



化学反应研究不再像“抽盲盒”

科学家实现对氢分子的立体动力学精准调控

■本报见习记者 孙丹宁

化学反应无处不在,在化工生产过程中,工程师通过添加催化剂,改变化学过程的温度、压力等宏观参数,在一定程度上控制化学反应得到所需产物。随着人们对化学反应的认识达到原子分子尺度和量子态的水平,如何在更精细水平上对化学反应进行调控,成了化学研究的新课题。

中科院大连化学物理研究所杨学明院士、肖春雷研究员团队联合张东辉院士、张兆军副研究员团队从实验和理论双重视角,在 H(氢)+HD(氘氢)反应中实现了立体动力学精准调控。相关成果近日发表于《科学》,审稿人评价该工作是“反应动力学领域里程碑式的突破”。

激光的妙用

立体动力学效应是化学反应中一个基础而重要的问题,主要关注碰撞过程中反应物分子的空间取向对反应过程的影响。如何利用立体动力学效应实现对化学反应过程和结果的精细控制,是化学动力学研究的前沿。

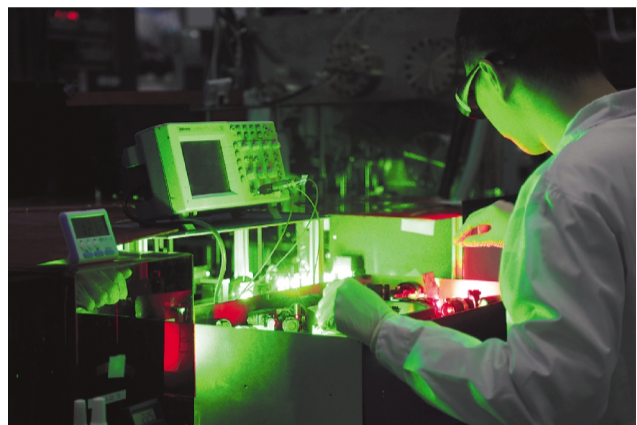
氢分子是最简单的分子,它就像一个哑铃,由两个氢原子通过类似“弹簧”的共价键连接而成。在与另一分子相互作用的过程中,由于氢分子是非极性双原子分子,不容易发生取向变化,因此其参与的基元化学反应是研究立体动力学效应的理想模型。

“弹簧”可以伸长或缩短,当一个反应物与氢分子发生碰撞时,“弹簧”的状态就会导致化学反应表现出很大差异。”肖春雷解释说。

化学反应的实质是微观粒子相互碰撞并引发旧化学键断裂、新化学键形成的过程。在碰撞过程中,控制分子化学键的方向十分困难。由于人们难以在实验上制备足够数量的具有特定取向的氢分子,因而无法研究相关反应中的立体动力学现象。

此时,研究团队将视线投向了激光。激光具有极高的亮度,能发挥足够强的作用来控制方向。“要想控制氢分子方向,对激光各方面参数要求很高——非常亮,颜色单一,波长稳定性好,长时间锁定在分子跃迁谱线上。”论文第一作者王玉奉说。

针对这一挑战,研究团队自主研发了一种高能量、单纵模纳秒脉冲光参量振荡放大器。激光作用于氢分子后,可以将氢分子激发至振动激发态。由于振动激发态氢分子化学



研究人员在控制氢分子化学键取向的激光器前工作。受访者供图

键的方向与激光电场方向相平行,改变激光的电场方向便可改变分子方向。而激光电场方向又被称为偏振方向,可以简单通过波片这一光学器件对其进行控制。波片如同船舵一般,通过转动波片可以改变分子化学键的方向,从而控制氢分子在化学反应中的碰撞方向。

通过在受激拉曼激发过程中操控激光光子的偏振方向,杨学明、肖春雷实验团队可以在分子束中将能量高效注入氢分子的化学键,同时赋予化学键特定的空间取向,这便成了解决此问题的“关键先生”。

氢分子的碰撞

有了控制氢分子化学键方向的技术之后,化学反应的研究驶入了快车道。

化学反应都是通过碰撞发生的,而“交叉分子束”技术可以研究化学反应的碰撞过程,通过将反应物分子制备到特定的速度、量子态之后,再进行相互碰撞,可以获得其中的反应机理信息。

团队通过控制 HD 分子化学键的方向,研究了两种典型的碰撞过程:平行碰撞与垂直碰撞。碰撞之后,反应得以发生,得到的氢分子与氘原子会散射到各个方向,就像台球被碰撞后向四处散去,获得了不同的散射方向。

反应物速度不同,产生的碰撞能量也不一样。“就像两辆汽车对撞过程中速度不同,因此

撞击能量不同,碰撞产生的破坏力也有很大差别。”王玉奉解释说。

团队进行了 3 种碰撞能量下的实验,能量分别为 0.5 eV、1.2 eV、2.07 eV。碰撞能量越高,实验测量表明,在不同能量下,反应物 HD 以不同的取向发生碰撞,导致的结果也明显不同。

理论与实验的“双剑合璧”

研究组内成员将张东辉和杨学明的合作称为“双剑合璧”。

“他们一个搞理论,一个做实验,理论计算不仅能揭示实验观测背后的物理机制,还能进行精确的预测,让实验测量避免大海捞针,实验和理论相互促进,能取得很好的效果。”肖春雷说。

为了理解动力学过程,张东辉的理论团队开展了非绝热量子动力学模拟。论文的共同第一作者黄嘉宇介绍:“非绝热过程在分子反应中扮演着重要角色,只有开展非绝热量子动力学模拟,才能精确解释涉及非绝热过程的分子反应实验结果。”

该模拟过程精确重现了实验所观测到的现象,并结合极化微分截面理论方法,详细分析了反应中存在的立体动力学效应。团队在考虑干涉和不考虑干涉两种情况下,发现了其结果有明显差别,并揭示了量子干涉现象在垂直碰撞型反应中发挥的重要作用。

“之前的化学反应研究可能像抽盲盒,由本来的量子属性决定,科研人员不能自主控制,我们只有一定概率抽取到想要的结果。”张东辉说,“但现在我们可以通过激发特定化学键并控制它的方向,得到想要的结果。”

理论与实验结果的一致性,验证了通过氢分子量子态空间取向的操控,可以对化学反应进行精细调控,为将来建立精确的化学反应理论体系、发展主动调控化学反应的方法提供了新的思路。

“未来我们会研究更低碰撞能或更高碰撞能的多原子化学反应的立体控制效应、反应共振、量子干涉等现象。”张兆军对《中国科学报》说。

相关论文信息:
<http://doi.org/10.1126/science.ad7471>

我国是首个发明专利有效量超 300 万件国家

本报讯(记者李晨)1月16日,国务院新闻办公室就 2022 年知识产权相关工作情况举行发布会。中国国家知识产权局副局长胡文辉在会上说,中国是全球首个国内发明专利有效量超 300 万件的国家,其中高价值发明专利拥有量达 132.4 万件,同比增长 24.2%,占发明专利有效量的比重超过四成。

胡文辉介绍,世界知识产权组织最新发布的《世界知识产权指标》报告显示,中国发明专利有效量已位居世界第一。

截至 2022 年年底,中国发明专利有效量为 421.2 万件,其中国内(不含港澳台)发明专利有效量为 328.0 万件,每万人口高价值发明专利拥有量达到 9.4 件。每万人口高价值发明专利拥有量较上一年增加 1.9 件,较“十三五”末

增加 3.1 件。

中国知识产权创造质量不断提升、发明专利结构持续优化,主要体现在三大特点。第一,企业高价值发明专利创造优势更加突出。截至 2022 年底,中国国内企业高价值发明专利拥有量达 96.8 万件,企业科技创新主体地位不断强化。

第二,战略性新兴产业专利储备进一步加强。截至 2022 年年底,中国国内高价值发明专利拥有量中,属于战略性新兴产业的有效发明专利达 95.2 万件,产业创新发展动能持续增强。

第三,高价值发明专利平均维持年限稳步增加。截至 2022 年年底,中国国内高价值发明专利平均维持年限为 8.3 年,维持年限超过 10 年的有效发明专利达 44.4 万件,创新主体维持专利有效性的意愿不断增强。

这一年,嫦娥五号月球样品研究新添多项成果

月表矿物是水的重要“储库”,为月表中纬度地区水的分布提供了重要参考。

其四,嫦娥五号月壤样品矿物中发现新矿物“嫦娥石”。中核集团核工业北京地质研究院月壤研究团队,通过离子束扫描电镜等一系列高新技术手段,在 14 万个月壤颗粒中,分离出一颗 4×7×10 微米大小的单晶颗粒,并成功解析其晶体结构。经国际矿物学会新矿物分类及命名委员会投票通过,确证为一种新矿物——“嫦娥石”。

其五,嫦娥五号月壤样品成分特征。中国地质大学(武汉)研究团队在最低 2 毫克样品极低损耗量情况下,准确测定了月壤中 48 种主量和微量元素含量。山东大学团队则利用激光显微拉曼光谱技术,发现嫦娥五号月壤的辉石和橄榄石矿物化学成分范围基本与嫦娥五号玄武岩一致,但仍存在少量的富镁物质。

据悉,除以上 5 项代表性成果外,过去一年,嫦娥五号月球样品的相关研究已有 50 多项成果在国内外重要学术期刊发表,推动我国月球科学研究进入国际前沿。



1月16日,国内首艘具有破冰功能的大型航标船“海巡 156”轮在天津列编,标志着我国目前排水量最大、综合性能最佳、智能化程度最高的大型航标船正式投入使用。图片来源:人民视觉

非法采矿污染 49 个国家的 173 条河流



安第斯亚马孙基金会热带生态学家 Enrique Ortiz 说,很多采矿都发生在上游区域,那里是鱼类产卵的地方。

采矿还使马德雷德迪奥斯河的河流变得非常泥泞,自 20 世纪 80 年代以来,全球范围内可看到的淤泥越来越多。

Dethier 团队梳理了数千条河流图像,确定了每条河道沉积物负荷开始上升的位置,并将这些地点与卫星公司提供的高分辨率图像进行交叉比对,还在新闻和社交媒体上寻找导致淤泥增加的蛛丝马迹。

Dethier 指出:“淤泥增加的部分原因是油棕种植园,但到目前为止,采矿是主要原因,已导致 381 个地点出现了泥浆量激增的情况。”泥浆也可能对环境造成损害。Dethier 说,这不是一个局部问题,一些污垢甚至可以冲到 1000 公里外的下游区域。

Ortiz 指出,只要黄金价格保持在高位、非法交易的成本又很低,冒险就会存在。(辛雨)



矿工在秘鲁亚马孙河的河床上淘金。图片来源:KADIR VAN LOHUIZEN

统筹推进学术监督体系和能力现代化

■侯兴宇

党的二十大报告强调,“弘扬诚信文化,健全诚信建设长效机制”。这一表述将包括科研诚信在内的诚信文化,与推进文化自信自强、铸就社会主义文化新辉煌紧密联结,具有锚定发展路径和指引工作协同的重要意义。

众所周知,诚信是科技创新的基石,也是科学精神的必然要求。科技工作者攀登科学高峰、追求真理、探究本源而秉承的科学精神、理性质疑和学术民主,以及应遵循的爱国、创新、求实、奉献、协同、育人等新时代科学家精神,无一不是诚信文化所倡导、所期待、所包含的核心内容。

近年来,我国科技自立自强步伐不断加速,科技研发经费稳居世界第二,取得了一批原始创新成果和关键核心技术突破。同时也应看到,自 2017 年来,国内学术不端事件频发,一些新型科研诚信案件花样翻新,不断挑战学界、机构和监管部门的治理能力,科研机构的监督面临新的不小的压力和挑战。

当前,政治监督、经济监督和学术监督这三类监督形式,型塑了科研机构的监督架构和工作机制。政治上勇当“国家队”,勇担“国家责”,经济上追求真实性、合法性,学术上维护学术规范,严守诚信底线和科研伦理要求,成为科研活动合规有序、长足发展的根基,更成为科研机构监督体系不断完善、监督能力不断提升的内在要求。

同时,我们也应清醒意识到,相较于政治监督和经济监督,学术监督是这三类监督中的短板,需要花费更多力气强化建设,才能实现协同治理的目标。

其一,科研不端行为的存量存在底数不清

的情况。机构长期以来对科研诚信建设的投入不足、认识不足。对典型案例的轻处理更是学术监督能力不彰的硬伤。完成摸清底数、纠正偏差的工作,需要投入较多的人力和物力。

其二,科研不端行为的增量呈现复杂多样的情况。当前国内科研不端行为花样翻新,除传统不端行为尚未禁绝外,各平台、对买卖论文、代写代投和操纵同行评议等新型严重失信行为应对乏力。

其三,对科研不端行为的联合惩戒机制尚不完善,宽容态度缺乏制度和机制的支撑。当前诚信治理中最大的问题是“类案不同判”,这严重影响了学术监督的权威性,抵消了联合惩戒的严肃性。与此同时,惩戒合规性的重要性也日益增强,程序正义的理念需进一步贯彻执行。

如果不正视上述情形,学术监督工作就会产生较大缺口,并可能出现新的“破窗”效应。一些铤而走险者,尽管在学术上可能存在较大隐患,但由于种种原因,他们仍可能承担较多的学术、行政职务,甚至成为部分“关键少数”,从而获得更多的资源话语权、分配权,并承担更多重要的计划和项目。如果这种情况持续发生,将会对诚信文化造成严重的侵蚀和破坏,进而对高水平科技自立自强产生强力冲击。

有鉴于此,需要从更高层次思考学术监督工作在国家监督体系中的地位和作用,不断完善“教育、激励、规范、监督、惩戒”一体化的科研诚信治理体系,不断提升诚信治理的能力水平,使之强短板、补弱项,上台阶,为科技强国目标和全面建设社会主义现代化国家做好基础性、战略性的支撑和服务。

要做到这一点,需要从四个方面开展工作。

一是统筹考虑科研机构的监督合力,辅之以结构合理、力量精干、专业稳定的监督力量。要根据科研机构的工作实际对其中的三类监督形式进行通盘考虑、整体设计,以形成工作合力。为此,需要在制度规范的衔接和监督队伍的建设上进行适度整合。

二是统筹考虑科学评价的社会属性,减少各类非科学评价对科技创新工作的干扰,保障科研人员在现代化建设全局中的核心地位,使科研人员心无旁骛、安心致研,涵养科学文化和优良学风,持续激发创新创造活力,不断塑造发展的新动能、新优势。

三是统筹考虑科技人才的最大效用,通过营造真心爱才、悉心育才、倾心引才、精心用才的氛围,努力培育适合科技人才创新创造的事业、舞台和文化。既展现出科学家精神引领、示范的号召力,又推动全社会见贤思齐、创先争优的实际行动。

四是统筹考虑科研机构的治理架构,着眼于提质增效和创新赋能,优化科技资源配置方式和机制,深化科技评价改革,大幅减少对具体科技活动的非必要干预。聚焦急需紧缺和关键核心技术,抓好揭榜挂帅、学术监督两头,减少对科技计划、项目、荣誉等的审批评价,从源头和结果上杜绝真“项目”假“科研”的畸形学术生态。

唯其如此,我们才能在学术监督工作中不断推动治理体系和治理能力现代化的长足发展,完成党和国家对科研诚信文化引领社会文化发展的历史重任。

(作者单位:中国科学院监督与审计局)