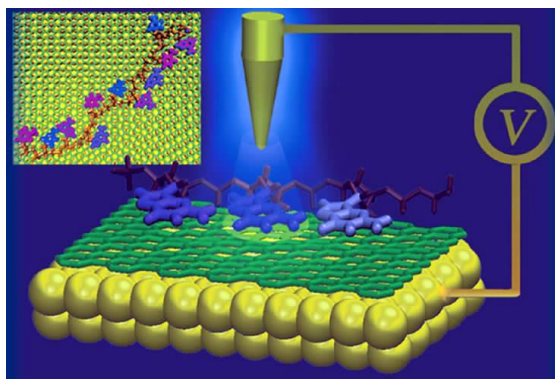
物理所 / 北京凝聚态物理国家实验室(筹)王玉鹏研究员、博士生崔晓玲与加拿大不列颠 - 哥伦比亚大学周飞教授合作,借用唯象重整化的思想,直接从倒格矢空间出发,将所有高能带的散射效应归并到一个对最低能带的有效势中,然后从这个有效势出发进一步重整化得到最低能带内的有效散射。这项工作的重要意义在于提出了一种新方法(唯象重整化)来准确研究不可分离变量冷原子系统的二体散射问题,对研究冷原子系统中的多体散射效应具有普遍意义。该研究工作得到国际同行的广泛关注和认可,并发表在 2010 年 4 月出版的 *Phys. Rev. Lett.* 上。

仿生材料研究取得新进展

对材料的结构和性能进行仿生设计以获得满足某些特定服役环境要求的工程材料是目前材料研究中的热点之一。力学所非线性力学国家重点实验室宋凡研究员、许向红副研究员和邵颖峰助理研究员及其合作者,用等离子刻蚀和酸腐蚀的办法,在陶瓷表面成功引入了仿蜻蜓翼表面纳米结构,使陶瓷表面的水接触角提高 50 度以上成为超疏水表面,有效地提高了陶瓷材料的抗热震性。研究表明,在热震过程中,仿生处理后的陶瓷表面能够自动地覆盖一层空气膜,使得出现在陶瓷与热震介质间剧烈的温差所产生的热梯度和应力不能直接作用于实际陶瓷上,这层空气膜使陶瓷表面热阻增加了近万倍。相关研究结果发表在 *Phys. Rev. Lett.* 上,并被美国 *Physical Review Focus* 和英国 *New Scientist* 专题报道,得到了包括 *J. Am. Ceram. Soc.* 主编、著名陶瓷材料学家 David Green 等人的高度评价。同时被选入由 American Institute of Physics 和 American Physical Society 共同主办的反映当前物理学和材料科学研究前沿中的焦点问题的刊物 *Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology*。

研究发现可用于高分辨率生物分子电学检测的新材料

上海应用物理所物理生物学实验室的方海平研究与樊春海研究组合作,通过理论计算发现,把单层石墨烯放在金(111)表面形成的复合结构,可以稳定吸附 DNA 分子,进而通过石英晶体微天平(QCM)技术在实验上很好地验证了该理论研究结果。这一复合纳米结构因具有很好的导电性,有望在生物分子检测和纳米器件等领域有着广阔应用前景。相关研究结果作为内封面文章发表在 *ChemPhys Chem* 上。该研究成果在生物纳米技术领域有着广泛的应用前景,



* 收稿日期:2010 年 5 月 5 日



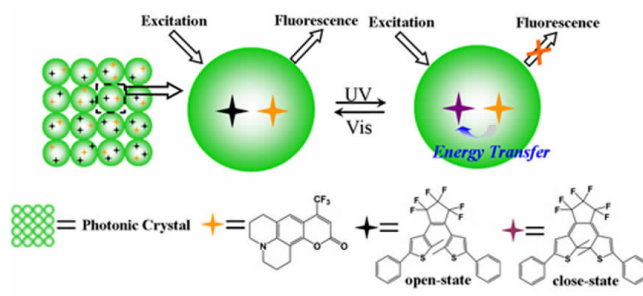
例如生物器件、生物传感器以及高精度 DNA 测序等等。

石墨烯表面性质的尺寸效应研究获得新发现

国家纳米科学中心孙连峰研究员及其合作者发现,当金蒸镀到不同层数的石墨烯上后,金膜的形貌与石墨烯的层数密切相关。通过一系列实验,他们提出,金在不同层数的石墨烯表面扩散系数及扩散势垒与层数密切相关,并计算出扩散势垒以及与层数的关系。而扩散势垒不同的原因可以归因于量子尺寸效应。同时,他们发现可以通过金膜的形貌辨别石墨烯的层数,与通常基于拉曼谱方法相比,具有空间分辨率高的优点,而且金膜可以通过热处理方法去掉。基于 AFM 办法,速度快、简便。这种通过金膜形貌方法识别层数的方法,对不同层数的石墨烯夹杂在一起的情形,具有特别的优点,而这也是传统拉曼和原子力显微镜的缺陷所在。该项工作对于开展金属-石墨烯及其器件研究具有重要的指导意义,研究成果发表在 *JACS* 上,并被 *Chemical & Engineering News* 以 *Gilded Graphene* 为题给予了报道。

利用光子晶体实现高性能光信息存储

发展高密度、高性能的存储材料和器件是信息技术的重要基础,其中,提高信息存储的开关比对于提高存储器件的性能具有重要意义。化学所有有机固体实验室和新材料实验室的科研人员结合信息存储与光子晶体方面的研究基础,将



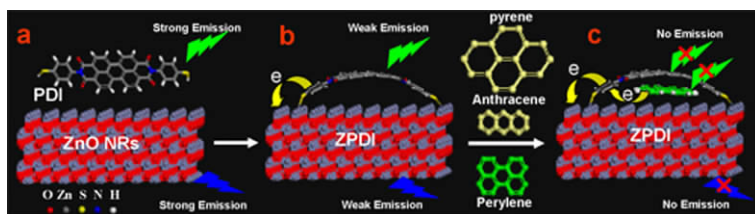
光子晶体引入到光存储体系中,发展了一种简单、有效的方法以提高光存储体系的荧光开关比。在这个光存储体系中,利用光子晶体带隙对光子的调控作用,将其作为一种新型光信息存储基底材料。利用二芳基乙烯和香豆素在光照条件下的分子间能量转移实现荧光的“开”和“关”状态。通过优化光子晶体的结构控制其光子带隙,可以使荧光信号提高 40 倍,荧光开关比提高 7 倍。光子晶体体系的荧光存储图案质量得到明显提高。研究表明,通过光子晶体的带隙设计可以大大提高荧光分子体系的信号强度和开关比,对于发展高性能的光信息存储及荧光检测器件具有重要意义。该研究结果发表在 *Adv. Mater* 上,并被 Nature Publishing Group 的 *Asia Materials* 选为研究亮点报道。

功能材料的可控组装、聚集态结构和性能研究取得系列进展

化学所有有机固体国家重点实验室的研究人员,发展了一种基于无机/有机功能材料的固态超分子体系,在无机-有机界面形成“分子口袋”,通过界面间强烈作用达到高选择性分离富集花分子,相关的研究结果发表在 *Angew. Chem. Int. Ed.* 上。该研究通过分子设计,在无机/有机界面形成高活性表面,成功的产生在两个独立体系不可能产生的新功能,证明了无机/有机异质结构作为关键材料在光电、信息和生命等高技术研究领域的潜在应用价值。

此前,该实验室在功能材料的可控组装、聚集态结构和性能研究方面取得了系列进展,

例如,确定了零维纳米胶囊到二维纳米管的自然生长及其机理,控制纳米胶囊的开口以及从开口纳米胶囊逐渐生长为一维纳米管和二维纳米管



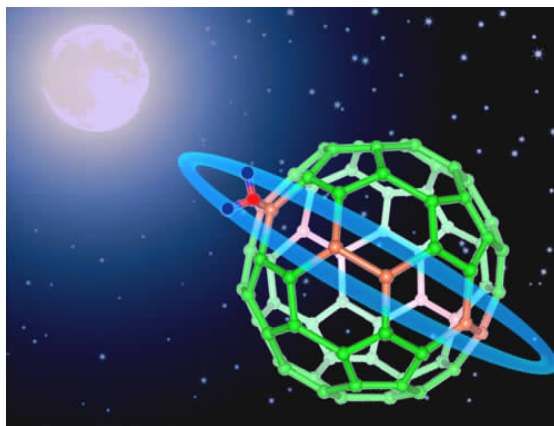
结构,该研究是在自然的条件下实现对一个物质的调控生长,对自组装技术的发展具有重要意义。研究结果发表后,立即被 *Synfacts* 刊登在 *Highlight*, 被认为“为自然体系的模拟带来了极大的希望”; 从一个独特的运动过程, 实现了机器工作中不同状态下的固态结构构筑, 这一研究工作完整表述了分子机器的运动是有可能利用固态下的性质实现化学表征; 还在自组装的方法、固态结构和性质方面获得了新的系列研究结果, 并分别发表在 *J. Phys. Chem. C*、*J. Phys. Chem. Lett.*、*Langmuir*、*Chem Phys Chem* 等杂志上。这些研究对功能材料的可控组装的研究具有指导意义。

富勒烯衍生化研究取得系列新进展

化学所分子纳米结构与纳米技术院重点实验室员与厦门大学合作,在富勒烯和内嵌金属富勒烯衍生化方面取得了系列新研究成果,其结果连续发表在 *Angew. Chem., Int. Ed.* 和 *Angew. Chem., Int. Ed.* 上,并被 *Nature China* 以 *highlight* 形式予以关注和报道。

在空心富勒烯衍生化方面,研究人员选择了具有 D_{3h} 对称性的椭圆形笼状结构的 C_{70} , 利用多种手段,结合量子化学计算最后发现能量对于富勒烯化学反应产物具有决定关系。研究表明:尽管在 C_{70} 赤道位置反应的产物结构最稳定,但需要克服很高的反应能垒,所以在温度较低时其加成位点只能在富勒烯 C_{70} 的两极位置;而当在隔绝氧气的条件下将反应温度提高到 1 200 度以上,就可以越过这个化学反应能垒得到最稳定的 C_{70} 加成产物 (*Angew. Chem., Int. Ed.*)。由于 C_{70} 可以看作是最小的碳纳米管,所以这个有关 C_{70} 的化学反应研究对于纳米管的化学修饰具有重要参考价值。

对于内嵌富勒烯的功能化,研究人员则选择了一类内嵌金属碳化物富勒烯 $Sc_3C_2@C_{80}$ 进行笼外修饰。这是一个具有奇特顺磁性质的分子,它有一个未配对电子分布在内嵌的 Sc_3C_2 团簇上。研究发现,化学反应前由于 C_{80} 碳笼的高对称性(I_h), Sc_3C_2 团簇在富勒烯笼内自由高速旋转,由此导致三个钪离子的化学环境完全相同并与 C_2 构成了具有 D_{3h} 对称性的双锥型结构。而若通过化学反应将 C_{80} 碳笼上接上一个吡咯烷基团,伴随着富勒烯碳笼的高对称性被破坏必然使 C_{80} 内的电场分布失去均匀性,因此极大地限制了 Sc_3C_2 团簇的运动。这样直接导致内嵌 Sc_3C_2 团簇的对称性从 D_{3h} 降低为 C_{2v} , 继而又因该分子结构的变化强烈影响其电子特性。实验中清楚地观察到

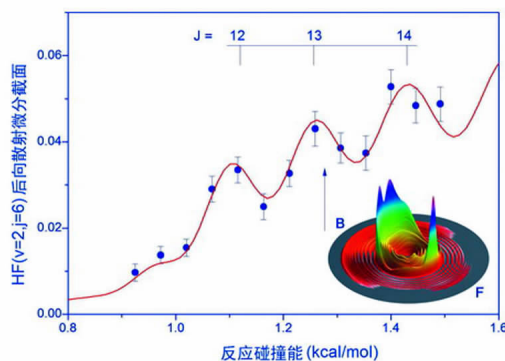


中国科学院

在化学反应前后其顺磁特性发生了巨大的变化(*Angew. Chem., Int. Ed.*)。这种通过笼外化学修饰来改变内嵌 Sc_3C_2 团簇的结构进而调节分子磁性质的方法,为富勒烯分子器件的构筑和基于富勒烯的量子计算机研究提供了基础。

首次观测到化学反应中分波共振现象

大连化学物理所杨学明、张东辉研究组利用里德堡态氖原子飞行时间谱技术对 $\text{F}({}^2\text{P}_{3/2}) + \text{HD}(j=0) \rightarrow \text{HF}(v', j') + \text{D}$ 反应进行了交叉分子束研究。在实验中,他们通过对 F 原子束和 HD 分子束都进行低温冷却的方法,得到了具有极高能量分辨率、量子态分辨的微分反应散射截面随碰撞能的变化关系。实验结果清晰地显示出产物 $\text{HF}(v'=2, j'=6)$ 的后向微分散射截面随碰撞能变化呈



振荡结构。通过全量子散射理论计算,清楚地说明实验测得的振荡峰来自于 $\text{F} + \text{HD} \rightarrow \text{HF} + \text{D}$ 反应中 $J = 12, 13$ 和 14 三个费希巴赫(Feshbach)共振态分波的贡献。他们在研究中还发现了理论计算和实验结果的差别小于 0.03 kcal/mol (10 cm^{-1}),表明理论计算的精确度已经远远超越了 1 kcal/mol 的化学精度,完全达到了光谱精度。该研究成果发表在 *Science* 上,英国剑桥大学教授 Stuart Althorpe 在同期的 *Science* 上发表了评述文章,详细介绍了这一工作及其学术意义。

吸附储氢材料研究取得新进展

氢能源作为一种零污染、可再生能源日益受到重视,并成为洁净能源研究领域的国际前沿和热点。储氢问题是氢能源领域的一项重要课题。大连化学物理所邓伟侨研究组及合作者使用锂离子掺杂技术,提高微孔共轭聚合物对氢气的吸附焓从而提高材料的储氢量。研究表明当锂离子的掺杂比例在 $0.5 \text{ wt}\%$ 时,材料储氢能力最强,对氢气的吸附焓为 8.1 KJ/mol 。该材料在 77 K 和 1 bar 条件下,储氢量高达 $6.1 \text{ wt}\%$,刷新了同等条件下的物理吸附储氢的纪录,远远高于碳纳米材料($3.0 \text{ wt}\%$)和金属框架化合物($2.5 \text{ wt}\%$)。该研究工作以通讯形式刊登在近期的 *Angew. Chem. Int. Ed.*,并被选为热点文章。

首次观察到水凝胶含水状态下表面微纳结构

水凝胶(Hydrogel)是一类集吸水、保水、缓释于一体的功能高分子材料。因其独特的生物组织仿生特性,而被誉为新一代最具潜力的组织工程用生物材料。大连化学物理马小军研究组的谢红国博士等与孙龙研究组的王锋等合作,首次将白光干涉技术用于含水状态下水凝胶表面形貌的原位表征,并将水凝胶表面形貌与蛋白质吸附行为及体内移植效果相关联,提出水凝胶材料的表面性质影响其生物相容性的主要机制。该项研究成果得到国际同行专家的认可,发表在最近出版的 *Langmuir* 上,并在 4 月 15—18 日在成都召开的全国生物材料大会上得到国内生物材料领域专家的好评,获得大会优秀论文奖。

白血病干细胞最新研究成果

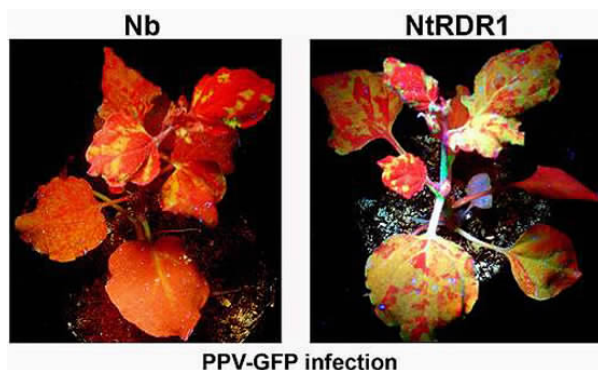
上海生命科学院 / 上海交通大学医学院健康科学所发育与疾病实验室及瑞金医院医学基因组学国家重点实验室的最新研究发现: 进化上高度保守的 PTEN-C/EBPa-CTNNA1 信号轴控制造血干细胞发育与白血病干细胞恶性转化。这项研究揭示 3 个重要的白血病肿瘤抑制基因共同作用在一个进化上高度保守的信号转导轴中, 通过调节表观遗传学机制“三把锁”(组蛋白 H3K27 甲基化, 组蛋白去乙酰化和 DNA 甲基化) 而控制造血干细胞发育与白血病干细胞恶性转化。该白血病干细胞肿瘤抑制轴的发现也为白血病干细胞的靶向治疗(特别是 CTNNA1 表达低的患者) 提供了重要线索。4 月 6 日, 国际著名学术期刊 *Blood* 在线发表了该研究成果。

抗肿瘤药物研究取得新进展

升麻是我国著名的中药。同属植物黑升麻, 在欧美国家也有很长的使用历史。近 10 年来美国黑升麻干燥根茎用于作为治疗更年期综合症的补充剂的交易量达每年 10 亿美元左右。我国升麻属植物资源丰富, 广泛分布于全国各地, 但对其的开发利用却极不合理: 一般只在民间少量用做治头痛牙痛、咽喉痛等疾病, 或是以粗提物的形式卖到国外公司。为了充分利用升麻资源, 昆明植物所资源植物化学研究组自 2005 年起对分布于全国各地的升麻、云南升麻、兴安升麻和大三叶升麻进行了收集、分离纯化、结构鉴定、生物活性筛选和活性化合物富集的工作。共分离得到升麻三萜皂苷类新化合物 60 余个, 并发现了一系列具有抗乳腺癌的活性成分。最近, 该所博士研究生年寅在导师邱明华研究员的指导下从贵州黑石头镇采集的升麻中分离得到 7 个结构新颖的升麻三萜皂苷类化合物。首次在升麻中发现具有特异性抗肝癌活性的化合物, 这一发现进一步促进了关于升麻中抗肿瘤活性成分研究的进程, 为未来研究发展提供了一个新的方向。该课题组已申请并获得与升麻相关的发明专利 4 项, 并在 *Journal of Natural Products*、*Helvetica Chimica Acta*、*Hemical & Pharmaceutical Bulletin*、*Beilstein Journal of Organic Chemistry* 和 *Phytotherapy Research* 等期刊上发表研究论文。

植物抗病途径研究获得重要发现

微生物所植物基因组学国家重点实验室郭惠珊研究组通过分析与本明烟 RDR1 高度同源的普通烟草(*Nicotiana tabacum*) 的 RDR1(Nt-RDR1), 发现 Nt-RDR1 在本明烟中过表达, 非但不能提高本明烟对病毒的抗性, 反而使本明烟对很多病毒出现超感表型。进一步研究发现, Nt-RDR1 蛋白具有 RNA 沉默抑制子活性。Nt-RDR1 蛋白能抑制 RDR6 参与的 RNAi 途径, 干扰依赖 RDR6 产生的 siRNA 的沉默活性。该项研究揭示了本明烟 RDR1 自然突变的生物学意义。阐明本明烟 RDR1 的自然突变可能是植物本身长期面临广泛病毒侵染的选择压



力而发生的结果,通过 RDR1 的失活突变以激活更强的 RDR6 介导的抗病毒能力。该研究为植物抗病途径在农业抗病毒生产应用上提供了新的证据。研究成果已于 4 月 16 日在 *The Plant Cell* 在线发表。

从能量代谢角度揭示蝙蝠飞行起源的机制

蝙蝠是翼手目动物的通称,是唯一演化出具有真正飞行能力的哺乳动物。昆明动物所张亚平院士及其指导的博士生沈永义,注意到飞行消耗的能量是奔跑的 3—15 倍。因此,飞行除了需要骨骼等形态变化外,还需要能量供应系统的高效化,以便能适应能量需求的急剧增加。线粒体是细胞的能量工厂,通过氧化呼吸链提供了生物体 95% 的能量,是动物各种运动所需能量动力的“发动机”。因此他们推测线粒体产能系统的进化应该与蝙蝠飞行能力的起源密切相关。通过全基因组比较分析,他们证实在蝙蝠飞行能力的起源过程中,线粒体的氧化呼吸链基因受到正选择,线粒体与细胞核编码的基因发生协同进化,以适应飞行起源过程中对能量需求的急剧增加。该研究成果于 4 月 26 日在 *PNAS* 在线发表。美国科学院院士 David M. Hillis 评价道:“该研究十分出色且令人兴奋,该研究结果对了解线粒体的分子生物学和进化,以及飞行的分子适应机制有广泛的意义”。

首次揭示早期羽毛发育现象

羽毛的起源和演化是进化生物学研究的一个难点问题。近年来在我国中生代中晚期形成的地层中发现的带羽毛恐龙化石为研究羽毛的起源和早期演化研究提供了大量信息,相关研究在世界上产生了广泛关注。古脊椎动物与古人类所徐星研究员、山东天宇自然博物馆郑晓廷馆长和地科院地质所尤海鲁研究员等,观察和分析了保存于不同种类的恐龙和早期鸟类化石标本上的羽毛形态,他们发现过去依据现代羽毛发育资料建立的羽毛演化模型不能完全解释发现于恐龙和早期鸟类化石上的复杂多样的羽毛形态,其中一些羽毛形态和现代羽毛存在明显差别。研究者重点研究了收



藏于山东天宇自然博物馆的 3 件恐龙化石标本和 1 件收藏于古脊椎所的恐龙标本,发现在两件被鉴定为似尾羽龙的标本上,保存了非常精美的羽毛印痕。这两件标本代表同一物种的两个不同个体发育阶段:小个体标本代表幼年阶段的早期;大个体标本代表幼年阶段的晚期。研究成果发表在 4 月 29 日出版的英国 *Nature* 上,在这篇论文中,他们指出这种加长的宽丝状羽在许多相对原始的恐龙当中都有发现,确实代表一种原始羽毛形态,这种形态很可能和近端带状正羽具有较为相似的基因表达模式。在世界上首次揭示了早期羽毛的发育现象,提出完全依据现代羽毛发育资料建立的羽毛演化模型需要修订。

我国首台基于“龙芯 3A”的国产万亿次高性能计算机研制成功

以中国科学技术大学陈国良院士为项目负责人的研制队伍与深圳大学联合成功研制出我国首台采用国产高性能通用处理器芯片“龙芯 3A”和其他国产器件、设备和技术的万

亿次高性能计算机“KD-60”,并于4月17日通过了由安徽省科技厅组织的鉴定。这是继2007年底成功研制基于“龙芯2F”处理器的高性能计算机“KD-50-I”后,我国高性能计算机国产化的又一次重要突破。专家认为,KD-60 万亿次机的研制成功,是高性能计算机向个人化方向发展的又一次重要进展,为最终研制出微波炉大小的桌面个人高性能计算机奠定了良好的基础,并确立了国产高性能通用处理器在高端并行机应用中的重要地位,为我国未来研制国产千万亿次计算机和提高自主创新能力提供了示范作用,对推动国产高性能计算机事业的发展和国家安全具有重要的战略意义。



该机采用单一机柜,集成了80颗“龙芯3A”处理器,理论峰值计算能力达到每秒1万亿次。系统硬件由10个1U(标准机箱高度)的计算节点、1个2U的服务节点和显示终端、2个1U的48端口千兆以太网交换机组成;系统软件以开源软件为主,其中包括针对龙芯3A处理器体系结构专门优化的GotoBLAS2数学函数库,以及自主研发的图形化系统监控软件KD-60 Monitor 1.0,具有兼容性强、易维护、易升级、易使用等特点。

与KD-50-I相比,KD-60体积减小了2/3,整机功耗只有2381瓦,降低了56%,特别适合于高性能计算教学和创新型人才培养,可应用于有大规模科学与工程计算需求的相关学科研究,以及军事科学、国家安全和国民经济建设等诸多方面,将为我国与日俱增的大型、密集、高性能计算需求提供优良的服务。由于具有上述特点,应用条件相对简单,便于推广使用,发展前景非常美好。

高效能分布式 GPU 超级计算系统启用

高性能计算已成为国家竞争力的重要标志之一,对科学技术进步、经济社会发展、环境保护和国家与公共安全的作用日益显著。但是,在超级计算机的峰值突飞猛进的同时,其投资大、运行维护成本高、使用效率低等问题也日渐突出,成为制约超算能力提升的瓶颈。中科院从应用需求出发,基于长期在多尺度模拟方法及专业计算技术方面的积累,在国家 and 院专项资金的支持下,另辟蹊径,于2010年成功建立了基于GPU的双精度峰值超过千万亿次、单精度峰值超过3000万亿次的高效能超级计算系统,并与联想和曙光两家公司合作,在中科院内不同领域的研究所推广了10套百万亿次系统,从而构建了聚合计算能力近6000万亿次的分布式GPU超级计算系统。该系统满足了广大科技人员对超级计算的迫切需求,以低廉的成本和现成的网络设施实现高效的超级计算,探索形成了一条



中国科学院

应用导向、效率优先的富有中国特色的超级计算模式。4月24日,中科院高效能分布式GPU超级计算系统启用仪式在过程工程所举行。中科院院长路甬祥、副院长李静海、秘书长邓麦村、副秘书长谭铁牛,国家财政部教科文司司长赵路出席启用仪式。

“微型流化床反应分析方法与分析仪”通过鉴定

过程工程所自主研发的“微型流化床反应分析方法与分析仪(MFBRA)”于2010年4月10日通过了中科院计财局组织的技术成果鉴定。与会专家一致认为:“该成果创新性强,研制的仪器属国内外首创,达到国际领先水平。”气固反应分析测试是科技领域的基础研究和技术研发所必需手段和工具,目前一般基于热重分析方法和热重分析仪,具有升温速度慢、受扩散抑制严重、难以实现等温反应等方面的问题。过程所许光文研究组,自2006年开始开展了微型流化床反应分析仪的自主研发,通过采用微型流化床作为反应器,实现了气固反应的微分化,强化了反应过程的传热与传质,同时与其他核心技术,如细微颗粒瞬时进样、过程质谱在线监测等耦合集成,并配套开发了相应的控制和数据解析软件,首次形成了利用微型流化床反应器的通用气固反应微分分析方法与分析仪。该仪器具有紧凑实用、操作性强、配置合理、性能稳定、数据重复性好等优点。实际应用表明:其实现了等温微分气固反应,有效克服了扩散影响,使得测试的反应动力学参数更趋近反应本征特性。



成功研制国内首款可产业化 IGBT 芯片

IGBT(绝缘栅双极晶体管)作为新型电力电子器件的典型代表,广泛应用于智能电网、新能源发电、新能源汽车、工业变频、机电一体化、家用电器等诸多领域,是关系国家能源、交通、工业、家电等国计民生的核心电子元器件。由于国内 IGBT 制造工艺的落后,严重制约了我国 IGBT 产品的全国产业化和产业化进程,技术和市场完全被少数国外企业垄断,尤其在高端应用领域。由微电子所设计研发的 15-43A/1200V IGBT 系列产品(采用 Planar NPT 器件结构)最近在华润微电子工艺平台上流片成功,各项参数均达到设计要求,部分性能优于国外同类产品。这是国内首款自主研制可产业化的 IGBT 产品,标志着国产化 IGBT 芯片产业化进程取得了重大突破,拥有了第一条专业的完整通过客户产品设计验证的 IGBT 工艺线。该科研成果主要面向家用电器应用领域,联合江苏矽莱克电子科技有限公司进行市场推广,目前正由国内著名的家电企业用户试用,微电子所和华润微电子公司将联合进一步推动国产自主 IGBT 产品的大批量生产。

