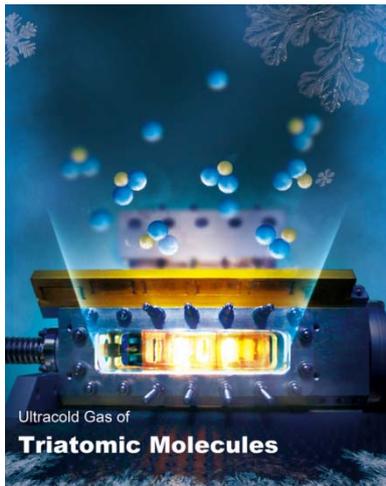




中国科大首次制备高相空间密度的超冷三原子分子系综



磁缔合制备超冷三原子分子系综的示意图

中国科学技术大学潘建伟、赵博等，利用相干合成方法在国际上首次制备了高相空间密度的超冷三原子分子系综。在该研究中，他们在基态双原子分子和原子Feshbach共振附近利用磁缔合技术从简并的钠钾分子-钾原子混合气中制备了超冷三原子分子系综，向基于超冷分子的超冷量子化学和量子模拟研究迈出了重要一步。北京时间12月2日，这一研究成果发表在国际权威学术期刊《科学》杂志上。利用高度可控的超冷分子来模拟复杂的难于计算的化学反应过程，可以对复杂系统进行精确的全方位的研究，因而在超冷化学和新型材料设计中具有广泛的应用前景。但由于分子内部的振转能级非常复杂，缺少激光冷却所需要的循环跃迁，导致通过直接冷却的方法来制备超冷分子非常困难。随着冷原子技术的发展，从超冷原子出发相干合成超冷分子为制备超冷分子系综提供了一条全新的途径。

1998年，麻省理工学院Wolfgang Ketterle研究组观测到原子中的Feshbach共振[Nature 392, 151 (1998)]。2003年，科罗拉多大学的Deborah Jin研究组利用原子的Feshbach共振发展了磁缔合技术来制备钾双原子分子[Nature 424, 47 (2003)]。从超冷原子中制备的双原子分子具有相空间密度高、温度低等优点，并且可以用激光将其相干地转移到振转基态。近年来多种碱金属原子的双原子分子先后在其他实验室中被制备出来，并被广泛地应用于超冷化学和量子模拟的研究中。

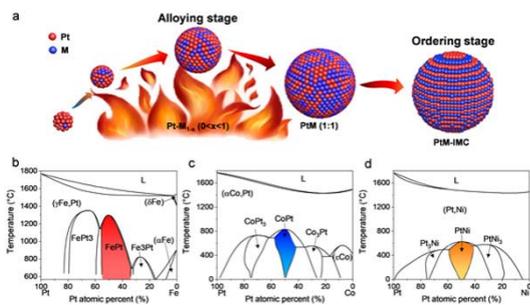
随着双原子分子研究取得的巨大成功，人们开始研究如何制备超冷三原子分子。但由于三原子分子极为复杂，无法进行理论计算，是否能够利用相干合成的方法制备三原子分子系综一直是一个开放问题。中国科大研究团队在2019年观测到超低温下钠钾分子和钾原子间的Feshbach共振 [Science 363, 261 (2019)]，为合成三原子分子奠定了基础。在此基础上，中国科大、中科院化学所联合研究组在2022年初采用射频合成技术，在钠钾基态分子和钾原子的Feshbach共振附近，实现了超冷三原子分子的射频合成 [Nature 602, 229 (2022)]。但由于三原子分子寿命短、合成效率低，只能通过双原子分子或原子的损失来获得合成三原子分子的间接证据，直接探测三原子分子并制备超冷三原子分子系综仍然是一个实验上的巨大挑战。

在该项研究中，团队从量子简并的钠钾分子和钾原子混合气出发，在钠钾分子和钾原子的Feshbach共振附近，通过缓慢地扫描磁场，将钠钾分子-钾原子散射态绝热地转移到三原子分子束缚态，从而首次成功利用磁缔合技术相干地制备了高相空间密度的超冷三原子分子系综。研究团队利用射频解离技术将三原子分子解离成自由的钠钾分子和原子，获得了三原子分子的解离谱，从而实现了三原子分子的直接探测。实验结果显示，所获得的三原子分子气的相空间密度比其他方法提高了约10个量级。超冷三原子分子系综的制备为模拟量子力学下三体问题铺平了道路，所获得的高相空间密度也使得制备三原子分子的玻色-爱因斯坦凝聚成为可能。审稿人一致认为这一工作是超冷分子研究领域的一个里程碑，为超冷化学和量子模拟的研究开辟了新的方向。



研究进展

中国科大在金属间燃料电池催化剂形成机制理解和合成方面取得进展



拆合金化和有序化步骤示意图及PtFe、PtCo和PtNi相图。

近日，中国科学技术大学梁海伟教授课题组使用原位X射线衍射技术研究了金属间化合物（IMCs）催化剂在高温下的形成机制，理解了相变温度依赖的结构演变过程，并通过拆合金化和有序化步骤，实现了高度有序铂基合金催化剂的制备。所制得的催化剂展现出优异的低铂燃料电池性能。该研究成果以“Phase diagrams guide synthesis of highly ordered intermetallic electrocatalysts: separating alloying and ordering stages”为题，发表在国际期刊《Nature Communications》上。

研究人员基于对Pt-M结构演化过程的基础性理解，获得了制备高度有序Pt-M催化剂的指南：1）首先通过高温过程（高于相变温度）实现高度合金化，以满足IMCs结构的元素计量比；2）然后降温至相变温度以下，从而获得相变热力学驱动力。研究人员针对性地设计了不同的合成方案：对于Pt-Fe，直接将其前驱体进行长时间高温退火同时促进合金化和有序化，就可以得到高度有序、小尺寸的PtFe催化剂；对于Pt-Co，则通过降低冷却速率使其兼顾合金化和有序化两者的停留时间，制备了高度有序PtCo催化剂；而对于PtNi，需要进一步提高退火温度促进其合金化，随后在低于相转变温度以下进行超长时间保温以弥补较慢的原子有序化过程，最终获得了有序PtNi催化剂。

研究人员对合成的Pt-M IMC催化剂进行了电催化性能表征。在旋转圆盘电极测试中，PtFe、PtCo和PtNi均表现出优于商业Pt/C的活性。其中，由于PtFe催化剂高度有序和更小尺寸的优势，其展示出最佳的质量活性和比活性，并表现出良好的稳定性。进一步将PtFe和商业Pt/C进行实际燃料电池表征，PtFe阴极在氢-氧电池展现出优异的质量活性（0.96 A/mgPt），并且低载量PtFe阴极在氢-空电池表现出与高载量商业Pt/C阴极相当的功率密度。在经历加速耐久性测试以后，氢-氧电池测试中质量活性仍然保持了84%，氢-空电池中，在0.8 A/cm²的电流密度下电压损失仅为15 mV。

中国科大发现生物大分子凝聚态调控细胞命运可塑性

合肥微尺度物质科学国家研究中心姚雪彪、刘行联合团队阐明了EB1蛋白相分离调控纺锤体动力学与细胞分裂命运抉择的物理化学机制，向解析生物大分子凝聚态调控细胞命运可塑性理论研究迈出了重要一步。这一研究成果于北京时间12月20日发表在国际著名学术期刊《自然-细胞生物学》杂志上。

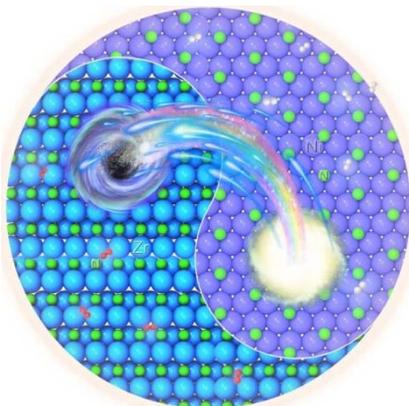
中国科大细胞动力学研究团队在解析细胞分裂微管动力学机制时于2009年发现与克隆了一个新颖的EB1结合蛋白TIP150 [EMBO Rep. 10, 857 (2009)]。TIP150含有典型EB1结合蛋白基序SxIP，负责招募微管解聚酶MCAK，在动态组装微管的正末端形成催化区室。在此基础上，研究团队在2012年采用单分子技术TIRFM与FRET，解析了EB1与TIP150的动态作用机制与化学基础 [PNAS. 109, 16564 (2012)]。由于EB1选择性识别与结合正在聚合的动态微管结构，EB1的构效关联研究也成为解析微管Dynamic Instability的有效路径。但是EB1含有较长的柔性区域，无法获得全长蛋白的三维结构，研究团队利用活细胞光敏定位超高分辨显微成像与荧光蛋白互补策略，发现了柔性区域碱性氨基酸在EB1二聚化与调控微管动态性的功能 [MBoC. 25, 4166 (2014)]。利用多色单分子分析、非天然氨基酸嵌入与三维类器官多维度成像等方法，微尺度联合团队揭示了EB1第66位赖氨酸动态巴豆酰化修饰与微管结合的动态调控机制及其对细胞分裂纺锤体定向稳定性维系的作用机制 [Nature Chem Biol. 288, 1314 (2021)]。

随着结构照明成像技术的发展，微尺度联合团队发现了EB1蛋白在活细胞动态微管追踪过程的液滴表征，利用基因编辑、物理化学模拟碱性氨基酸的丰度与间隔，并结合超高分辨成像，揭示了EB1蛋白的相分离特征与凝聚态物质基础，解析了相分离驱动EB1蛋白的微管正端追踪功能。至此，微尺度联合团队阐明了EB1蛋白相分离调控纺锤体微管可塑性的物理化学机制，向解析生物大分子凝聚态调控细胞命运可塑性理论研究迈出了重要一步。此外，杂志同期发表了瑞士保罗谢尔研究所和苏黎世联邦理工学院以及荷兰代尔夫特理工大学的两篇合作论文，他们利用低等真核细胞酵母，证明了EB1酵母同源蛋白的相分离特征。



研究进展

中国科大研制出完全非贵金属驱动的碱性膜燃料电池



图注：等离子体增强化学气相沉积制备的 Ni_3N 和 ZrN 用于AEMFCs。

近日，中国科学技术大学高敏锐教授课题组设计并研制了一种完全由非贵金属驱动的碱性膜燃料电池（AEMFC）。该电池以 Ni_3N 作为阳极、 ZrN 作为阴极，在氢气-氧气和氢气-空气条件下分别展现了 256 mW cm^{-2} 和 151 mW cm^{-2} 的功率密度。相关成果以“Plasma-Assisted Synthesis of Metal Nitrides for an Efficient Platinum-Group-Metal-Free Anion-Exchange-Membrane Fuel Cell”为题发表在国际知名期刊《Nano Letters》上。

研究人员利用旋转圆盘电极系统评估了 Ni_3N 和 ZrN 在碱性电解质下氢气氧化（HOR）和氧气还原（ORR）性能。结果表明， Ni_3N 和 ZrN 分别展现了优异的HOR活性和ORR活性，接近贵金属Pt/C催化剂，并且非常稳定。基于此发现，研究人员将 Ni_3N 和 ZrN 分别用作阳极和阴极催化剂组装到AEMFC中，在氢气-氧气和氢气-空气下分别获得 256 mW cm^{-2} 和 151 mW cm^{-2} 的功率密度，并能够稳定的工作25个小时性能不衰减。这是目前完全非贵金属催化剂驱动的AEMFCs所报道的最佳值之一。

借助理论计算，研究人员发现氮元素插入到金属晶格的间隙位点中，会优化金属位点的电子结构，使得金属位点的d带中心进一步远离费米能级，从而减弱了 Ni_3N 中的Ni活性位点对H中间体的吸附能，并且使得 Ni_3N 展现出了对OH中间体优异的吸附能力，从而赋予 Ni_3N 优异的碱性HOR活性。此外，N的存在也削弱了 ZrN 中的Zr活性位点对O中间体的吸附能，使得其接近最优的O吸附能，从而带来优异的碱性ORR活性。

中国科大在低维光伏材料点缺陷性质研究中取得新进展

近日，中国科学技术大学陈涛教授课题组在硒硫化锑点缺陷性质研究中取得进展。该团队通过深能级瞬态光谱技术探测温度驱动的硒硫化锑点缺陷特性，再结合退火过程中材料组分变化，揭示其点缺陷的形成和演化机制。研究发现：初始水热沉积导致高形成能点缺陷的形成，这是在水热条件下驱动离子随机沉积的结果；后退火及薄膜的结晶过程导致硫和硒阴离子的损失并产生空位缺陷（ $\text{V}_{\text{S(e)}}$ ）；由于阳离子/阴离子反位缺陷形成能较低，锑离子迁移并填充阴离子空位，最终形成 $\text{Sb}_{\text{S(e)}}$ 反位缺陷。该缺陷演化机制为设计薄膜制备方法以抑制深能级点缺陷的形成提供了关键参考依据。相关成果以“Thermal-Driven Point Defect Transformation in Antimony Selenosulfide Photovoltaic Materials”为题发表于Advanced Materials。

陈涛教授课题组近年来致力于锑基光伏材料与器件方面的研发工作，2020年率先实现该类太阳能电池10%瓶颈效率突破(Nature Energy, 2020, 5, 587)，证实了该材料的开发价值。作为一种新型光伏材料，在深能级点缺陷性质研究方面，该团队相继发现一系列有意义的现象。发现富S的硫化锑中存在的 V_{Sb} 和 Sb_{Sb} 缺陷与富Sb的硫化锑薄膜中存在的 V_{S} 和 Sb_{S} 缺陷相比，后者捕获截面大、缺陷密度高，陷阱能级更接近费米能级，会加剧载流子复合，从而揭示了富S的硫化锑光电性能优异的原因（Nature Communication, 2021, 12 3260）。在硒硫化锑中，适当的增加硒/硫比可以抑制缺陷的产生（Advanced Materials 2021, 33, 2006689），以及率先在实验中观测到硒化锑中两性缺陷的存在（Advanced Science 2022, 9, 2105268）。这些研究结果拓展了对半导体材料深能级点缺陷的认识。

