

中国科大在《科学》上发表 关于分子碰撞中量子干涉现象的评述论文

中国科大王兴安教授和中国科学院大连化学物理研究所、南方科技大学杨学明院士应邀在《科学》杂志 (Science) 发表题为“分子双狭缝实验” (A molecular double-slit experiment) 的评述文章 (Perspective), 深入探讨并展望了分子碰撞中的立体动力学与量子干涉现象研究。

1801年, 英国物理学家 Thomas Young 以著名的杨氏双狭缝实验证实了光具有波动特性, 这一双狭缝实验毫无疑问是科学上一个重要的里程碑。随着现代科学的不断发展, 1927年, Davisson 和 Germer 通过电子束在金属镍表面的散射行为观测到了电子的波动性。这些实验同20世纪初的一系列重要实验共同支撑了“波粒二象性”这一微观描述, 推动了现代量子力学的发展。量子力学特性支配着作为微观粒子的原子和分子的碰撞行为。比如量子干涉就显著地影响着分子碰撞所引发的能量传递和化学反应等行为的微观动力学。因此, 对分子碰撞中量子效应的精确测量和描述是理解原子分子量子动力学的关键。

随着激光、分子束等实验技术的快速发展, 科学家们已经可以对碰撞分子的量子态和空间取向进行精细调控, 这也使深入研究分子碰撞中的量子立体动力学成为可能。评述文章详细介绍了同期《科学》杂志发表的关于分子非弹性碰撞传能过程的立体动力学及量子干涉现象的研究。通过利用斯塔克诱导的激光绝热拉曼通道激发方法, 美国科学家成功实现了对 D_2 分子的高效振动态激发, 并选择性地精准制备了两种具有不同特性的量子态: 1) 一个在空间具有确定取向的振动激发态, 其分子键轴取向和参考轴具有 +45 或者 -45 度的夹角, 称为单轴态; 2) 另一个振动激发态来自两个单轴态的相干叠加, 即其分子键轴取向和参考轴同时具有 +45 及 -45 度的夹角的可能性, 称为双轴态。通过对两种不同量子态的 D_2 分子与 He 原子非弹性散射产物角分布的测量, 研究人员发现处于双轴态的分子在散射中会表现出与单轴态明显不同的实验结果, 这一差异来源于双轴态中不同键轴取向之间的量子干涉。这是在分子碰撞体系中首次通过激光制备出类似于杨氏实验的“双狭缝” (double-slit), 进而影响双分子碰撞的微观动力学过程。同时也为挑战在化学反应碰撞中开展可控的量子干涉实验研究提供了重要参考。

文章还重点介绍了一个开展量子干涉以及立体动力学研究的理想化学反应体系: $H+HD \rightarrow H_2+D$ 反应及其同位素反应体系。该反应一直是化学动力学领域的重要基准体系, 也是实验与理论互动的成功范例。 $H+HD$ 这一系列反应的电子基态和电子激发态的势能面间具有非常著名的锥形交叉。这一锥形交叉的存在使得氢交换反应体系天然地具备两个不可区分的反应路径: 其中一个对应着直接反应路径, 另一个则对应着类似于 roaming 的非直接反应路径。这两个路径的量子干涉会显著影响氢交换体系的反应动力学。此前, 杨学明院士和王兴安教授以及合作者也是通过对两个路径量子干涉行为的精密实验测量首次成功地观测到了化学反应中的几何相位效应。

激光制备特定量子态和取向分子的技术已经体现了其显著的优势以及可扩展性, 在未来的实验中, 结合先进的激光量子态制备和分子空间取向技术, 科学家们将能够通过交叉分子束实验对氢交换等反应开展进一步的精密动力学测量, 借助激光选态的“双狭缝实验”深入理解基元反应的量子干涉行为和立体动力学, 并有望在未来实现对基元化学反应的立体量子动力学控制。



研究进展

中国科大团队揭示代谢酶ENO1调控肝癌的新机制

近日，中国科学技术大学张华凤课题组和高平课题组（现华南理工大学）在*Nature Cancer* 杂志发表题为“ENO1 suppresses cancer cell ferroptosis by degrading the mRNA of iron regulatory protein 1”的最新研究成果，报道了ENO1作为RNA结合蛋白降解mRNA的机制，阐明了ENO1结合并降解铁调蛋白（Iron regulatory protein 1, IRP1）基因的mRNA，从而调控细胞内铁离子的代谢稳态，影响铁死亡而促进肝癌的发生发展，为治疗肝癌相关疾病提供了潜在的新靶点。

本研究中，作者首先发现肝癌细胞中高表达的ENO1可以作为RNA结合蛋白（RNA binding protein, RBP）发挥作用，通过将ENO1调控的RNA-seq数据与发表的CLIP-Seq数据进行比对分析，并结合肝细胞肝癌（hepatocellular carcinoma, HCC）中相关基因的表达情况，作者将目光进一步锁定在铁调蛋白IRP1基因上。进一步研究发现ENO1蛋白结合IRP1 mRNA，并通过招募RNA降解因子CNOT6促进IRP1 mRNA的降解，结合前人关于ENO1在原核生物中降解RNA的发现，我们的研究结果揭示了ENO1功能在物种间的保守性。IRP1在线粒体铁代谢的稳态调控及肝脏生理功能中发挥重要作用，但是IRP1与线粒体之间的调控在肿瘤中的作用并不清楚。进一步分析线粒体内铁代谢相关蛋白，作者发现负责将铁从细胞质运送到线粒体内的通道蛋白Mfrn1受到IRP1的显著上调。利用体外培养的肿瘤细胞以及敲除小鼠诱导的肝癌模型体系，作者进行了系列实验，进一步证明了IRP1和Mfrn1在肝癌中作为抑癌因子发挥作用。机制分析发现，ENO1通过IRP1和Mfrn1影响过氧化脂质的累积和铁死亡过程，从而影响肿瘤细胞增殖，揭示了肝癌细胞中ENO1/IRP1/Mfrn1调控轴与铁死亡之间的潜在联系。临床病人样本分析表明，IRP1和Mfrn1在肝癌中呈低表达趋势，且IRP1和Mfrn1表达越低的病人其生存预后越不理想。综上，本研究阐明了代谢酶ENO1结合并降解RNA的新功能，结合其在原核生物中降解RNA的前人发现，揭示了ENO1在RNA降解功能上的保守性；同时本研究解析了ENO1/IRP1/Mfrn1调控轴在肿瘤中的作用，揭示了肿瘤发病的新机制，为肝癌等相关疾病的治疗提供了潜在新靶点。

中国科大在新型笼目晶格材料研究中取得重要进展

中国科大何俊峰课题组、乔振华课题组与美国加利福尼亚大学圣芭芭拉分校Stephen D. Wilson课题组合作，在新型笼目晶格材料研究中取得重要进展：利用具有实空间分辨能力的角分辨光电子能谱，首次实现对笼目晶格表面态电子结构的探测；实验排除了材料中其它非笼目晶格原子的影响，进而观测到笼目晶格本征的特征电子结构，并与理论计算结果一致。该研究成果发表在国际权威期刊《物理评论快报》上[*Physical Review Letters* 127, 266401 (2021)]。

随着许多新奇的物理现象在二维笼目晶格金属材料中被发现，笼目晶格逐渐成为凝聚态物理研究中一个新的前沿焦点。理论上，笼目晶格金属应该具有典型的特征电子结构。然而，在现实材料中，笼目晶格结构往往不会单独存在，而是与材料中其它的非笼目晶格原子共存。因此，材料体系中常伴随着面内或者层间的相互作用。这种相互作用会对二维笼目晶格结构的本征性质产生影响或破坏，使得材料的体态电子结构与理论预期的二维笼目晶格特征电子结构并不完全一致。为此，人们花费很多精力，试图减少材料中的面内及层间的相互作用，从而尽量突出二维笼目晶格的特征。

研究人员提出，二维笼目晶格的表面态也许可以成为研究其本征电子结构的新入手点。不同于材料的体态，笼目晶格表面态在面内遵从二维笼目晶格的周期势，但在垂直于表面方向受到的影响随着距离迅速衰减，因此可以避免层间相互作用的影响。而如果材料表面层没有其它的非笼目晶格原子，又可以避免面内相互作用的影响，从而可能体现出二维笼目晶格本征电子结构。然而，要想实现对二维笼目晶格表面态的探测仍面临着诸多挑战。最主要有两点：一个是对材料本身要求，在笼目晶格层中只存在组成其笼目晶格结构的原子，而没有其它多余的原子；另一个则是对探测手段的要求，需要角分辨光电子能谱仪能够实现实空间分辨，只针对二维笼目晶格表面进行探测。

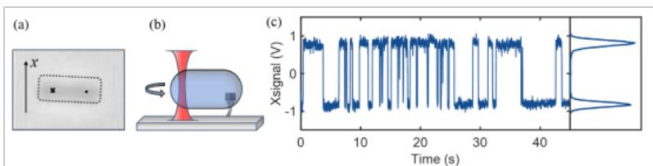
该工作中，研究人员使用小光斑的高分辨率角分辨光电子能谱，针对具有独立二维笼目晶格层的新材料 RV_6Sn_6 ($R=Gd, Ho$)进行了系统的研究。该实验的实空间分辨能力成功区分了材料不同解理面的电子结构，实现了二维笼目晶格面上表面态的成功探测，其特征电子结构得到了理论计算的证实。这一发现为研究二维笼目晶格本征特性提供了一条新的路径。

研究进展

中国科大发现马达转向别构调控的非平衡热力学新机制

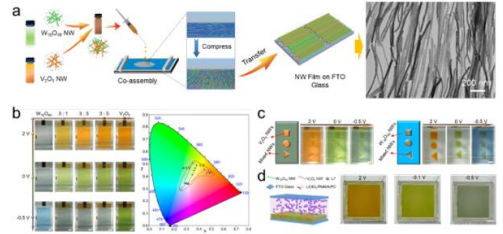
中国科大袁军华、张榕京课题组通过对细菌鞭毛马达在阻停时的转向动力学的精确测量，提出了马达转向别构调控的非平衡热力学新机制，该机制对其它分子马达调控的非平衡机制也有启发。该研究结果发表在《物理评论快报》上[Phys. Rev. Lett. 127, 268101 (2021)]。

细菌运动是其生存和感染宿主的关键。鞭毛驱动的细菌游动是细菌的典型运动机制。鞭毛马达有两大功能：产生力矩驱动鞭毛丝的转动而使细菌游动；根据环境调节其顺时针和逆时针转向的概率而调节细菌游动模式，从而使细菌游向有利生存环境、躲避有害环境。马达转向调控是一个典型的别构调控过程。别构调控是指蛋白质复合体(protein complex)的一个位点结合效应因子(effector)后，通过长程构象变化来影响其它位点功能的现象。这是在生命现象中广泛存在的一个重要调控机制，普遍存在于酶的活性调节、信号转导系统的受体活性调节、离子通道调控、基因表达调控等重要生理过程中。鞭毛马达动力学性质受其负载影响很大，以往研究了其转向调控从低到高负载下的动力学性质，但由于技术限制，对极高负载甚至是阻停下的转向动力学未有研究。该团队提出了使用光镊阻停鞭毛马达、并利用光镊的高时空分辨来对马达在阻停下的转向动力学进行高分辨研究的方法，精确测量了马达在阻停下的转向动力学性质。该团队进一步对比了其它负载下的动力学性质，提出了马达顺时针和逆时针转向力矩的不对称提供马达转向调控非平衡能量输入的新机制，一致地解释了马达在所有负载下转向调控的动力学性质。这一发现可启发研究其它别构调控过程的可能非平衡热力学机制，也解释了马达在两个转向力矩不对称性的重要生理意义。



图注 阻停下的马达转向动力学。(a) 阻停下的细菌场图像。“x”代表光镊位置，“.”代表胞体通过鞭毛丝粘住玻璃片的位置。(b) 实验概念图。(c) 一个典型的马达转向改变信号。纵轴代表光镊x信号输出，右边是对应的信号统计图。

中国科大研制新型多色显示和自供电电致变色器件



图注 基于 $W_{18}O_{49}$ 和 V_2O_5 纳米线共组装构筑多色显示器件及其性能调控

近日，中国科学技术大学俞书宏院士团队设计了一种新型的基于纳米线组装体的多色显示电致变色器件，该器件通过采用界面组装技术将 $W_{18}O_{49}$ 和 V_2O_5 纳米线共组装在一起，使该器件具有特定的光学、电学和多色显示的特性。与一般电致变色器件相比，该器件的优势体现在以下两个方面：(1)由于 $W_{18}O_{49}$ 和 V_2O_5 纳米线在同一外加电压下显示出不同的颜色，因此在施加2 V、0 V和-0.5 V偏压下，纳米线共组装体可以呈现出由橙色、绿色到灰色的动态颜色变化。通过控制两种纳米线的比例，可调控共组装薄膜的电致变色性能，包括颜色显示、透明度、响应时间和着色率；(2)可以通过LB技术在掩模板的辅助下构造各种图案和组份调控，以实现更复杂的色彩显示和信息传输。

同时，因电致变色器件大多基于脆性ITO基底制备，并需要外电源系统来驱动工作，影响了器件的柔性、独立性以及便携性。

为解决这一问题，该团队将原电池系统集成到基于高度稳定性和柔性的Ag纳米线(NWs)透明导电电极(TCE)和 $W_{18}O_{49}$ 纳米线电致变色薄膜中，成功构建了一种自供电柔性电致变色装置。在自供电柔性电致变色器件中，Ag纳米线发挥了两种作用，首先作为电极取代ITO衬底，然后与Al片耦合形成原电池两个工作电极。Ag纳米线与Al片的开路电压为~0.83 V，足以驱动 $W_{18}O_{49}$ 纳米线的着色。与外置电源不同，自供电的电致变色器件避免了内阻，其平均着色效率(CE)比外置电源提高了约20%，从~50.7 cm^2/C 提高到~62.2 cm^2/C 。柔性自供电的电致变色装置在450个电致变色循环周期后仅消耗~6.8 mg/cm^2 的铝片，成本仅为0.19美元/ cm^2 。此外，该便携式柔性自供电电致变色装置的尺寸可以扩大到 $20 \times 20 cm^2$ 。此外，该器件作为智能窗口表现出良好的太阳光辐射调控性能，相比于褪色状态，窗口着色时可以将模拟太阳光照射物体的平均温度从33°C降到25.6°C。

上述研究成果分别以“Manipulating Nanowire Assemblies toward Multicolor Transparent Electrochromic Device”和“Self-Powered Flexible Electrochromic Smart Window”为题发表在Nano Letters上，为高性能的多色显示和柔性自供电电致变色器件的研制提供了新的途径。