

新策略揭示量子退相干复杂性

为新兴量子技术奠定化学基础

科技日报讯(记者张梦然)美国罗切斯特大学研究人员报告了一种新策略,用于了解在具有完全化学复杂性的溶剂中,分子如何失去量子相干性。这一发现为定制量子相干性分子,以及通过化学设计调节量子相干性打开了大门。研究成果发表在新一期《美国国家科学院院刊》上。

量子叠加的特性是新兴量子技术的基础,有望改变计算、通信和传感等

多领域。但量子叠加面临着一个重大挑战:量子退相干。在此过程中,量子态的微妙叠加会在与周围环境相互作用时被破坏。

科学家需要理解和控制量子退相干,这需要设计出具有特定量子相干特性的分子来实现。为此,科学家先要了解“光谱密度”,这个量概括了环境中分子移动速度以及量子系统相互作用的强度。

研究人员此次开发了一种新方法,通过简单的共振拉曼实验,提取溶剂中分子的光谱密度,从而捕获化学环境的全部复杂性。现在,他们已可绘制退相干路径,将分子结构与量子退相干联系起来。

该团队使用这一方法首次展示了胸腺嘧啶(DNA的组成部分之一)中的电子叠加是如何吸收紫外线的。他们发现,分子中的一些振动主导了退相干

过程的初始步骤,而溶剂主导了后期阶段。胸腺嘧啶的化学修饰可显著改变退相干速率,胸腺嘧啶环附近的氢键相互作用,则导致更快的退相干。

研究人员指出,分子结构决定物质的化学和物理性质。这一原则指导着医学、农业和能源应用分子的现代设计。新研究为理解控制量子退相干的化学原理开辟了道路,未来可利用这一策略来开发具有强大相干特性的分子。

个头小 能量大 2023年最“炫”的六大分子

今日视点

◎本报记者 刘霞

近日,美国化学会旗下C&EN杂志公布了2023年最“炫”的分子榜单。尽管这些分子很小,但其能量却很大,有些甚至可能改写教科书。

由茂金属弯曲而成的环茂烯

日本冲绳科学技术研究所与德国和俄罗斯的科学家携手,通过将18个茂金属单元弯曲成一个纳米级的环,制成了一种新型的超大夹层复合物环烯。他们将金属铈、钆或铟等夹在环辛四烯层之间,庞大的三异丙基甲硅烷取代基迫使茂金属在堆叠时弯曲成环,制成了这些环烯。

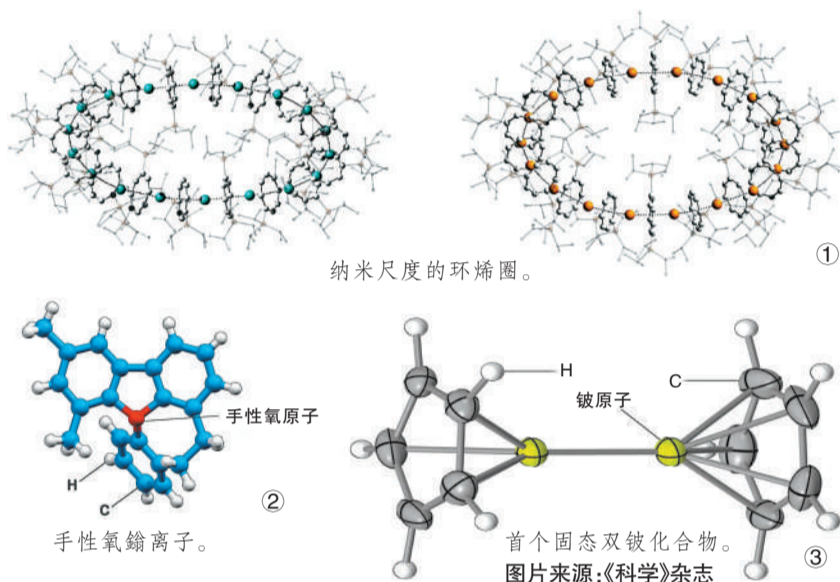
茂金属是一种有机金属化合物,以其多功能性和特殊的“三明治”结构而闻名。科学家对金属有机化合物化学性质的开创性研究曾赢得1973年诺贝尔化学奖。

这一成果今年8月发表于《自然》杂志。研究团队指出,这个环状“三明治”化合物的诞生为进一步创新功能有机金属材料打开了大门,这些材料可广泛应用于医学和新能源领域。

打破八电子规则的碳烯

根据所谓的八电子规则,碳通常有8个价电子,但科学家制造出了一种新化合物:结晶双氧化碳烯,其碳原子只有4个价电子。相关研究成果发表于9月20日出版的《自然》杂志。

在这项研究中,美国加州大学圣迭戈分校盖·伯特兰德团队创造出了一个带有庞大取代基的碳烯,随后将其氧化,接着移除了一个氧化物阴离子,留下没有非键合电子的碳烯。碳烯现在是化学中强有力的工具,在材料和医学



科学中也有广泛应用。

创建共价有机框架的索烃

由美国加州大学伯克利分校教授奥尔玛·亚吉领导的团队,使用索烃这种像围栏链条一样互锁的分子,制造出了一种新型共价有机框架。其中每个亚单位都是围绕铜离子缩合前体而形成的三环多面体网络,移除铜模板离子使多面体能够移动而不分离,从而使材料柔软且富有弹性,可用于制造过滤膜和柔性机器人等。

相关研究成果发表于今年1月出版的《自然·合成》杂志。

稳定的手性氧铈离子

提起手性,碳通常会从人们的脑海中浮现出来,但其他原子也可形成手性中心。

英国牛津大学和科罗拉多州立大学联合研究团队3月在《自然》杂志发表论文称,他们合成出了一种稳定的氧铈离子。其中1个氧原子与另外3

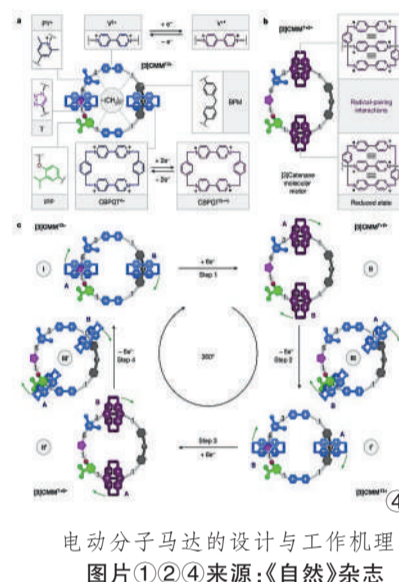
个原子相连,而且氧原子是唯一的手性中心。实验证明,该化合物是目前所知唯一一种构型稳定且氧原子作为唯一手性中心的化合物,填补了氧原子立体化学研究领域的空白,是分子手性领域的一大基础性突破。

这些结果可拓宽科学家对氧铈离子的了解,为其未来在有机合成工作中的运用开辟新途径。由于手性在催化、医学和材料中的重要性,未来研究人员将继续探索手性含氧原子化合物的性质。

安全键合的固态双铈化合物

铈是一种坚固且轻质的碱性稀土金属,被广泛应用于从电信设备到电脑、手机等诸多领域。它还与其他金属混合,制成合金,用于制造陀螺仪和触点等。

科学家认为,如果能将两个铈原子相互结合,得到的化合物会很有用。在一项最新研究中,英国牛津大学化学家首次实现了让两个铈原子在室温下安全地键合在一起,创造出了双铈铈,这是首个含有铈—铈键的固态化合物。相关研究论文发表于6月出版的《科学》杂志。



研究团队指出,此前无法成功让两个铈原子结合的原因之一在于其毒性。但他们发现,遵循一定规则就能以安全方式进行合成,而且数学模型显示,所得化合物很稳定。

由电驱动分子马达

现今大多数分子马达由化学燃料或光驱动,但来自美国西北大学、加州理工学院、緬因大学的联合研究团队历时4年,设计并合成了一种基于索烃的电动分子马达。在溶液中,索烃两个较小环可沿较大的环进行电驱动单向旋转运动,整个过程不产生废弃物。

研究团队指出,用电作为动力源可以使分子马达更容易整合入其他技术当中。相关论文发表于今年1月出版的《自然》杂志。

研究人员表示,他们把分子纳米技术提升到了一个新高度,使用电子有效驱动分子马达,就像宏观世界里的电动马达一样。虽然这一化学领域还处于起步阶段,但未来这些微型马达有望给医学领域带来巨大变化。

靶向凝血酶的口服环肽药物问世

科技日报讯(记者张佳欣)大量蛋白质对于治疗疾病至关重要,然而要将其制成口服药,几十年来一直难以取得突破。这些蛋白质的给药途径一般是注射,对患者来说很不方便。据《自然·化学生物学》杂志28日报道,瑞士洛桑联邦理工学院科学家在药物开发方面取得了一个重要里程碑,为一类新的口服药物打开了大门,解决了制药业长期存在的一大挑战。

研究人员表示,有许多疾病靶点已

经确定,但无法开发出具有稳定性的靶向治疗药物。环肽是一种多功能分子,以其高亲和力和特异性而闻名,擅长与靶点蛋白表面结合。但开发环肽作为口服药物十分困难,因为它们存在被胃肠道迅速消化或吸收不良等问题,极大地限制了其应用。

此次研究重点是环肽,目标是凝血酶。凝血酶是关键的疾病靶标,在血液凝固中发挥核心作用。为了产生能够靶向凝血酶且足够稳定的环肽,研究人

员开发了一种两步合成策略,以合成大量具有疏水性的环肽,提高了这些环肽在口服时的代谢稳定性。

新方法包括两个步骤,在同一个反应容器中进行,被称为“两步一锅法”。第一步是合成线性肽,然后经过化学过程形成环状结构,即“环化”;第二步,环化的多肽要经历酰化,这是一个将羧酸附着在其上的过程,进一步使分子结构多样化。

使用该方法,研究人员生成了一个包含8448个环肽的综合库,平均分子

质量约为650道尔顿(Da),仅略高于建议口服小分子的最大限制500Da。

在大鼠身上测试时,口服环肽药物生物利用度高达18%,这意味着当口服环肽药物时,18%的环肽药物成功地进入血液并起到治疗作用。口服环肽通常的生物利用度低于2%,18%意味着实质性进步。

研究团队将环肽变成了口服给药,为治疗一系列疾病开辟了可能性。该方法还可以改造针对更广泛的蛋白质,有望为医疗领域带来前所未有的突破。

科技日报北京12月29日电(记者张佳欣)向人体运送药物的主要挑战是能否将药物准确送达病灶位置,同时确保它们留在病灶发挥作用。虽然运输药物已经取得进展,但监测药物仍存在挑战。它往往需要像活检这样的侵入性程序。据发表在《ACS应用纳米材料》杂志上的一项研究,美国纽约大学坦登工程学院团队开发出能自我组装成纤维的蛋白质,或可用于多种疾病的治疗。

这是一种氟化的生物材料,由天然蛋白质组成,可包裹和输送多种治疗疾病的药物。研究团队在其中引入了非天然氨基酸——三氟亮氨酸。由于氟在人体内很稀有,当人体接受19FMR(利用氟-19核磁共振技术进行成像)扫描时,生物材料可发光。医生据此可确保药物留在治疗区域。

研究人员表示,作为一种治疗药物,这种蛋白质不仅可治疗癌症或关节炎,而且它可被人体分解,不会产生任何不良影响。它消除了对侵入性手术或活组织检查的需要,监测过程也相对容易。研究团队已经在小鼠模型上对研究结果做了验证,并计划在患有特定疾病的小鼠身上进行实验,以证明这种蛋白质治疗疾病的能力。

在发表于《生物大分子》上的另一篇论文中,该实验室通过计算设计创造出可形成水凝胶的蛋白质,将其凝胶化的上限温度提高到33.6°C。这种水凝胶能保持凝胶状态而不溶解,温度也能保持稳定。

由于这种稳定性,该蛋白质可用于局部治疗,包括愈合伤口。除了提高耐热性,这种新的蛋白质凝胶化速度比以前的版本快得多,因此在医疗应用方面效率更高。

研究人员认为,新计算机模型能制造出稳定的凝胶,以极高的成功率生成序列并创造出具有新特性的蛋白质。这将加快制造速度,彻底改变制造生物材料的方式。

蛋白质,这种组成人体细胞、组织的重要成分,如今也成为治疗疾病、帮助愈合的利器。由天然蛋白质组成的氟化材料,包裹着药物进入人体后,可在磁共振技术下成像,不用进行有创检查,医生就能确定药物位置;研究人员设计出的另一种蛋白质,能发出荧光,可视化变得更加容易……在计算机模型的帮助下,研究人员可以高效生成各种神奇的蛋白质,它们具备可供人类利用的特殊功能,从而制造出各种医疗用高性能材料。

新方法高效无创产生犬诱导多能干细胞

有望为动物带来兽医再生治疗

科技日报讯(记者张梦然)日本大阪都立大学科学家设计了一种高效、无创、无痛的方法,从尿液样本中重新编程犬类干细胞,使这些毛茸茸的人类伙伴兽医再生治疗又近了一步。研究成果发表在新一期《干细胞报告》上。

诱导多能干细胞(iPSC)已广泛应用于人类生殖医学研究。随着先进医疗护理对狗和猫的重要性日益增加,人们也期望能够为这些伴侣动物开发出iPSC新疗法。不幸的是,与人类相比,犬类细胞的重编程效率较低,限制了可用于生成iPSC的犬类细胞类型。

iPSC诱导通常涉及使用来自不

同物种的饲养细胞。然而,考虑到相关风险,通常尽量减少异种成分,这意味着需要在不使用饲养细胞的情况下,提高对各种类型的犬细胞进行重编程的效率。

大阪都立大学兽医研究团队确定了6个重编程基因,与使用成纤维细胞的传统方法相比,它们可将生成的犬iPSC提高约120倍。iPSC是采用非侵入性、简单且无痛的方法从尿液来源的细胞中产生的。

此外,研究人员成功地在没有饲养细胞的情况下生成了犬类iPSC,这是之前不可能实现的任务,是再生医学和兽医遗传疾病研究领域的一大进步。

研究称女性眼泪可降低男性攻击性

科技日报讯(记者张佳欣)当有人开始哭泣时,其他人常常会感到同情和关心,但其背后的生物学原因不仅仅是激发了同情心。据发表在美国《公共科学图书馆·生物学》杂志上的论文,以色列魏茨曼科学研究所研究人员发现,人类的眼泪含有一种可抑制攻击性的物质。闻女性的眼泪可使男性的攻击性降低40%以上,并促使大脑发生相应的变化。随着时间的推移,眼泪可能进化出具有保护哭泣的婴儿免受伤害的作用。

大量研究表明,啮齿类动物的眼泪中含有化学物质。例如,雌性小鼠的眼泪可减少雄性之间的争斗;处于下属地位的雄性鼯鼠会“以泪洗面”,这样占主导地位的雄性鼯鼠就会减少对它们的攻击。

为了弄清楚人类是否也有类似的反应,研究小组首先将25名男性志愿者暴露在“情绪化”的泪水或生理盐水中。志愿者无法辨别他们闻的是泪水,因为这两种物质都是透明、无味的。这些泪水来自6名女性志愿者,

她们独自观看悲伤的电影,并用瓶子收集了眼泪。

这些男性参加了一种用于心理学的电脑游戏,该游戏可通过不公平地扣除玩家分数来引发攻击行为。但是,在男人们闻到眼泪后,这种寻求报复的攻击性行为在游戏中下降了43.7%。

这似乎与啮齿动物相同,但人类的鼻子中没有一种名为犁鼻器的结构。这种结构在人类物种的进化过程中消失了,它可检测到无味的化学信号。为了找出原因,研究人员将泪水放在实验室培养皿中的62个嗅觉感受器上,发现有4个感受器被泪水激活,但生理盐水不能。这表明它们或会对抑制攻击性的物质作出反应。

核磁共振扫描成像显示,当男性在游戏中受到挑衅时,与攻击性有关的前额叶皮层和前脑岛变得更加活跃,但如果他们闻到眼泪,效果就不会那么强烈了。

研究人员强调,哭泣的社会背景非常复杂,减少攻击性可能只是眼泪的众多潜在功能之一。

科学家开发出自组装发光治疗蛋白

能监测药物到达病灶区域情况

总编辑 卷点
环球科技24小时
24 Hours of Global Science and Technology

国际要闻回顾

(12月25日—12月29日)

科技轶闻

科研机器人几分钟复现诺奖成果

一个由GPT-4驱动的“AI化学实验室”,被命名为“Coscientist”,由来自美国卡内基梅隆大学和翡翠云实验室的研究团队共同创建,可在4分钟就复现获得诺贝尔化学奖成果——钼催化交叉偶联反应,且一次成功。

科技聚焦

新技术将太赫兹波放大3万多倍

韩国蔚山国立科技大学与美国

田纳西大学、橡树岭国家实验室的研究团队合作开发出一种新技术,成功优化了专门用于6G通信的太赫兹(THz)纳米谐振器,将太赫兹电磁波放大3万倍以上。这一突破有望为6G通信频率的商业化带来变革。

前沿探索

全光开关处理器比传统芯片快千倍

由于电子开关的限制,传统的计算机处理器几乎已经达到了“时钟速度”的上限。美国能源部阿贡国家实验室和普渡大学的研究人员最近发明

了一种新型的全光开关,这种开关用光而不是电来控制数据在芯片上的处理和存储方式。研究人员称,这意味着理论上能以比传统计算机芯片快1000倍的速度操作这些芯片。

AI展示类脑记忆形成过程

韩国基础科学研究所认知与社会性中心研究人员发现,人工智能(AI)模型的记忆处理与人脑海马体之间存在惊人的相似性。这一新发现为记忆巩固提供了新的视角。记忆巩固是AI系统中将短期记忆转变为长期记忆的过程。

技术刷新

固态钠电池实现创纪录金属循环率

美国马里兰大学开发出一种固态钠电池架构,其性能优于目前的钠离子电池。通过使用钠金属作为负极以获得更高的能量密度,该电池实现了创纪录的室温下固态钠—金属循环率。而且,电池使用更稳定的陶瓷电解质,降低了易燃性风险。

分子“手提钻”利用振动撕裂癌细胞

某些分子受到光刺激会强烈振动,美国莱斯大学科学家发现了利用分子这一性能来摧毁癌细胞的新方法。这一研究显示,该方法对实验室培养的人类黑色素瘤细胞的有效性达到99%,并且半数的黑色素瘤模型实验鼠经治疗后不再患癌症。

(本栏目主持人 张梦然)