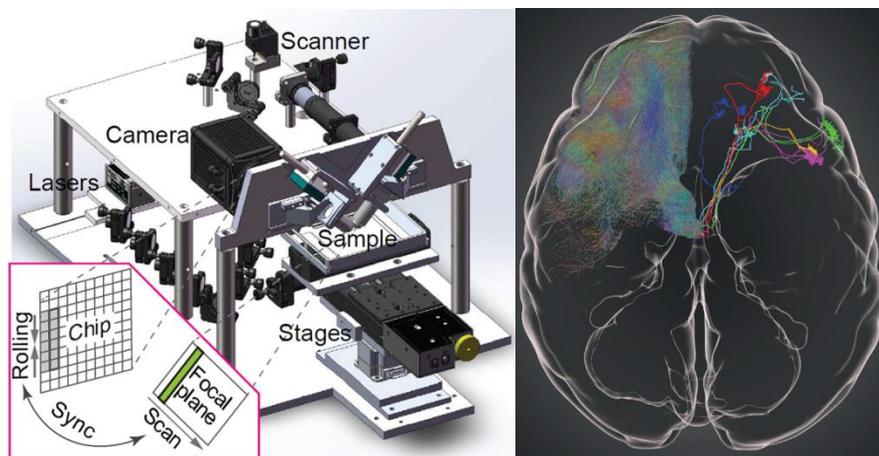


## 中国科大-中科院深圳先进院解析猕猴大脑微米分辨率三维结构



左图：VISoR2显微镜工程简图。右图：猕猴丘脑神经元轴突投射与追踪

近日，中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家研究中心与生命科学学院毕国强教授和刘北明教授率领中科大、中科院深圳先进技术研究院和合肥综合性国家科学中心人工智能研究院团队通过自主研发的高通量三维荧光成像VISoR技术和灵长类脑图谱绘制SMART流程，并与中科院昆明动物所胡新天团队、中科院深圳先进院徐富强团队、以及美国麻省理工学院、南加州大学、加州大学洛杉矶分校等单位科学家合作，实现了对猕猴大脑的微米级分辨率三维解析。相关研究成果以“High-throughput mapping of a whole rhesus monkey brain at micrometer resolution”为题发表于《自然 生物技术》(Nature Biotechnology)。

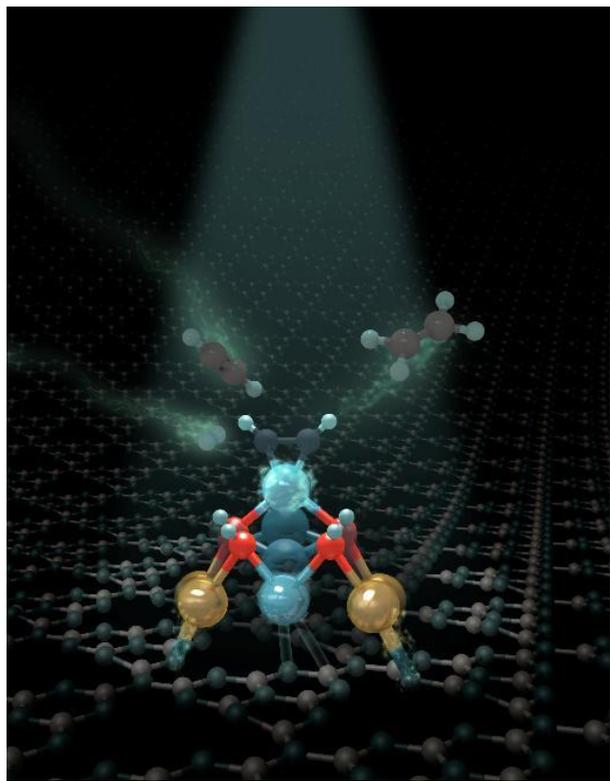
目前的脑图谱研究主要集中于小鼠，国际通用的成像技术对其进行微米分辨率全脑成像通常需要数天的时间，而猕猴脑体积为鼠脑的200倍以上，要在较短时间内完成全脑成像是一项极大的挑战。为应对这一挑战，团队此前在中科院“脑功能联接图谱”战略性先导专项和科研仪器研制项目、以及国家自然科学基金“情感与记忆的神经环路基础”重大研究计划项目的支持下，经过数年的攻关，研发了VISoR高速三维荧光成像技术（工作于2019年发表于《国家科学评论》）。这一技术通过斜截面扫描照明与同步成像实现了在样品连续运动时进行无模糊的图像采集，消除了传统大样品成像需要在不同的小视野切换、停顿所带来的时间损失，数据采集速度比当前适用于小鼠脑图谱绘制的几种三维光学成像技术提升数十倍，使得猴脑图谱解析成为可能。团队采取先对离体大脑进行包埋切片的方式，使得溶液渗透效率仅依赖于切片厚度，而不受其大小的影响，并且发展了高折射率的PuClear组织透明化方法，对脑片的灰质与白质不同部分、不同深度达到均匀透明。然后通过改进的VISoR2系统，最终对猕猴全脑样品在100小时内完成 $1 \times 1 \times 2.5$ 微米三维分辨率的图像采集。项目中两只猕猴大脑图像原始数据量超过了1PB。由于数据体积庞大，团队开发了自动的三维图像拼接技术和渐进式的半自动追踪技术，实现了猕猴大脑的三维图像重建和神经元轴突纤维的长距离追踪，并在此基础上发现了前所未有的猕猴轴突纤维投射特性及其在大脑皮质沟回处转折延伸的多种路径形态。

VISoR技术作为当前世界最快的大尺度三维组织成像方法，可以对各种模型动物大脑进行高通量、高精度的定量解析，并可扩展至其它组织器官，在大规模药物筛选、快速病理诊断，以及更大型生物样品成像等领域都有广阔的应用前景。这项技术产生的超大规模数据与人工智能技术的结合，将有望帮助理解人类大脑和身体器官的精细结构及其在疾病中的变化规律，加速医疗诊断和药物研发，促进人类健康。

## 中国科大设计出高载量、抗积碳“动态三原子”加氢催化剂

近年来，负载型原子分散催化剂（SADCs）由于其最大化原子利用效率和独特的催化性能引起了广泛关注。相比传统的金属纳米颗粒催化剂，SADCs的活性位点间相互孤立且结构均一，使得该类催化剂在烃类选择性加氢反应中展现出较高的选择性和良好的抗积碳性能。由于其表面自由能急剧增加，如何获得高载量且同时能在反应条件下保持高稳定性的催化剂是一个巨大挑战。增强金属-载体相互作用（MSIs）或将活性金属物种限域在一定空间内（例如微孔）是提高金属稳定性的两种常用方法。然而，过强的MSIs可能会导致反应活性大幅度降低；微孔限域活性金属则有可能会影响反应的传质。因此，如何实现高载量、高稳定性和高活性SADCs的理性设计是当今亟待解决的科学难题。

针对上述难题，中国科学技术大学的路军岭教授与李微雪教授、韦世强教授等课题组密切合作，协同利用金属-载体相互作用和原子限域两种机制，在g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>载体上设计合成了高载量、高稳定性的Ni<sub>1</sub>Cu<sub>2</sub>动态三原子催化剂，该催化剂在富烯烃气氛中乙炔和1,3丁二烯选择性加氢应用方面取得突破性进展。研究成果以“Synergizing metal-support interactions and spatial confinement boosts dynamics of atomic nickel for hydrogenations”为题，在线发表在国际著名期刊《Nature Nanotechnology》上。



图注：Ni<sub>1</sub>Cu<sub>2</sub>三原子催化剂在乙炔选择性加氢中动态结构变化的模型示意图。其中金色、蓝色、红色、白色、黑色小球分别代表铜、镍、氧、碳和氢原子。

该工作中，路军岭教授课题组利用Cu、Ni与g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>载体上丰富的氮之间强的金属-载体相互作用，以及预沉积的Cu原子对Ni原子的限域，在g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>载体上制备出了高载量Ni<sub>1</sub>Cu<sub>2</sub>三原子催化剂，Ni、Cu负载量分别为3.1 wt.%和8.1 wt.%。在富乙炔氛围的乙炔选择性加氢反应中，制备的Ni<sub>1</sub>Cu<sub>2</sub>三原子结构催化剂在活性、选择性和稳定性方面表现出优异的催化性能，该催化剂在大约170° C实现乙炔的完全转化，并保持90%的乙烯选择性，而且可以保持350小时以上的稳定性。该催化剂在1,3丁二烯选择性加氢中表现出了类似的优异性能。原位同步辐射真空紫外光电质谱和原位热重测试表明催化剂在反应过程中基本没有积碳的生成，进一步证明了上述催化剂优异的抗积碳性能。

李微雪教授课题组理论计算确定了Cu-OH-Ni-OH-Cu结构的空构型。揭示出了Ni<sub>1</sub>Cu<sub>2</sub>三原子与载体的共价键相互作用、及其两侧Cu原子对中间活性Ni原子的限域是该催化剂具有高稳定性的内在原因。同时孤立的活性Ni位点限制了乙炔乙烯等的共吸附，使得其展现优异的抗积碳性。进一步理论计算发现：反应物分子吸附时Ni原子与载体间的化学键断裂并被拉离表面，便于后续加氢生成目标产物；产物脱附后，Ni原子则重回载体表面并与载体成键。金属-载体相互作用与原子限域的协同带来催化过程中的动态结构变化，不仅可以改进催化剂对反应分子的吸附提高催化活性，同时也可以维持高稳定性，而单Ni位点则使得该催化表现出高选择性和高抗积碳性能。这一策略为未来设计高效、稳定、高负载量、原子分散、且低成本的工业加氢催化剂提供了新思路。

## 研究进展

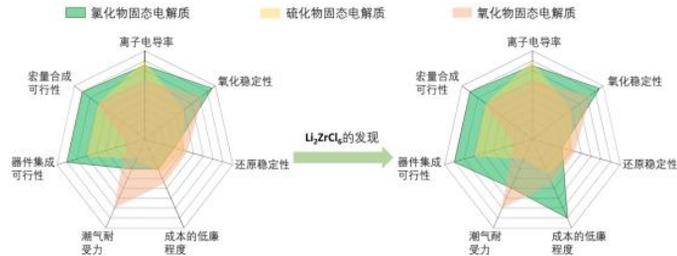
### 中国科大运用全光激发实现氪-81的单原子探测

中国科学技术大学教授卢征天及其同事Florian Ritterbusch博士运用全光激发实现了对极其稀有同位素氪-81的单原子探测，这一量子精密测量方法的突破将助力于地球与环境科学研究，相关成果以“Optical Excitation and Trapping of  $^{81}\text{Kr}$ ”为题发表在《物理评论快报》[Phys. Rev. Lett. 127, 023201(2021)]上。

我们身边有一种微量的惰性气体叫氪，它在空气中的含量为百万分之一。氪由多种同位素组成，包括一种半衰期为23万年的放射性同位素氪-81，在空气中的含量仅为百亿亿分之一（ $10^{-18}$ ）。自从上世纪60年代在空气中发现氪-81以来，科研人员一直梦想着用氪-81这个天然示踪剂来帮助了解环境中的水、冰循环过程，给百万年老的古地下水与冰川定年。卢征天教授发明了一种称为“原子阱痕量分析”的单原子灵敏检测方法，可以一个一个地数出环境样品中所含的氪-81原子。

用原子阱捕获氪-81需要首先将原子激发到一个亚稳量子态上。目前国际上均采用气体放电方法来制备亚稳态氪原子，方法简单可行，然而存在着激发效率低、样品损失和交叉污染等问题。在本工作中，科研组研制成一种高亮度共振真空紫外灯，并将其应用于全光激发氪原子，从而避免了气体放电所带来的种种问题。团队提出了一种新的机理来解释真空紫外光子在氪气中传播时的“自吸收”现象——光子在氪气中多次散射后并未损失，而是其频率发生了偏移。经过四年的不断尝试，他们在保持光源高亮度特征的同时，减小了光频偏移，建成了基于全光激发的氪原子阱，并达到了每小时1800个氪-81原子的探测速率。对于古地下水研究和寻找百万年前形成的冰芯等科学问题，这种原子阱超灵敏分析工具带来了新的研究机遇。

### 成本更低、性能更强：锂电池固态电解质研究取得重要突破



图注： $\text{Li}_2\text{ZrCl}_6$ 的发现使氯化物固态电解质兼具性能和量产成本的优势。

中国科学技术大学马骋教授报道了一种具备显著优势的固态电解质，为全固态电池的商业化移除了重大障碍；该成果以“A cost-effective and humidity-tolerant chloride solid electrolyte for lithium batteries”为题发表在国际著名学术期刊《Nature Communications》上。

马骋教授课题组设计并合成的 $\text{Li}_2\text{ZrCl}_6$ 材料，在完美继承了氯化物固态电解质所有优势的基础上，克服了原材料成本过高和对湿度的稳定性差两个瓶颈。这种材料在50微米厚度时的原材料成本仅为1.38美元/平方米，远远低于10美元/平方米的阈值，并且它在湿度高达5%时仍保持稳定，可在一般的干燥间合成和储存。在具备以上独特优势的同时， $\text{Li}_2\text{ZrCl}_6$ 在其他方面不逊于已报道的氯化物固态电解质；它的离子电导率高达 $0.81 \text{ mS cm}^{-1}$ ，并且具有良好的可变形性、对空气的稳定性，以及和高电压正极的相容性。用 $\text{Li}_2\text{ZrCl}_6$ 固态电解质组成的全固态电池在性能上甚至略高于其他氯化物固态电解质组成的电池，并且远远超过基于硫化物和氧化物固态电解质的同类电池；特别的， $\text{Li}_2\text{ZrCl}_6$ 和高能量密度的单晶高镍三元正极 $\text{LiNi}_{0.8}\text{Mn}_{0.1}\text{Co}_{0.1}\text{O}_2$ （即NMC811）组成的全固态电池，在 $200 \text{ mA g}^{-1}$ 的大电流密度下循环200圈之后容量仍高达 $150 \text{ mAh g}^{-1}$ ，并且在整个长循环过程中容量几乎无衰减。和其他固态电解质相比， $\text{Li}_2\text{ZrCl}_6$ 罕见的在大规模生产的成本以及综合电化学性能这两方面同时具备显著优势，它的发现将对全固态电池的商业化产生重要的推动作用。



## 研究进展

### 中国科大在非平衡态统计物理研究中取得新进展

中国科大物理学院、合肥微尺度物质科学国家研究中心徐宁教授研究组在非平衡系统统计物理的相关研究中取得重要进展，相关成果在线发表于《科学进展》(Science Advances)。

温度是衡量物体冷热程度的物理量。对于热力学平衡体系，温度表征的是构成体系的单元（如原子、分子）热运动的动能，它还可以由熵与内能的关系、涨落耗散定理等来计算。无论用哪种方式来定义温度，热力学平衡体系的温度都是确定的。

对于非平衡体系，如何定义温度却是一个难题。由诸如沙子、岩石等宏观“颗粒”构成的体系，室温所对应的颗粒动能根本无法将一个“颗粒”在重力场中抬高一个“颗粒”直径大小的尺度，因此，这样的体系被称为无热体系。然而，在外力驱动下，这些无热体系仍然可以像热运动一样杂乱无章地运动起来而造成体系结构的弛豫，体系似乎受到了某种“有效温度”的激发，例如，重力驱动下形成的山体滑坡、泥石流等。以往的研究表明，如果计算剪切体系（如泥石流）、自驱动体系（如鱼群、鸟群等活性物质）、老化的玻璃等典型的非平衡体系的涨落-耗散关系，会得到两个截然不同的“温度”，分别对应于短时间热运动的热浴温度和驱动体系长时间结构弛豫的“有效温度”。有效温度一直都被视为表征非平衡体系的一个重要参量，然而，它的真实“身份”一直都是个谜。

在热浴温度为零的极限下，我们能否定义玻璃的有效温度？徐宁教授研究组从这个问题出发，发展了新的模型方法，实现了零温非晶固体涨落-耗散关系的计算，并从中定义了一个温度量纲的物理量 $T_{IS}$ 。通过分析比较，该研究组出乎意料地发现，该物理量恰好对应于结晶体系的结晶温度以及玻璃形成体系的“起始温度”（即从简单液体转变为过冷液体的转变温度）。该发现最终揭开了非平衡体系有效温度的神秘面纱：被寄予厚望的有效温度其实就是非平衡体系相对应的平衡状态下的特征温度！因此，有效温度并不是热力学意义上的温度，它完全受控于体系的状态参量，如相互作用和密度，不能独立变化，也不满足热力学第零定律。例如，如果将两块有效温度不同的老化玻璃热接触，它们的有效温度不会达到一致。该工作建议，我们需要重新审视非平衡体系的有效温度及其所对应的理论。



## 国家研究中心简讯

### ◆“量子材料中的磁学和自旋电子学前沿国际研讨会”在中国科大成功举办

2021年7月11-14日，由中国科学技术大学和美国物理学会共同主办，中国科大合肥微尺度物质科学国家研究中心国际功能材料量子设计中心(ICQD)承办的“物理评论系列会议：量子材料中的磁学和自旋电子学前沿国际研讨会(Physical Review Workshop on Quantum Materials for Modern Magnetism & Spintronics (Q3MS))”在合肥成功举行。会议采取线上和线下相结合的方式召开，来自中国大陆与香港、美国、日本、德国、芬兰等国家和地区的150余位线下和450余位线上注册的学者和学生参加了会议；此外，蔻享线上直播的会议点击率累计逾2.6万次。

美国物理学会总编辑Michael Thoennessen博士、物理评论快报(PRL)和物理评论材料(PRM)编辑王牧博士及美国物理学会旗下相关期刊的责任编辑也线上参与了会议。中国科大张振宇教授和美国华盛顿大学许晓栋教授共同担任会议组织委员会主席。物理评论系列会议源于美国物理学会的“Physics Next”研讨会系列，此次会议是继2019年“物理评论系列会议：超导新前沿国际研讨会”后第二次在中国召开的物理评论系列会议。

### ◆刘敬祥荣获国际纯粹与应用化学联合会(IUPAC)奖项

7月2日，国际纯粹与应用化学联合会(IUPAC)公布了授予中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家研究中心特任副研究员刘敬祥(Jingxiang Low)博士2021年度IUPAC-ZHEJIANG NHU国际青年科学家奖的决定，以表彰他在绿色化学光催化材料的设计与合成领域作出的杰出贡献(“In recognition of the design and synthesis of photocatalytic materials for green chemistry”)。

刘敬祥博士来自“一带一路”沿线国家：马来西亚。其硕士研究生、博士研究生以及博士后工作经历均在中国完成，此前获得中国科学院国际人才计划资助(2019年度PIFI项目)，是中国政府培养的优秀国际科研人员，现于我校熊宇杰教授课题组从事科研工作，研究方向为太阳能转化材料的设计与应用。

IUPAC-ZHEJIANG NHU国际奖成立于2019年，是IUPAC系列重要奖项之一，旨在鼓励年轻和有经验的化学家，并强调发展绿色化学的重要性。IUPAC的国际评审委员会每两年在全世界范围内评选出三名在相关领域做出突出贡献的青年科学家。