

## “小柯”秀

一个会写科学新闻的机器人

【自然】

富锂电池材料  
氧轨道层析重构

美国卡内基梅隆大学 Venkatasubramanian Viswanathan 团队报道了富锂电池材料中氧轨道的层析重构方法。相关研究成果近日发表于《自然》。

重型运输和航空的电气化需要新的策略来提高电极材料的能量密度。使用阴离子氧化还原是实现这一宏伟目标的一种可能途径。然而,由于氧化还原反应相关的电子轨道不能通过标准实验测量,关于 O<sup>2-</sup>/O<sup>-</sup> 氧化还原范例的有效性以及阴离子容量起源的替代解释仍然存在。

该研究中,利用高能 X 射线康普顿测量和第一性原理模型,研究人员展示了如何对处于可逆和稳定阴离子氧化还原活性中心的电子轨道进行成像和可视化,并确定其特征和对称性。研究人员发现康普顿分布随锂离子浓度的差异变化对电子波函数的相位敏感,并带有静电和共价键效应的特征。

该研究不仅在原子尺度上提供了富锂电池的工作原理,而且还提出了改进现有电池材料和设计新电池材料的途径。

相关论文信息:

<https://doi.org/10.1038/s41586-021-03509-z>

【美国化学会志】

## 生物传感用复合液晶乳液问世

美国麻省理工学院 Timothy M. Swager 团队报道了一种生物传感用复合液晶乳液。相关研究成果发表在近日出版的《美国化学会志》上。

该研究描述了一种基于动态复合液晶(LC)乳液的高响应光学生物传感器。这些乳液制备简单,由不互溶的手性向列相液晶(N\*)和氟碳油组成。在该研究工作中,研究人员利用 N\* 选择性反射来建立一个新的感知范式。检测策略是基于硼酸聚合物表面活性剂的 LC/ 水界面活性的变化,该变化是由在 LC 界面与 IgG 抗体的可逆相互作用引起的。

由于聚合物结构中存在强大的手性掺杂,因此该生物分子识别方式可以改变 N\* 组织的节距长度。研究人员证明这些界面触发的反射变化可以作为检测食源性病原体沙门氏菌的有效光学读出。

相关论文信息:

<https://doi.org/10.1021/jacs.1c04115>

【德国应用化学】

电致变色聚阳离子有机硼大环  
化合物具有多种氧化还原态

美国罗格斯大学纽瓦克分校 Frieder Jäkle 团队报道了具有多种氧化还原态的电致变色聚阳离子有机硼大环化合物。

相关研究成果发表在近日出版的《德国应用化学》上。

聚阳离子大环化合物因其氧化还原性能而显示出独特的分子开关能力,因而具有很大的吸引力。尽管已经开发出了各种各样的聚阳离子大环化合物,但是基于阳离子硼体系的大环化合物仍然非常有限。

该文介绍了通过将有机硼部分引入共轭有机硼大环骨架来开发新型多阳离子大环的策略。这些大环由 4 个联吡啶硼单元组成,这些单元由苄和缺电子芳基硼烷或富电子芳胺部分连接。

电化学研究表明,大环化合物经历了可逆的多步氧化还原过程,最多转移 10 个电子。研究通过光谱电化学研究证明了可切换的电致变色行为,并通过计算电子跃迁 DFT 方法证明观察到的颜色变化是合理的。

相关论文信息:

<https://doi.org/10.1002/anie.202105852>

更多内容详见科学网小柯机器人频道:  
<http://paper.sciencenet.cn/Alnews/>

精神神经疾病重要靶点  
获深入解析

(上接第 1 版)

随着研究的进一步深入,就在大家认为已经取得了非常好的蛋白样品时,研究团队又陷入了数据收集的困境。“由于 C 类 GPCR 具有很强的构象灵活性,很难收集到高分辨率的数据,需要通过收集海量的数据,才能选出最优数据。”吴蓓丽说。

课题组除了教师外,还有多位博士生将主要精力放在了这项研究上,看到多年努力始终没有取得重大突破,面对毕业等各方面的压力,学生们也一度感到苦恼。

为此,课题组鼓励鼓励学生成立互帮互助小分队,彼此鼓励,互相学习。最终又经过一年多的探索,解析了 6 个电镜结构,“每一个结构后面都有海量数据,少则需要 3-4 天的收集时间,多则需要 7-8 天的收集时间。”吴蓓丽说,为了争分夺秒地整理数据,这些学生在实验室度过了大年三十。

在吴蓓丽看来,这些问题的突破也得益于大团队的研究成果,“很多科学问题是触类旁通的,随着整个平台成果的积累,很多难题也就迎刃而解了。”

“mGlu 还有很多科学问题待解,未来我们希望在回答科学问题的同时,辅助药物研发,这是我们最主要的方向之一。”吴蓓丽表示。

相关论文信息:

<https://doi.org/10.1038/s41586-021-03641-w>

<https://doi.org/10.1038/s41586-021-03495-2>

## 钙、维生素 C、纤维、矿物质……

## 不吃早餐让成人错过关键营养

本报讯 牛奶中的钙,水果中的维生素 C,强化谷物中的纤维、维生素和矿物质往往是由早餐提供的。一项针对 3 万多名美国成年人的数据分析显示,不吃早餐可能会导致成年人一天的营养摄入量不足。相关研究近日在线发表于《营养学会学报》。

“我们看到,如果你不吃早餐常见的食物,你往往在一天其余的时间里也不会吃它们。”俄亥俄州立大学医学院医学营养学教授、该研究资深作者 Christopher Taylor 说,“因此,这些常见的早餐营养成分就成了营养缺口。”

根据美国农业部最新的饮食指南,钙、钾、纤维和维生素 D,以及孕妇需要补充的铁,被认为是美国“关乎公共健康的饮食成分”,因为这些营养素的缺乏会导致健康问题。

大多数与早餐相关的研究都集中于不吃早餐对在校儿童的影响,包括难以集中注意力和行为问题。“现在,我们看到了成年人不吃早餐的真正影响。”Taylor 说。

Taylor 与俄亥俄州立大学健康和康复科学院的研究生 Stephanie Fanelli 和 Christopher Walls 共同完成了这项研究。研究人员使用了来自全美健康与营养调查(NHANES)的数据。该调查每年通过访谈、实验室检测和身体检查等方式,收集该国约 5000 个代表性样本的健康信息。

这项研究的样本包括 30889 名 19 岁及以上的成年人,他们在 2005 年至 2016 年间参与了这项调查。研究人员分析了 24 小时饮食回访参与者的数据,这是 NHANES 调查的一部分。

“在回访中,参与者自己认定是吃了一顿饭还是一份零食,并告知我们在什么时间吃了他们报告的任何食物。”该研究第一作者 Fanelli 说,“这就是我们判断一个人是否吃早餐的方法。”

在这一研究样本中,15.2%的参与者报告称不吃早餐。研究人员利用膳食研究食品和营养数据库

库及每日膳食指南,将这些食物数据转化为营养估计数据和“我的餐盘”的等量数据,然后将这些估算数据与美国国家科学院食品和营养委员会建议的营养摄入量进行比较。

结果显示,从纤维、镁到铜和锌,在几项关键的推荐指标中,不吃早餐的人比吃早餐的人摄入的维生素和矿物质更少,叶酸、钙、铁和维生素 A、B1、B2、B3、C、D 的差异最为显著。

“我们发现,不吃早餐的人明显更有可能达不到建议摄入的最低营养标准。”Fanelli 说。

同时,不吃早餐的人总体上的饮食质量也低于吃早餐的人。例如,不吃早餐的人比吃早餐的人在一天中摄入更多的添加糖、碳水化合物和总脂肪,部分原因是零食摄入量更高。

“零食基本上为不吃早餐的人贡献了一顿饭的卡路里摄入量。”Taylor 表示,“吃早餐的人比不吃早餐的人摄入的总热量要多,但不吃早餐的人吃的午餐、晚餐和零食要多得多,而且饮食质量也往往较低。”

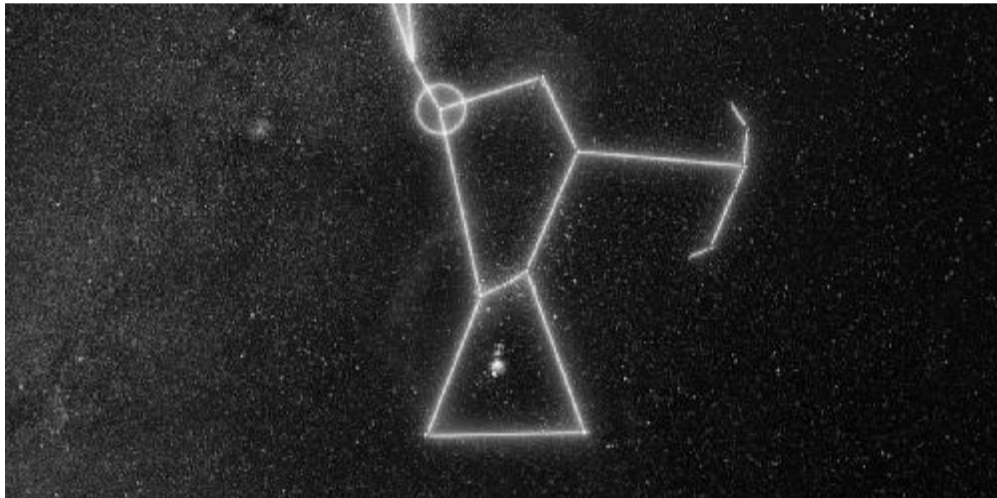


图片来源: Pexels/Pixabay

Taylor 说,虽然这些数据反映了每个参与者生活中的一天,但庞大的样本提供了“有代表性的”一天的写照。”

相关论文信息:  
<https://doi.org/10.1017/S0029665121000495>

## 科学此刻

参宿四为啥  
“大变暗”

参宿四位于猎户座。

图片来源: N.Risinger

近日,一项新研究指出,红超巨星参宿四的“大变暗事件”是由其南半球形成的尘埃团和冷斑导致的。这一观测结果或有助于阐释大质量恒星演化末期最严重的重大质量损失事件的发生机制。相关论文 6 月 16 日刊登于《自然》。

参宿四是距离地球第二近的红超巨星。2019 年 11 月至 2020 年 3 月,观测显示整个参宿四的可见亮度前所未有地变暗,引发了人们对其原因的大量推测。当时有研究人员认为,这次“大变暗事件”预示着参宿四将很快

以超新星的方式爆发,但后来并未观测到任何状况。

法国巴黎文理研究大学的 Miguel Montargès 和同事研究了“大变暗事件”发生前和发生时的参宿四表面。研究人员借助智利甚大望远镜进行了高分辨率观测,发现参宿四南半球在此期间比平时暗了 10 倍,且暗区的形状和强度在观测的 3 个月里迅速演化。

观测和建模结果显示,参宿四可见表面形成的一个冷区出现了局域温度下降,这一结果

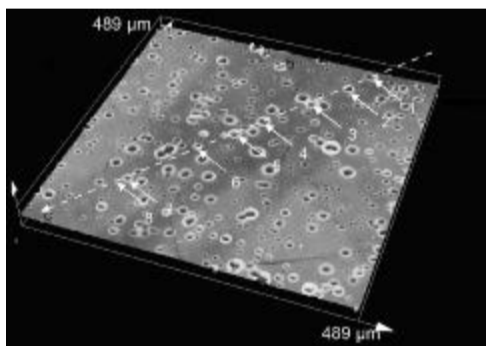
反驳了变暗事件预示了参宿四即将发生超新星爆发的理论。值得注意的是,研究人员认为这种多样化、快速演化的局域表面行为与独特的非均匀质量损失事件有关,这也是首次在红超巨星上实时观测到这类事件。

专家表示,这项研究为搞清红超巨星变暗的发生过程及恒星的结构与演化带来了新的见解。

相关论文信息:

<https://doi.org/10.1038/s41586-021-03546-8>

## 透明涂层可捕获气溶胶液滴



3D 图像显示了被捕获液滴在涂层上产生的“陨石坑”。

图片来源:美国西北大学

本报讯 通过重新利用护发素中的常见成分,科学家设计出一种廉价、透明的涂层,可以把窗户和天花板等表面变成胶垫,捕捉空气中的气溶胶液滴。6 月 16 日出版的 Chem 描述了这种新策略。

美国西北大学材料科学与工程学教授、论文通讯作者黄嘉兴(音译)说:“面对新冠肺炎大流行,我们需要积极利用各种不同层次的防御机制,包括物理屏障。因为这些病毒必须通过物理空间传播,才能接触并最终感染人类。”

新冠肺炎等疾病传播的主要途径是感染者说话、打喷嚏或呼吸时释放的呼吸道液体。这些含有病毒的液体包括大液滴和细小的气溶胶,它们在空气中难以被控制和去除。在撞击到表面时,气溶胶液滴很容易反弹,并重新进入空中。

黄嘉兴团队计划将聚丙烯酰胺-己二酸二癸酯(一种常用于护发产品和化妆品的锁水聚合物)转化为表面涂层。这种涂层是亲水的,因此可以捕获含有病原体的飞沫,并防止它们从表面反弹。

研究人员在有机玻璃隔板上制作了涂层,并测试其水滴捕捉能力。研究小组首先在护栏处喷洒由手持面部喷雾器产生的气溶胶蒸气,以模拟说话释放的气溶胶飞沫。通过分析落在

隔板上的液滴,他们可以评估涂层捕获气溶胶的效果。与没有涂层的隔板相比,涂层几乎捕获了所有气溶胶。

接下来,他们在有机玻璃上喷洒水雾,以模拟咳嗽和打喷嚏释放的大液滴,结果发现涂层也大大减少了飞溅的液滴数量。在模拟实验中,从有机玻璃屏障逃逸的液滴数减少了 80%。

过去,科学家设计了主要针对大水滴的捕水剂,用于从沙漠空气中提取水或农业。“我们搜索了大量文献,但没有发现多少捕捉气溶胶液滴的工作。也许在疫情之前,人们对这种气溶胶捕获涂层没有强烈的需要。”黄嘉兴说。

该团队估算了在典型室内办公环境中,人们大声连续说话释放的飞沫数量。计算表明,涂层吸收液滴饱和阈值比人们在办公室场景中释放的液滴高 7 到 10 个数量级。此外,如果需要,涂层可以很容易地用水擦掉。(鲁亦)

相关论文信息:

<http://dx.doi.org/10.1016/j.jsci.2021.102577>

## 科学快讯

(选自 Science 杂志,2021 年 6 月 11 日出版)

## 形成恒星的圆盘星系中的螺旋形态

星系的早期组合被认为产生了扰动和不对称的物体。在邻近星系中看到的形态特征,如星盘、凸起和旋臂,需要时间才能形成,而且会受到早期频繁发生的星系合并的干扰。

科学家发现了一个遥远的星系,其中包含一个螺旋状的气体盘。由于一个超大质量黑洞和一个可能的恒星膨胀,该星系也有一个紧凑的中心质量集合。他们表示,这些特征一定是在宇宙大爆炸后的 14 亿年内形成的。

相关论文信息:

<https://doi.org/10.1126/science.abe9680>

## 退出时间可作为衡量生态恢复力指标

弹性是研究复杂系统临界过渡和临界点的一个重要概念,定义为系统在过渡到另一稳定状态之前所能忍受的扰动的大小。然而,事

实证明,弹性是无法测量的。

科学家展示了平均退出时间(系统跨越阈值所需的时间)的数学概念如何有助于解决这个问题,并描述了复杂系统的弹性。他们从时间序列数据中导出了一种估算退出时间的模型方法,并将其应用于放射植物种群模型、湖泊蓝藻细菌数据和更新世-全新世气候数据等例子中。

这种方法可以提高人们对受威胁的复杂系统的动态特性的理解。

相关论文信息:

<https://doi.org/10.1126/science.aay4895>

量子圈形成的人工原子间  
化学键极弱

化学键一般形成于原子的电子态之间;原则上,其他电子态也可以形成化学键。

科学家发现,在量子圈(铜表面上的铁原

子大环)中创造的电子态可以与原子显微镜尖端的金属原子形成化学键。

圈态由许多电子形成,但与原子轨道相比有很大的空间范围。与 48 个原子环之间的共价键的能量只有 5 毫电子伏。

相关论文信息:

<https://doi.org/10.1126/science.abe2600>

## 基于磷质子的高效氮还原

利用电化学方法制备氨气可以大大降低目前的哈伯法产生的温室气体排放。一个正在研究的比较有前途的选择是还原生成氮化锂,它可以质子化生成氨。

然而,在这些研究中,作为局部质子源的乙醇可能在反应条件下降解。

科学家报道了四烷基磷盐替代乙醇的使用。这种阳离子可以稳定地经历脱质子一再还原循环,同时作为一个附加的好处,它提高了

介质的离子电导率。

相关论文信息:

<https://doi.org/10.1126/science.abg2371>

## 预热离散时间晶体的观察

描述和理解处于平衡状态的物质的不同相,通常与系统平衡的热化过程有关。最近对非平衡系统的研究表明,系统的周期性驱动可以抑制平衡的自然趋势,但仍会形成新的非平衡相。

科学家使用由 25 个捕获的离子量子位和自旋组成的量子模拟器来观察这种物质的非平衡相;非无序的预热,离散时间晶体。量子模拟器的灵活性和可调性为研究物质的奇异相提供了一个强大的平台。

相关论文信息:

<https://doi.org/10.1126/science.abg8102>

(冯维维编译)