

量子计算机联手超级计算机模拟迄今最大分子

本报讯 量子计算机最具前景的应用方向之一是模拟蛋白质，助力新药研发，但目前量子计算机太容易出错，无法完成这项工作。如今，在超级计算机的协同配合下，两台量子计算机打破了一项模拟纪录，成功确定了一个包含12635个原子的分子的性质。相关研究成果近日公布于arXiv。

要弄清药物分子的作用机制，我们必须确定它们的电子的量子态与能量。这是一个通常只能在常规计算机上大致解决的量子问题。

在这项研究中，美国克利夫兰医学中心、科技公司IBM与日本理化学研究所的研究人员组成的团队另辟蹊径，依托“掌握”量子物理学基本原理的量子计算机，研发出一种混合运算方案，能够将量子计算机和传统超级计算机结合起来，并用它们来模拟两个前所未有的大分子，其中一个分子是以往用量子计算机模拟的最大分子的40倍左右。

团队成员、克利夫兰医学中心的Kenneth Merz表示：“这一直是我的研究梦想，如今终于得以实现。”

研究团队使用了分别部署于日本理化学研究所与克利夫兰医学中心的两台IBM“苍鹭”量子计算机，以及两台全球顶尖超级计算机“富岳”与“雅比-6”。

研究人员选取了两种蛋白质与小分子的组合，即蛋白质-配体复合物作为模拟对象。后者已得到了充分研究，并且在生物医学领域常被用作基础研究范例。他们同时还在水中进行了模拟，使结果更贴近于实验室的真实环境。

现阶段量子计算机实用价值有限，这是因为它们的体积相对较小，而这限制了算力，并且更容易出错。为此，该团队将分子模拟运算任务拆分成4台机器，仅用量子计算机计算出分子某些片段的特定性质，再将运算数据交由超级计算机处理，整个计算过程是在两类计算机

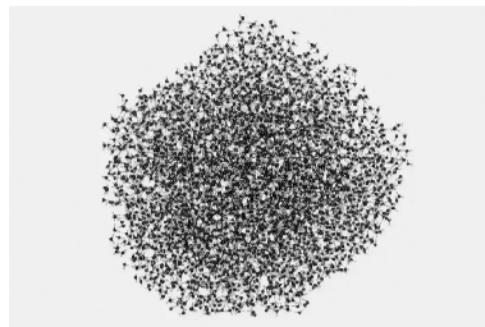
之间进行的，时间超过100个小时。IBM的Jerry Chow表示，即便如此，这套混合方案依旧比没有量子计算机的情况下要快。

这次模拟还对分子的最低能量进行了测算，其精度已达到主流标准运算方法的水准，只是尚未形成绝对优势。

美国匹兹堡大学的刘俊宇(音)评价称：“该研究给出了一些极具参考价值的东西，即依托现有硬件推进实用的量子计算的步骤。实验的规模确实令人印象深刻。”

刘俊宇认为，在研制出低错误率的量子计算机之前，这类混合运算模式值得大力推广。但目前仍存在一个悬而未决的问题：暂时无法通过严格的数学论证，证实这种混合方案在任何场景下都能保证优异的性能，即所谓的量子优势。

Chow表示，这次创纪录的大分子模拟仅是第一步，且不是决定性的。“当下，整个行业都



模拟的大分子包含12635个原子。

图片来源: IBM

在不断突破现有技术边界。最让人振奋的是，量子计算实用化之路才刚刚开始。” (王方)

相关论文信息:

<https://doi.org/10.48550/arXiv.2605.01138>

德国政府发布“高科技议程”路线图

据新华社电 德国政府5月20日正式发布“德国高科技议程”详细路线图，明确了关乎德国经济实力、竞争力和技术主权的关键技术发展路径。

去年7月，德国联邦内阁通过了“德国高科技议程”，旨在通过科研与技术加强德国的竞争力、价值创造能力和技术主权。该议程重点聚焦人工智能、量子技术、微电子、生物技术、核聚变与气候中和能源生产，以及气候中和交通技术这六大关键技术。

本次发布的路线图对六大关键技术设定了具体发展路径和目标。例如，在量子技术领域，德国计划到2030年研发出两台达到欧洲顶尖水平的纠缠量子计算机；在生物技术领域，目标是到2028年批准首个mRNA癌症免疫疗法；在人工智能领域，德国计划到2030年实现本国10%的经济产出基于人工智能。

根据该议程，德国还计划持续加大在航空航天、健康、安全与国防等五大战略研究领域的投入。(李超 车云龙)

胡夫金字塔为何历经地震而不倒

本报讯 《科学报告》5月21日发表的一项研究显示，埃及吉萨金字塔群中的胡夫金字塔的结构特征，可能使其在建成后的约4600年间能够经受住地震，因此未遭受严重破坏。

大金字塔约建于4600至4450年前，此后历经多次地震，包括1847年的一次约为6.8级的地震，以及1992年的一次5.8级地震，然而其内外均未遭受重大破坏。目前尚无解释大金字塔韧性的相关理论。

在这项研究中，埃及国家天文与地球物理研究所的Asem Salama和同事在金字塔周围的37个地点，包括内部密室、建筑石块及周边土壤中记录了由人类活动、海浪或气候变化产生的环境振动。

科学家发现，在金字塔内部记录到的振动中，大部分(76%)频率在2.0~2.6赫兹之间，表明机械应力在整个结构中分布均匀。相比之下，周围土壤中的振动频率约为0.6赫兹。作者认为，这种频率差异可能有助于在地震活动中保护金字塔，因为它限制了结构与土壤之间的相互作用，从而避免了振动的放大。

研究人员还评估了金字塔结构如何放大来自基岩的振动。直接凿入基岩的地下室未出现振动放大现象。放大系数通常随高度增加而增大，在国王陵寝达到峰值，该处的振动放大系数是基岩水平的4.0倍。然而，在位于国王陵寝正上方的缓冲室中，放大系数降至3.0。研究人员认为，这种设计可能降低了地震活动对国王陵寝造成破坏的风险，这与现代理论一致，即减振室为国王陵寝提供了结构保护。

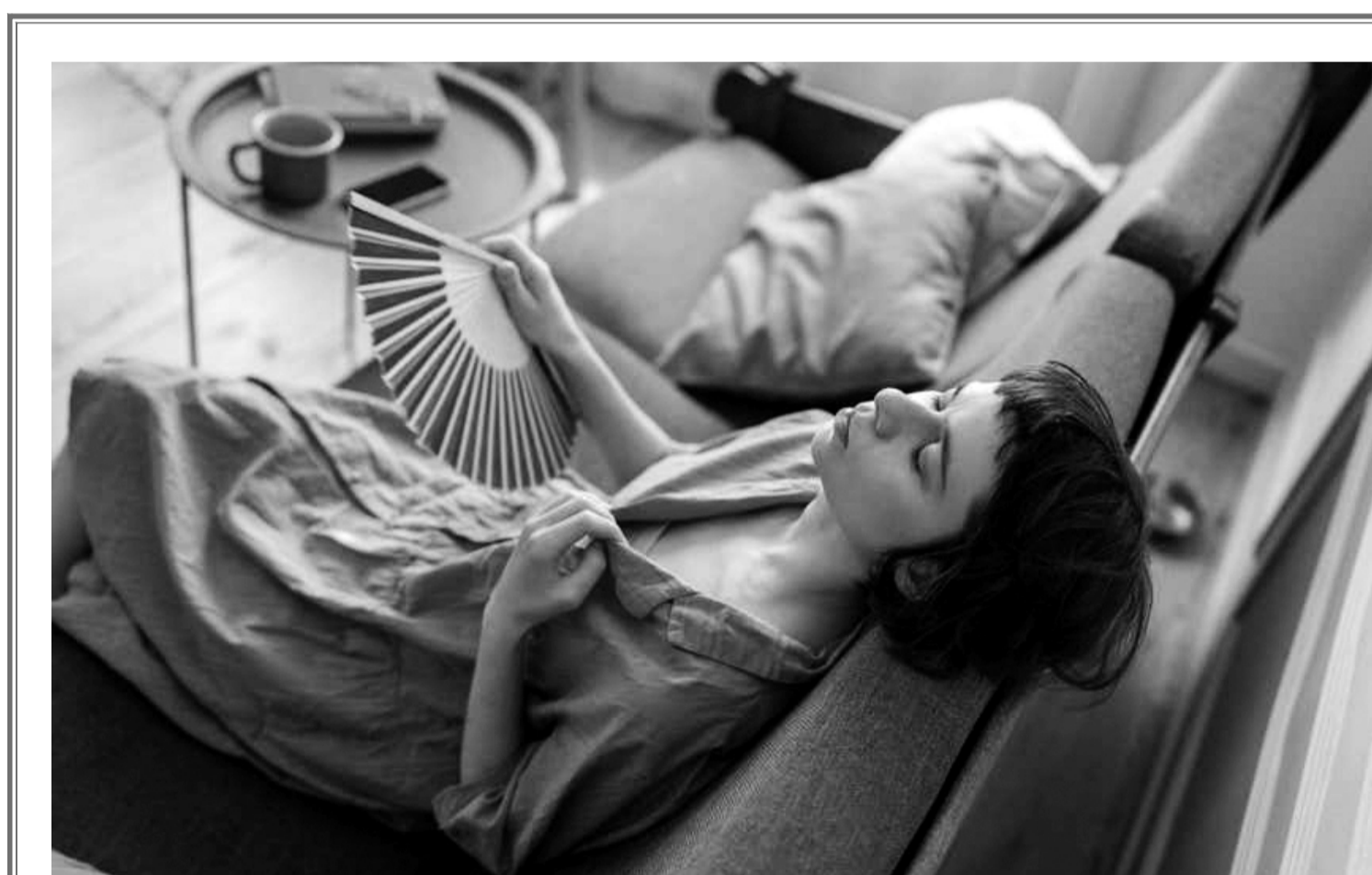
研究人员指出，金字塔建在坚硬的石灰岩上，且重心较低，这些特征也可能降低了地震活动的风险。但他们同时提醒，目前尚无法确定所观察到的抗震能力是否为设计中的有意安排。(赵熙熙)

相关论文信息: <https://doi.org/10.1038/s41598-026-49962-6>



研究人员在金字塔内进行实地测量。

图片来源: Asem Salama



从成年到中年，女性的体温会逐渐升高。

图片来源: Dmitry Marchenko/Alamy

科学此刻

女性成年后 体温越来越高

从18岁到42岁，女性的静息体温每年都会小幅上升，但其原因仍待进一步研究。这项5月20日发表于《科学-转化医学》的研究，为利用温度感应型可穿戴设备追踪衰老过程、检测围绝经期或潜在健康问题提供了可能。

“我们认为体温信号中蕴藏着大量健康信息。”美国斯坦福国际咨询研究所的Marie Gombert-Labeledens说，“希望这项研究能有助于发现新的病症标志，这或许是一个尚未被充分挖掘的健康信息宝库。”

Gombert-Labeledens和同事对上世纪90年代的一项研究的数据进行了分析。该研究要求参与实验的750余名18至42岁女性，每天清晨醒来时用体温计测量口腔或直肠的温度。

读数显示，平均而言，参与者在月经周期的前半段体温较低，而在排卵后的后半段体温较高。许多生育跟踪App就是依据这种体温变化来预测女性的生育窗口期。

研究团队对相关数据进行了更细致的再分析，以探究年龄对月经周期不同阶段体温的影响。

他们发现，从18岁到42岁的每一年

里，参与者的平均体温都会略微升高。最终，在整个月经周期的两个阶段中，35岁及以上参与者的体温都比年轻女性高出约0.05摄氏度。

这一发现与团队此前的研究相吻合。该研究通过智能戒指持续监测发现，42至55岁女性的手指皮肤温度普遍高于18至35岁女性。

Gombert-Labeledens指出，需要进一步研究来解释为什么会出现这种温度变化，但体

温逐年升高可能与激素变化有关，尤其在生育年龄接近尾声时。她说，进入围绝经期后，体温可能会突然升高，引发潮热、盗汗症状，但目前尚不清楚这是否与同样的机制有关。

该研究仅纳入了未使用激素类避孕药且无多囊卵巢综合征等内分泌紊乱疾病的女性，因此上述因素如何随着时间推移影响体温，目前尚不清楚。

另有一项研究表明，更年期后，女性体温往往会回落至较低水平，并变得与男性相似。

Gombert-Labeledens提出，中年女性基础体温升高，也可解释了为何这个年龄段的一些女性普遍感觉不再像以前那样怕冷。“我们推测，中年女性的体温升高可能会影响她们对环境温度的感知和反应。”

Gombert-Labeledens说，随着智能戒指及各类监测体温的可穿戴设备变得日益普及，或许能够识别个体体温趋势中的模式或异常，从而预示更早期的来临、评估生物衰老速度，甚至能检测出早期卵巢癌或其他疾病。(李木子)

相关论文信息:

<https://doi.org/10.1126/sciadv.aeb1175>

手机壳可能是永久化学品和耐药菌富集的“温床”

(上接第1版)

永久化学品如何进入手机壳

发黄变旧的手机壳，看上去只是外观颜色改变了，那么其材质表面有没有变化?

研究人员通过密度泛函理论计算发现，PFOA与TPU分子基团之间存在更强的结合能。这种分子层面的差异在长期高频接触过程中被不断放大，最终导致手机壳中PFOA的吸附量远高于PFOS。频繁接触化妆品残留物和长期缺乏清洁，会显著加速TPU材料的氧化降解。这也是手机壳发黄、发黏的重要原因。

在扫描电镜下，研究人员观察到，原本平整的手机壳已经不再是出厂时光滑平整的高分子材料，而是出现密密麻麻的微孔隙和裂纹。这些微结构不仅会增加PFAS吸附能力，也为细菌提供了更稳定的附着和繁殖空间。

而细菌最喜欢的藏身之处恰恰是这些缝隙。研究发现，那些原本平整的手机壳表面一旦老化和被微孔隙改变，瞬间就成为细菌滋生的“温床”，尤其是葡萄球菌科和伯克氏菌科这些早已临床证实具有较强耐药性的条件致病菌。

功能预测进一步显示，这些细菌能形成生物膜。生物膜不仅起到菌落保护罩的作用，还会变成一面无形的“胶水墙”把PFAS分子牢牢黏附在手机壳表面。这反过来进一步稳定了PFAS的存在，延长了其在物体表面的停留时间。

“相当于化学污染物与微生物之间彼此‘扶持’，PFAS筛选出最顽强的菌群，生物膜则把PFAS牢牢留在表面。这好比两个在各自领域都很难对付的敌人，在手机壳这个不到巴掌大的空间里联手同谋。”徐智敏说。

应关注PFAS在终端消费品使用中的二次迁移

PFAS是目前全球环境监管中最受关注的污染物之一。今年1月1日起，法国以“存在安全替代方案为前提”，全面禁止含PFAS化妆品、服装等相关产品的生产、进口与销售，被认为是全欧洲最严格的PFAS禁令之一。欧盟委员会也计划推动立法以在消费品中全面禁用PFAS。我国自2022年《新污染物治理行动方案》启动以来，持续推进化学物质环境风险筛查，并逐步建立优先管控体系。目前，PFAS已被

列入《优先控制化学品名录(第三批)》，成为优先管控对象。

“全世界都在讨论限制PFAS在出厂产品中的含量，却无人关注PFAS在终端消费品使用过程中”徐智敏表示，这项研究成果首次揭示日常行为、手机保护壳材料老化与环境新污染物富集间的复杂关联，提出“行为-材料-暴露”三元研究框架，为新污染物的环境暴露评估提供了更有力的科学证据。

未来，研究团队将联合多家单位对手机壳表面涂层开展研究，致力于研发出一种既能原位抗菌又能有效减少全氟化合物等有机污染物附着的新颖功能涂层材料，让现代人的高频贴身日用品变得更安全、更绿色。

日常生活中该如何避免手机壳成为健康隐患?研究人员建议，养成定期清洁手机壳的习惯，可使用75%异丙醇或酒精湿巾进行擦拭消毒;避免化妆品残留长期附着在手机壳表面;保持良好的手部卫生习惯，减少污染物持续累积;发现手机壳明显发黄、发黏，出现划痕或老化，应及时更换。

相关论文信息: <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2026.142420>

(上接第1版)

之后的攀枝花钒钛磁铁矿，更是被专家判定为不适合高炉冶炼的“呆矿”。徐元森接下攻关任务，带领团队进行了长达两年的艰苦实验。

他先从冶炼难度大的磁铁矿入手——铁矿中钛含量过高，冶炼过程中形成的高钛熔渣在高温下极不稳定，非常容易变稠，粘在炉内，堵住炉缸。

过去的做法是加大分母，通过在炉料中加入大量废渣、废砖等材料，降低二氧化钛占比。然而，这是一种得不偿失的办法。徐元森从改造实验高炉开始，走出了一条极具普及性的新路线。利用徐元森摸索出的方法，冶炼得到的生铁质量和钒的回收率均明显提高。至今，这套方案仍在使用。

1981年，我国钢铁界权威人士一致认为，该成果“为攀枝花钒钛磁铁矿高炉成功出铁提供了理论依据，为以后的研究和生产奠定了基础”。

这种找准关键问题的做法，也延续到集成电路研究中。

集成电路制造涉及几十道工序，任何一个环节不合格就会前功尽弃。当时，在实验室做成一块样品已属不易，若要大规模应用，还必须保证成品率。

“首先遇到的困难是除尘。”徐元森在一篇回忆性文章中写道，“这些尘粒大都在3微米以下，和电路的线粗细相当，尘粒落在硅片上，既污染了电路，又破坏了平面图形。”

1973年，在徐元森的建议下，上海冶金所考虑改建洁净室。起初，围绕要不要建、如何建，所内存在不同意见。徐元森用实验数据和实际对比结果，逐步统一了大家的认识。

当时，全所没有建筑和净化方面的专业人员。上海冶金所便组建了一支以工人为主体的、干部、技术人员共同参加的“洁净室改建组”。在徐元森的领导下，他们边学边干，自行设计、施工，仅用16个月就建成100级洁净室，满足了大规模集成电路工艺要求。后来，这一经验被推广到国内许多单位。

退休后，徐元森仍保持着对关键问题的敏锐度。

20世纪80年代末至90年代初，徐元森多次赴美国和欧洲考察，针对我国集成电路研制与西方差距扩大的现实建言献策。转向生物芯片领域后，他又像学生一样大量阅读专业资料，带着笔记本去高校旁听相关课程，并在与医生的交流中寻找来自临床一线的“真问题”。

曾领航行业的他，隐于时代浪潮下

2006年，徐元森80周岁。上海微系统所计划为他举办庆祝会，他听说后再三推辞。直到所领导说明庆祝会的主要目的是纪念我国第一块半导体双极型集成电路诞生40周年，让年轻科研人员更好地传承科学精神和学术传统，徐元森才勉强同意。但他仍反复叮嘱：“简单点，再简单点。”

他不习惯站在聚光灯下。取得重要成果后，很多记者想采访徐元森，他却很少答应，因为“不愿被捧得很高，更不想也不会借机吹嘘自己”。即便接受采访，他也坚持两个原则：实事求是，未开鉴定会的不报道、鉴定结果出来前不报道；宣传集体，不突出个人。

这种自我“退后”，几乎贯穿了他的科研和生活。每次申报科研项目时，他总坚持把每一位参与者的名字都署上；审阅媒体报道时，他常常删去突出自己的语句，代之以对集体力量的强调。

徐元森一生中绝大部分精力都花在学术研究和指导学生上。多位学生后来成为我国微电子领域的中坚力量，也有人走上政府或企业的重要岗位。而他本人当过最大的“官”就是研究室主任。他常提醒学生：“既然选择了做学问，就不要三心二意。又想做学问，又想当官，学问是做不好的。”

80多岁时，徐元森仍坚持每天上班。上海微系统所提出给他配车，他一口回绝，“不想增加单位负担”。研究所领导去看望他，问他需要什么帮助，他总是连声说“没有没有”，生怕给组织添麻烦。

2011年7月住院后，徐元森明确表示不希望所领导前去探望。但只要是在科研上有了新想法，他又会把相关所领导、研究室主任叫到医院，交流科研发展的最新动态和自己的思考。接受治疗期间，他甚至把病情指标的变化绘成曲线图，作为“第一手活标本”，要求学生查资料、作对比研究。

“科学有险阻，苦战能过关。求实又求真，才能有所获。”这是徐元森写给同事和学生的；他留给子女的则是“求是求实，为国为民”。前一句是治学方法，后一句是人生底色。

一个人能在一个领域做出成绩，已属不易。徐元森却在冶金、集成电路、生物芯片3个看似相去甚远的领域，从头开路并取得累累硕果。今天再看，芯片已经成为全球科技竞争中的关键词，生命健康检测也成为前沿交叉领域的重要方向，这更凸显了徐元森当年所走的路的艰难和重要。

时代浪潮继续向前，最初开路的人常常隐入深处。而浪潮之所以能够奔涌，是因为有人曾在更早的时候俯下身，把第一块基石放稳。

徐元森：两次转变科研方向，只为国家需要