



中国科大在笼目结构超导体研究领域取得重要进展



图：笼目结构超导体中三重调制电荷密度波导致的电子向列序与超导电性的物理示意图

中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家研究中心、物理学院、中科院强耦合量子材料物理重点实验室陈仙辉、吴涛和王震宇等组成的研究团队，近日在笼目结构(kagome)超导体的研究中取得重要进展。研究团队在笼目超导体 CsV_3Sb_5 中观测到电荷密度波序在低温下演化为由three state Potts模型所描述的电子向列相，该向列相的发现不仅为理解笼目结构超导体中电荷密度波与超导电性之间的反常竞争提供了重要实验证据，也为进一步研究关联电子体系中与非常规超导电性密切相关的交织序(intertwined orders)提供了新的研究方向。相关研究成果于2月9日以“Charge-density-wave-driven electronic nematicity in a kagome superconductor”为题在Nature杂志上以“Accelerated Article Preview”的方式在线发表。

电子向列相是一种由电子自由度旋转对称性的自发破缺而产生的电子有序态，其广泛存在于高温超导体、量子霍尔绝缘体等电子体系。电子向列相与高温超导电性之间存在着紧密的联系，被认为是一种与高温超导相关联的交织序，是高温超导的理论研究中重大的科学问题和研究热点。探索具有新结构的超导材料体系，从而进一步研究超导与各种交织序的关联是当前领域的一个重要研究方向，其中一类备受关注的体系为二维笼目结构。理论预测在范霍夫奇点(van Hove singularities)掺杂附近，二维笼目体系可呈现出新奇的超导电性和丰富的电子有序态，但长期以来缺乏合适的材料体系来实现其关联物理。近年来，笼目超导体 CsV_3Sb_5 的发现为该方向的探索提供了新的研究体系。中科大超导研究团队在前期研究中已成功揭示了该体系中面内三重调制(triple- Q)的电荷密度波态(Phys. Rev. X 11, 031026 (2021))，以及电荷密度波与超导电性在压力下的反常竞争关系(Nat. Commun. 12, 3645 (2021))。

在这些基础上，研究团队充分结合了扫描隧道显微镜、核磁共振以及弹性电阻三种实验技术，针对 CsV_3Sb_5 中的电荷密度波态的演化进行了细致的研究。他们发现体系在进入超导态之前，三重调制电荷密度波态会进一步地演化成为一种热力学稳定的电子向列相，并确定转变温度在35开尔文左右。该电子向列相与之前在高温超导体中观测到的电子向列有所不同：高温超导体中的电子向列相是Ising类型的向列相，具有 Z_2 对称性；而在笼目超导体 CsV_3Sb_5 中发现的电子向列相具有 Z_3 对称性，在理论上被three state Potts模型所描述，因而也被称为“Potts”向列相。有趣的是，这种新型的电子向列相最近在双层转角石墨烯体系中也观察到。

这些发现不仅在笼目结构超导体中揭示了一种新型的电子向列相，也为理解这类体系中超导与电荷密度波之间的竞争提供了实验证据。之前的扫描隧道谱研究表明， CsV_3Sb_5 体系中可能存在超导电性与电荷密度波序相互交织而形成的配对密度波态(Pair density wave state, PDW)。在超导转变温度之上发现的电子向列序，可以被理解成一种与PDW相关的交织序，这一研究结果也为理解高温超导体中的PDW提供了重要的线索和思路。如何理解笼目结构超导体中超导电性及其交织序的形成机制还需要进一步的实验与理论研究。

研究进展

中国科大建立新的蛋白质从头设计方法

中国科学技术大学刘海燕教授、陈泉副教授团队采用数据驱动策略，开辟出一条全新的蛋白质从头设计路线，相关成果以“用于蛋白质设计的以主链为中心的神经网络能量函数”为题于北京时间2月10日发表于《Nature》。

蛋白质是生命的基础，是生命功能的主要执行者，其结构与功能由氨基酸序列所决定。目前，能够形成稳定三维结构的蛋白质，几乎全部是天然蛋白质，其氨基酸序列是长期自然进化形成。在天然蛋白结构功能不能满足工业或医疗应用需求时，想要得到特定的功能蛋白，就需要对其结构和序列进行设计。目前，国际上报道的蛋白质从头设计工作主要使用天然结构片段作为构建模块来拼接产生人工结构。然而，这种方法存在设计结果单一、对主链结构细节过于敏感等不足，限制了设计主链结构的多样性和可变性。蛋白质从头设计中最困难的问题，是如何充分地探索蛋白质主链结构空间，发现新颖的、“高可设计性”主链结构，对这一问题目前还缺乏系统性的解决方法。

中国科学技术大学相关团队长期深耕计算结构生物学方向的基础研究和应用基础研究；施蕴渝院士是国内这一领域的开拓者；刘海燕教授、陈泉副教授团队十余年来致力于发展数据驱动的蛋白质设计方法，经过长期不懈努力，建立并实验验证了给定主链结构设计氨基酸序列的ABACUS模型，进而发展了能在氨基酸序列待定时从头设计全新主链结构的SCUBA模型。SCUBA采用了一种新的统计学习策略，基于核密度估计（或近邻计数，NC）和神经网络拟合（NN）方法，从原始结构数据中得到神经网络形式的解析能量函数，能够高保真地反应实际蛋白质结构中不同结构变量间的高维相关关系，在不确定序列的前提下，连续、广泛地搜索主链结构空间，自动产生“高可设计性”主链。

理论计算和实验证明，用SCUBA设计主链结构，能够突破只能用天然片段来拼接产生新主链结构的限制，显著扩展从头设计蛋白的结构多样性，进而设计出不同于已知天然蛋白的新颖结构。“SCUBA模型+ABACUS模型”构成了能够从头设计具有全新结构和序列的人工蛋白完整工具链，是RosettaDesign之外目前唯一经充分实验验证的蛋白质从头设计方法，并与之互为补充。在论文中，团队报道了9种从头设计的蛋白质分子的高分辨率晶体结构，它们的实际结构与设计模型一致，其中5种蛋白质具有天然蛋白质中尚未观察到的新型拓扑结构。

《Nature》杂志的审稿人认为，“与现有方法不同，现有方法要么使用参数方程来描述预定义螺旋结构的空間，要么基于片段组装的方法依赖于已知蛋白质片段。SCUBA方法原则上允许人们探索任意主链结构，然后填充序列，允许人们设计比自然界中观察到的更广泛的蛋白质几何结构”；“蛋白质从头设计仍然具有挑战性，本工作中六种不同蛋白质的高分辨率设计是一项重要成就，表明此方法工作良好”；“本研究中报道的成功设计数量之多令人印象深刻，并提供了强有力的证据，证明了基础技术是鲁棒的。所采用的基于神经网络的能量项是新颖的，因为它们刻画了更传统的统计方法无法企及的多维特征，该方法具有足够的新颖性和实用性”。

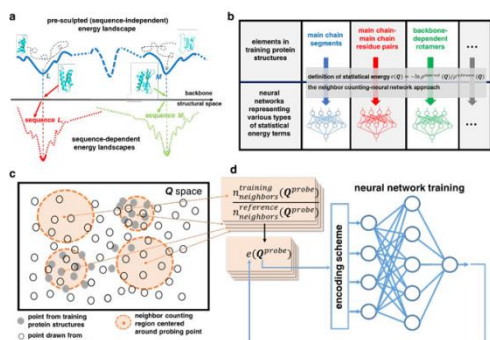


图1. 用SCUBA模型进行蛋白质设计的原理。(a) SCUBA主链能量面上的极小对应了蛋白质的可设计主链结构，即特定氨基酸序列下的最低自由能结构；(b) SCUBA中用神经网络表示的统计能量项；(c)和(d)用近邻计数（NC）-神经网络（NN）方法从蛋白质结构原始数据中学习解析能量函数的方法框架。

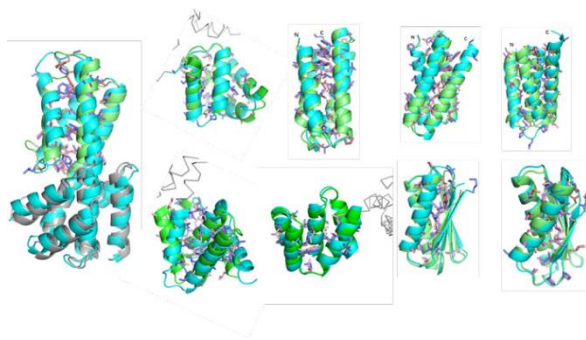


图2. 从头设计蛋白的高分辨率晶体结构（天蓝色）与设计模型（绿色）比较。



【科技冬奥】中国科大高精度光纤温度监测技术服务北京冬奥会



图注：自主研发的DTS设备



在“冰立方”冰壶赛场铺设用于冰体温度监测的通讯光纤

2月20日，北京2022年冬季奥运会顺利闭幕。冬奥会不仅是高水平运动员的赛场，也是最新科技成果的展示舞台，“科技冬奥”的理念始终贯穿整个冬奥的进程。其中，我校合肥微尺度物质科学国家研究中心陈旻教授、赵东锋教授团队、地球和空间科学学院王宝善教授团队自主研发的高精度光纤温度监测系统，在本届冬奥会国家游泳中心“冰立方”全程参与冰壶赛事保障，以科技力量服务冬奥会。

冰雪温度对冬奥赛事至关重要。针对冬奥场馆对冰雪温度全空间实时监测的需求，我校与中国地震局地震预测研究所密切合作，组建联合攻关团队，通过对专用激光光源系统、高精度信号解调算法、高速数据处理系统等关键技术进行攻关，研制了具有自主知识产权的分布式光纤温度传感（DTS）系统。该系统可以利用通信光缆实现测温范围-50至150℃，测温空间分辨率可达到0.4m，测量精度优于±0.1℃，综合性能达到国际先进水平。

冬奥会冰壶赛场对温度的要求非常严格。冰面的温度、场馆的湿度、空气温度、比赛场馆的形状都会影响冰面质量。随着比赛的进行，温度也会发生变化，需要相应地及时调节冰面的温度。在本届冬奥会开幕之前，团队在“冰立方”冰壶赛场冰面下方铺设约200m通讯光纤（相当于500个温度计），并部署了2套自主研发的DTS设备，在整个冬奥会期间对赛道的冰体温度进行空间和时间上的连续监测，及时了解冰体温度的微小变化。监测结果表明，冰壶比赛场地冰体温度（冰面下5cm）较为稳定（在-9℃至-10℃之间），场地的不同区域温存在微弱差异（约0.2℃），比赛后冰体温度略有升高（不超过0.8℃）。系统监测数据实时推送至“冰立方”场馆环境监控系统，全程保障冬奥会冰壶赛事的顺利进行。这是DTS技术首次应用于冬奥会冰雪温度监测。

DTS系统主要由合肥微尺度物质科学国家研究中心特任副研究员张强完成，与“冰立方”场馆监控系统的数据对接由地球和空间科学学院博士生孙天为完成。合肥微尺度物质科学国家研究中心硕士生谢鹜在闭环内全程参与了冬奥赛事保障。该工作得到了合肥微尺度物质科学国家研究中心、中国地震局地震预测研究所的资助和支持。