

中文概要

镍催化烯烃与硝基芳烃的原位选择性还原氢胺化

李震, 王加旺, 陆熹[✉], 傅尧[✉]

(中国科学技术大学应用化学系, 安徽合肥 230026)

[✉]通讯作者: 陆熹, E-mail: luxl@mail.ustc.edu.cn; 傅尧, E-mail: fuyao@ustc.edu.cn

摘要: 通过烯烃和硝基芳烃之间的还原偶联合成芳香胺非常具有吸引力。然而, 这一方法仍然存在多种挑战。本文报道了一种条件温和的镍催化烯烃与硝基芳烃的还原氢胺化反应。该反应表现出原位选择性, 并且能够制备多种含有伯烷基和仲烷基的芳香胺。反应能够耐受多种官能团, 为类药胺类化合物的合成提供了有效途径。

关键词: 镍; 烯烃; 硝基芳烃; 还原氢胺化; 碳-氮偶联

引用格式: JUSTC, 2022, 52(12): 1

量子平方: 一个聚焦于量子化学模拟的量子计算平台
范逸, 刘杰, 曾雄志, 徐直前, 商红慧, 李震宇[✉], 杨金龙

(中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家研究中心, 安徽合肥 230026)

[✉]通讯作者: 李震宇, E-mail: zyli@ustc.edu.cn

摘要: 量子计算机为量子化学的发展提供了新的机遇。本文开发了一个多功能、可扩展、高性能的软件包“量子平方”, 用于发展量子化学领域的量子算法以及启发于量子计算的经典算法。使用“量子平方”软件包, 可以便捷地将波函数和哈密顿量映射到量子比特空间中, 然后根据软件内部集成的或由用户自主编写的量子算法生成对应的量子线路。之后, 该线路可以被接入可用的量子计算机硬件, 或者使用经典计算机上的量子线路模拟器运行。本文使用“量子平方”进行了高达 72 量子比特的模拟测试, 测试结果展现了其优秀的性能。研究展示了“量子平方”软件包在分子体系和周期性体系模拟中的应用, 并给出了性能分析。

关键词: 量子算法; 量子线路; 电子结构; 矩阵乘积态

引用格式: JUSTC, 2022, 52(12): 2

黑磷-石墨混合物作为锂离子调节器实现稳定的锂沉积

谢焕玉*, 王超楠*, 周恩, 金洪昌[✉], 季恒星[✉]

(中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家研究中

心, 中国科学技术大学应用化学系, 安徽合肥 230026)

*共同第一作者

[✉]通讯作者: 金洪昌, E-mail: jhckimi@ustc.edu.cn; 季恒星, E-mail: jihengx@ustc.edu.cn

摘要: 锂金属(Li)负极因其高比容量和低氧化还原电位而被认为是高能量密度锂二次电池最有应用前景的候选材料。然而, 锂金属在电池循环过程中的不均匀沉积导致的锂枝晶问题严重阻碍了锂金属负极的实际应用。本文将黑磷-石墨(BP-G)混合物引入作为锂金属负极的人工保护层。具有亲锂性的二维少层黑磷与具有高电子电导的石墨相结合, 可以作为离子调节器来调节锂离子的迁移, 从而实现均匀稳定的锂沉积。由于锂枝晶的生长受到抑制, 锂金属在Li||Cu半电池中的库仑效率在500多个循环中达到>98.5%; 在Li||Li对称电池中, 极化电压保持在<50 mV, 循环寿命达到2000 h以上。此外, 带有BP-G锂离子调节器的LiFePO₄(LFP)||Li全电池比未修饰的锂金属负极电池具有更高的比容量和更好的循环稳定性。因此, BP-G锂离子调节器的引入被证明是实现可充电锂金属电池稳定锂沉积的有效方法。

关键词: 锂金属沉积; 黑磷; 石墨

引用格式: JUSTC, 2022, 52(12): 3

一种用于全固态锂电池的兼具高离子电导率与可变形性的尖晶石型氯化物正极材料

郝继鹏, 马骋[✉]

(中国科学技术大学材料科学与工程系, 安徽合肥 230026)

[✉]通讯作者: 马骋, E-mail: mach16@ustc.edu.cn

摘要: 全固态锂电池因其在安全性和能量密度方面的优势而被普遍认为是下一代储能设备。全固态电池中使用固态电解质取代了传统液态电池中的有机电解液, 因而需要开发具备不同特性的新型正极活性材料。全固态锂电池中的固固接触需要活性物质具有良好的可变形性。此外, 活性物质应当具备更高的离子电导率从而减少正极中离子导电剂的使用, 进而获得更高的容量。本文报道了一种尖晶石型氯化物正极材料Li_{2-2x}Mn_{1-x}Zr_xCl₄, 其具有良好的可变形性和高离子电导率(25 °C下的离子电导率上至0.16 mS·cm⁻¹)。使用具备最高离子电导率的组分LiMn_{0.5}Zr_{0.5}Cl₄作为正极组装的全固态电池在室温下实现了200圈的稳定循环。

关键词：全固态锂电池；正极材料；离子电导率；可变形性；尖晶石

引用格式：JUSTC, 2022, 52(12): 4

机器学习在数据包络分析模型中的应用：一种用于指标选择的智能机制

吴杰, 吴雨濛[✉]

(中国科学技术大学管理学院, 安徽合肥 230026)

[✉]**通讯作者：**吴雨濛, E-mail: wuyumeng@mail.ustc.edu.cn

摘要：指标选择一直是数据包络分析中一个引人注目的问题。随着大数据时代的到来, 学者们面临着更加复杂的指标选择情形。机器学习的蓬勃发展为解决这一问题提供了机会。然而, 在容易过拟合或欠拟合的情形下, 如果使用不恰当的方法, 很可能会筛选出质量差的指标。一些学者已经率先使用最小绝对收缩和选择算子来克服过拟合情形下的指标选择难题, 但迄今为止, 研究者并没有提出将数据包络分析所面临的大数据场景划分为容易过拟合或欠拟合的情形, 也没有尝试为这两种情形开发一套完整的指标选择体系。为了填补这些研究空白, 本研究采用了机器学习方法, 并在此基础上提出了一种平均得分法。蒙特卡洛模拟表明, 最小绝对收缩和选择算子在过拟合情形下的指标选择问题中表现优异, 但在欠拟合情形下往往不能选择出好的指标, 而集成方法则能在欠拟合情景下占据一定程度的优势; 至于本文提出的平均得分法, 则在两种情形下都有较好的表现。基于不同方法的优势和局限性, 本研究提出了一种智能指标选择机制, 以协助数据包络分析领域的学者们进行指标的选择。

关键词：数据包络分析; 过拟合; 欠拟合; 机器学习; 指标选择

引用格式：JUSTC, 2022, 52(12): 5

基于深度学习方法的肝癌伴胆道癌栓患者的术前诊断
刘金明¹, 吴嘉艺², 刘安然¹, 白燕南², 张洪¹[✉], 严茂林²

(1. 中国科学技术大学管理学院, 安徽合肥 230026;
2. 福建省立医院肝胆胰外科, 福建福州 350001)

[✉]**通讯作者：**张洪, E-mail: zhangh@ustc.edu.cn

摘要：由于伴胆道癌栓 (BDTT) 的肝细胞癌 (HCC) 患者的手术预后与普通肝癌患者相比有显著的差异, 因此胆管癌栓的术前诊断在临床上十分重要。虽然扩张的胆管 (DBDs) 可以作为诊断胆道癌栓的生物标志物, 但医生在报告影像学扫描结果时很容易将其忽视, 导致临床上对胆道癌栓存在较高的漏诊率。本

文的目的是开发一种基于医学影像的自动化诊断胆道癌栓的人工智能 (AI) 框架。本文提出的 AI 框架包括两个阶段。首先, 采用目标检测神经网络 Faster R-CNN 来识别扩张胆管; 然后, 如果被识别出存在扩张胆管的图像的比例超过某个阈值, 则诊断肝癌患者体内存在胆道癌栓。基于从 32 名肝癌患者 (16 名伴胆道癌栓患者和 16 名普通肝癌患者, 1:1 匹配) 收集到的 2354 张 CT 图像, 所提出的 AI 诊断框架在扩张胆管识别层面上实现了 0.92 的平均真阳率, 在伴胆道癌栓患者诊断层面上实现了 0.81 的真阳率。本文所提方法在伴胆道癌栓患者诊断层面上的 AUC 值为 0.94 (95% CI: 0.87, 1.00), 相比之下, 基于术前临床变量进行诊断的随机森林取得的 AUC 值为 0.71 (95% CI: 0.51, 0.90)。在实际数据集上取得的高精度结果表明, 本文提出的基于 CT 图像的 AI 框架在诊断和定位胆道癌栓方面是成功的。

关键词：肝细胞癌; 胆管癌栓; 目标检测; 人工智能; 深度学习

引用格式：JUSTC, 2022, 52(12): 6

基于去相机偏差和动态更新记忆模型的无监督行人重识别研究

张军, 田新梅[✉]

(中国科学技术大学电子工程与信息科学系, 安徽合肥 230027)

[✉]**通讯作者：**田新梅, E-mail: xinmei@ustc.edu.cn

摘要：近年来, 无人监督行人重识别技术取得了长足的进步。该技术从大量未标记行人数据库中检索感兴趣的行人在不同相机下的图片。然而, 目前的研究还存在一些问题, 例如跨摄像头行人图片的影响和伪标签噪声等。为了解决这些问题, 本文从两个方面进行研究: 消除相机偏差和动态更新记忆模型。在去除相机偏差方面, 基于一个可学习的通道注意力模块从特征图中提取仅与摄像头相关的特征, 从而消除全局特征中的相机偏差, 得到可以代表行人的鲁棒特征。在动态更新记忆模型方面, 由于实例特征不一定属于伪标签所标识的行人类别, 因此本文采用一种基于实例特征与类别特征之间距离的方式动态更新记忆模型, 使类别特征趋于真实特征。我们将相机偏差去除和记忆模型动态更新结合起来, 以更好地解决这些问题。大量实验表明, 本文提出的方法在无监督行人重识别任务中的性能优于其他方法。

关键词：行人重识别; 无监督学习; 相机偏差; 动态更新

引用格式：JUSTC, 2022, 52(12): 7