



历时 8 年 修改 329 稿 困扰催化领域 50 年难题终破解

■本报记者 王敏

中国科学技术大学教授李微雪的电脑里有个文件夹,保存了同一论文的 329 个不同版本。每个版本按照日期命名,最早一版是 2018 年 9 月 5 日,最后一版是 2024 年 10 月 20 日。

近日,这篇解开困扰催化领域近 50 年难题的论文在线发表于《科学》。李微雪团队利用人工智能(AI)技术揭示了负载型金属催化剂中“金属-载体相互作用”的本质。

中国科学院院士、清华大学教授李亚栋认为,该成果“解决了多相催化研究中一个重大基础科学难题,对高效负载型催化剂的理性设计极具指导价值”。

以非常“优美”的方式解开难题

90%以上的化学品在催化剂的帮助下合成制备,氧化物负载金属催化剂是使用最广泛的工业催化剂之一。长期以来,科学家一直在努力开发高活性、高选择性和高稳定性的催化剂。

“负载型催化剂体系中有两大基石——催化剂与反应物的关系和催化剂与载体的关系。前者是提高催化活性和选择性的关键,后者则起到‘定海神针’的作用。”论文通讯作者李微雪说。

早期研究大多聚焦于金属催化剂与反应物的相互作用,而忽略了金属催化剂与载体的相互作用。随着研究不断深入,人们发现氧化物载体不仅发挥了稳定金属催化剂的作用,还能进一步影响催化体系中的电荷转移、形貌改变、新界面位点形成、化学成分以及界面包覆等,进而显著影响了催化剂的活性和选择性。

事实上,早在 1978 年,科学家就发现氧化物载体在高温还原环境下,出现了包裹金属催化剂的现象。这一现象被归结为由强金属-载体相互作用所致。后来,人们用这一概念解释所有表现出显著界面效应的实验现象。

“影响金属与载体相互作用的因素太多、太复杂,涉及催化剂和载体的组分、结构、尺寸、形貌等。这一作用又敏感地依赖于催化剂的制备过程和反应条件等。”李微雪说,现在,每年有近 7000 篇论文涉及金属-载体相互作用这一概念,并且呈稳步增加的趋势,但对该作用的研究一直没有实现量化,尤其是缺乏明确的构效关系。

为此,从 2017 年起,他带领学生利用 AI 技

术“死磕”该问题,历时 8 年终于解开这一困扰多相催化领域近 50 年的难题。

“令我们吃惊的是,在诸多复杂因素中,竟是金属催化剂与载体中的金属形成的金属-金属键产生了决定性影响,而不是大家长期以来所想象的金属-氧键。”李微雪说,这为理解金属-载体相互作用提供了全新视角。

《科学》审稿人高度评价了这项工作:“该研究对于改进工业催化剂非常重要,我对作者从原子层面出发并以一种‘优美’的方式解决这一问题表示祝贺!研究结果极具创造性、思想性和深刻性。”

从 300 亿个表达式中 构建一个通用简洁公式

在这项研究中,科研人员先是收集了 25 种金属 27 种氧化物的 178 个实验数据,然后使用一种可解释性 AI 算法,构建了一个由 300 亿个表达式组成的候选空间,并在此基础上建立了一个具有明确物理意义的机器学习公式。

“可解释性 AI 算法从材料的基本性质出发,将材料已知的物理化学参数迭代地通过数学组合,得到 300 亿个表达式。”李微雪说,他们进一步基于压缩感知原理,从 300 亿个表达式中得到一个能再现所有实验数据的方程。

“得出一个机器学习公式比较简单,难的是如何结合具体问题让公式变得高度可解释,并从中挖掘出物理意义和科学原理。”李微雪说,这依赖于研究者对问题的认识和判断。

最终,他们结合领域知识和理论推导,建立了一个物理清晰、数值准确的简洁方程,首次完整揭示了影响金属-载体相互作用的两个关键物理量,即“金属-氧相互作用”和“金属-金属相互作用”。

得出公式后,他们反复确认核实,对 675 个金属-氧化物体系进行了分析,发现“金属-氧相互作用”是形成界面的主要“贡献者”,而“金属-金属相互作用”是区分不同载体影响的关键因素。

“简单来说,所有的氧化物载体都含有氧,不同的是它们包含的金属不同。因此,显而易见,是‘金属-金属相互作用’对载体效应产生了决定性影响。”李微雪感叹,捅破这层“窗户

纸”,人们竟然花了近 50 年时间。

值得一提的是,他们还提出了“强金属-金属作用”原理性判据,即当两种金属间作用强于氧化物中金属自身相互作用时,氧化物载体将包裹金属催化剂。比如,金属催化剂是铂,载体是氧化钛。当铂-钛键强于钛-钛键,就会发生氧化钛包裹铂催化剂的现象。这一简洁的判据有效阐释了目前几乎所有在这类体系中观测到的包裹现象。

一场跨越时空的接力赛

李微雪曾在德国马普学会弗里茨·哈伯研究所进行博士后阶段研究,并在回国后与该研究所所长 Matthias Scheffler 成立了中德马普伙伴研究小组。

2016 年,Scheffler 受邀参加中国科学技术大学的一场学术年会。与李微雪见面时,Scheffler 夸奖起他的博士后、之前是李微雪博士生的欧阳润海。他发展了一种可解释性 AI 算法 SISO,在材料领域研究中有广阔前景。

“2021 年,这篇论文已经初步成形,但李微雪并没急于发表,一是当时得到的方程物理图像不是很清晰,二是新的金属-金属相互作用变量在催化过程中的重要性还不明确。”

围绕上述问题,李微雪带领团队进行了大量探索,利用基于 AI 得到的方程预测、计算各种可能的物理量,并尝试将其与重要的催化问题相关联,文章也不断推翻重来,但结果还是难以令人满意。

转机出现在 2023 年。博士生胡建钰使用基于神经网络势函数的分子动力学模拟,成功在理论上重现了 1978 年实验上发现的包裹现象。

这一次,他们找到了理论应用的突破口。随着对文章的创新性、重要性、逻辑性、清晰性等进行反复修改,他们对公式物理意义的理解越来越清晰、深刻和全面。

(下转第 2 版)

我国农业种质资源普查取得丰硕成果

据新华社电 记者 12 月 10 日从农业农村部举行的新闻发布会上获悉,自 2021 年启动以来,农业农村部会同各地各有关部门全力以赴推动全国农业种质资源普查,摸清了我国农作物、畜禽、水产养殖种质资源的种类数量、区域分布、特征特性等家底,新收集了一大批农业种质资源,抢救性保护了一批濒危资源。

据介绍,此次普查取得了丰硕成果。农作物方面,新收集种质资源 13.9 万份,覆盖了粮棉油糖、果菜茶桑等,99% 为种植历史悠久、类型丰富、性状多样的传统地方品种和野生近缘种,目前已全部移交国家库安全保存,实现了应收尽收、应保尽保。畜禽方面,全面查清了畜禽、蜂和蚕资源

家底,新发现鉴定地方品种资源 51 个,采集制作遗传材料 107 万份,同步对 61 个濒危资源开展抢救性保护,目前 159 个国家级保护品种都实现了活体保护。

水产方面,全面摸清了水产养殖种质资源种类、数量、区域分布状况,采集制作遗传材料 12 万份。

中国工程院院士刘旭介绍,农作物种质资源是保障国家粮食安全和重要农产品稳定安全供给的战略性资源,是农业科技原始创新的物质基础,也是生物多样性的的重要组成部分。这次普查全面摸清了种质资源家底,抢救、收集、保护了一批优异种质资源,为提升种业自主创新、加快种业振兴提供了重要支撑。(古一平)

中国科学家获联合国环境署 2024 年“地球卫士奖”

据新华社电 联合国环境规划署 12 月 10 日线上公布 2024 年“地球卫士奖”得主,中国科学家卢琦因助力中国扭转土地退化趋势、减少沙化面积,获得“地球卫士奖”中的“科学与创新奖”。这也是中国人首次在该类别获奖。

一年一度的“地球卫士奖”是联合国颁发的最高级别环境奖项,旨在表彰对环境产生变革性影响的个人和组织。联合国环境规划署说,2024 年“地球卫士奖”几个奖项的得主“在应对土地退化、干旱和荒漠化方面展现出了卓越领导力、勇敢的行动和可持续的解决方案”。

据介绍,卢琦在科学和政策领域拥有 30 年的工作经验。作为中国林业科学研究院首席科学家和东北工程研究院首任院长,卢琦在实施世界上最大的造林项目、建立荒漠生态研究网络和伙伴关系以及促进多边合作方面,在全

球遏制荒漠化、土地退化和干旱等领域发挥了关键作用。

卢琦表示,此次获奖是对中国林业事业特别是治沙科技工作者的高度肯定和激励。他说,中国 70 多年的治沙历史,就是一部科技支撑生态建设的历史。中国几代治沙科技工作者辛勤耕耘,创造了科技治沙奇迹,为中国“三北”等重点生态工程建设作出了贡献。

获 2024 年“地球卫士奖”的还有获“政策领导力奖”的巴西原住民部部长索尼娅·瓜雅雅拉,获“激励与行动奖”的美国原住民权利倡导者埃米·鲍尔斯·科达利斯和罗马尼亚的环境守护者加布里克·波恩,获“终身成就奖”的印度生态学家马达夫·加吉尔,以及获“商界卓识奖”的可持续农业倡议 SEKEM。(林晶 黎华玲)

新研究揭示生物“迁徙淘汰”机制

本报讯(记者刁曼童)中国科学院深圳先进技术研究院研究员傅雄飞团队通过定量合成生物学手段揭示了生物迁徙与病毒传播之间的复杂关系,发现生物进行有方向性的迁徙运动对病毒传播有抑制作用,并揭示了群体层面生物的“迁徙淘汰”机制。近日,相关研究成果发表于美国《国家科学院院刊》。

普遍观点认为,宿主的运动会加速病毒的传播。但也有生态学研究表明,宿主的运动对病毒传播起到抑制作用,比如,相较于不迁徙的同类,进行长距离迁徙的帝王蝶感染寄生虫病的风险显著降低。基于这一现象,生态学家提出了“迁徙淘汰”假说,认为迁徙行为有助于淘汰病毒感染者,从而维持群体健康。

自然界中迁徙行为到底是增强还是抑制病毒传播,其背后的机制尚不清晰。在哪些条件下宿主运动能够抑制病毒传播?若运动真能有效抑制病毒传播,是否宿主跑得够快,就能淘汰、清除病毒呢?

针对上述问题,傅雄飞团队利用大肠杆菌及其病毒 M13 噬菌体构建了一个宿主-病毒共生迁徙实验系统,实现了宿主运动性和病毒感染能力等系统关键参数的定量调控,突破了传统生态研究手段的局限。研究发现,在无方向

型空间扩张迁徙条件下,宿主运动将促进病毒传播,然而在有方向型空间扩张迁徙运动中,宿主运动可以抑制病毒传播,从而解释了以往关于宿主运动对病毒传播作用存在两种截然相反观点的原因。

研究进一步发现,当细菌群体在趋化作用下向外扩张时,会形成一个细菌数量恒定的“前锋营”,其通过细菌自我繁殖并同步淘汰位于后方的个体实现。模型预测显示,由于病毒无法自主移动,不可运动的噬菌体总是落后于可运动的细菌,因此,“前锋营”中健康细菌位于前端,而感染者则位于后端并被淘汰。随着“前锋营”运动速度的加快,淘汰速度也相应加快,导致感染者从群体中被清除。这意味着细菌毫无方向地“乱跑”对淘汰病毒是没有意义的,只有在有方向型空间扩张下,宿主跑得够快,才能实现“淘汰病毒”。

该研究通过阐明宿主运动与病毒传播之间的复杂联系,为探讨自然界更广泛的病毒传播问题提供了新的实验模型并奠定了理论基础,将有助于在流行病学背景下更好地理解传染病的防控。

相关论文信息:
<https://doi.org/10.1073/pnas.2408303121>



12 月 10 日上午 8 时 30 分,海南文昌,长征五号 B 第 5 次发射任务的运载火箭和卫星组合体在移动发射平台的托举下,由发射场技术区转场至发射区,发射任务准备工作推进到最后阶段。

长征五号 B 运载火箭是一型专为空间站工程量身打造的火箭,全长约 53.7 米,起飞质量约 849 吨,近地轨道运载能力大于 22 吨,是目前我国近地轨道运载能力最大的火箭。

图片来源:视觉中国

气候变化令喜马拉雅湖泊“膨胀”



本报最新数据显示,气候变化导致的冰雪融化使喜马拉雅山脉的许多湖泊“膨胀”,增加了下游地区发生洪水的风险。

据《科学》报道,研究人员调查了这片地区的 902 个湖泊,发现自 2011 年以来,一半以上的湖泊面积增加了,其中有些增加了 40% 以上。印度中央水务委员会报告称,总体而言,湖泊覆盖面积相比 2011 年增加了 11%。

研究人员表示,这一发现强调了对快速变化的冰川湖和水体进行严格监测的必要性。这些湖泊通常由不稳定的冰坝和砂砾石坝支撑,很可能在没有任何预警的情况下溃决,引发致命洪水。

在过去 10 年里,这种突发洪水已经造成喜

马拉雅地区数千人死亡,而气候变暖只会增加更多的风险。报告指出,由于突发洪水很难预测,“密切关注较小湖泊扩张面积的相对变化非常重要”。

这些新数据来源于对喜马拉雅山脉面积超过 10 公顷的水体和冰川湖定期的调查。总体而言,2011 年到今年 9 月,902 个湖泊中有 458 个面积有所增加;41 个湖泊的变化趋势尚不确定;其余要么萎缩,要么无变化。825 个湖泊的总面积已增加到近 60 万公顷,扩大了 10.8%。

这一发现与近期的其他研究结果相呼应。例如,今年 4 月,印度空间研究组织发布了一份对 2431 个面积超过 10 公顷的喜马拉雅湖泊的研究报告。该研究发现,1984 年至 2016 年,676 个湖泊的面积有所增加。

印度克什米尔大学的气候科学家 Irfan Rashid 说,这些数据表明突发洪水的风险越来越大。“冰川湖的扩张给政策制定者敲响了警钟。”

印度政府已经在北阿坎德邦等 4 个邦投入

了 1800 万美元,以研究相关问题并探索可能的解决方案,如安装监测设备、设置引水渠道。印度国家灾害规划官员还确定了下游山谷中可能受突发洪水威胁的 47 座大坝,评估其溢洪道是否足以应对洪水。(王方)



2021 年,冰川湖溃决引发的洪水摧毁了印度北阿坎德邦的大坝。图片来源:SAJJAD HUSSAIN

我国农业生产温室气体排放变化趋势获揭示

本报讯(记者冯丽妃)中国科学院地理科学与资源研究所副研究员徐湘博、研究员张林秀等联合中国农业大学教授赵自然和樊胜根,利用全国 43 万个农村固定观察点的调查数据,综合考虑了耕作方式差异、作物种类差异等因素,揭示了 1993 年到 2020 年我国农户层面的农业温室气体排放强度的长期变化趋势及不平等现象。相关研究近日发表于《自然-食品》。

研究发现,2015 年是我国农业温室气体排放强度的转折点,从 2015 年到 2020 年,作物生产温室气体排放强度水平下降了 16%。从全生命周期视角分析,稻种种植、田间管理和化肥生产是作物温室气体排放的三大主要贡献源。从作物来看,贡献最大的是玉米和水稻。

我国不同农业区的气候条件、地理位置和种植制度差异很大,除少数农业区在 2015—2018

年间达到峰值外,大多数农业区的温室气体排放强度在 2015 年达到峰值。

研究显示,趋势变化背后的主要驱动力包括农田投入、所有其他投入、农业劳动力投入和全要素生产率,但不包括资本投入。1993—2020 年我国农业温室气体排放强度的不平等增加,贡献源模式发生了明显变化。值得注意的是,农田投入和所有其他投入贡献了 80% 的不平等,而全要素生产率的贡献逐渐减少,并被劳动力迁移引起的农业劳动力投入差异所取代。随着时间推移,全要素生产率的贡献逐渐减少,表明中国区域间技术均等性不断提高。同时,农业劳动力投入对温室气体排放强度不平等的贡献增大。研究认为,降低农业温室气体排放强度和防止不平等增加,需要优化生产要素投入。

相关论文信息:
<https://doi.org/10.1038/s43016-024-01071-1>