

## 中文概要

2023 年第 53 卷第 3 期

## 要览

零维界面的空间位阻效应调控

夏幼南<sup>1,2</sup>✉

(1. 美国佐治亚理工学院与埃默里大学生物医学工程系, 佐治亚州亚特兰大 30332; 2. 美国佐治亚理工学院化学与生物化学学院, 佐治亚州亚特兰大 30332)

✉通讯作者: 夏幼南, E-mail: younan.xia@bme.gatech.edu

引用格式: JUSTC, 2023, 53(3): 0301

## 综述

处理强关联量子杂质系统的费米子级联运动方程方法的最新进展

曹佳安<sup>1</sup>, 叶绿洲<sup>1</sup>, 徐瑞雪<sup>1</sup>, 郑晓<sup>1,2</sup>✉, 严以京<sup>3</sup>

(1. 中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家研究中心&量子信息与量子物理协同创新中心, 安徽合肥 230026; 2. 复旦大学化学系, 上海 200433; 3. 中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家研究中心&能源材料化学协同创新中心, 安徽合肥 230026)

✉通讯作者: 郑晓, E-mail: xz58@ustc.edu.cn

摘要: 近年来, 由于强关联量子杂质系统(QIS)表现出多样化的、有趣新颖的量子现象, 因此对它的研究也成为了一个备受关注的课题。级联运动方程方法(HEOM)是描述与环境线性耦合的量子杂质系统的最流行的数值方法之一。这篇综述全面介绍了形式上严格、数值上收敛的 HEOM 方法, 其中包括量子杂质系统的模型化描述和费米子 HEOM 形式的概述。此外, 各种各样的谱分解方案和级联方程的截断方案被提出和发展, 显著地提高了 HEOM 方法的精度和效率, 尤其是在低温区域。通过对非平衡量子输运和强关联近藤态的表征的数值模拟, 以及对非平衡量子的热力学研究, HEOM 方法在处理强关联问题上的实用性和有效性得到了充分地例证。

关键词: 量子杂质系统; 级联运动方程; 开放量子体系; 强电子关联

引用格式: JUSTC, 2023, 53(3): 0302

用于治疗诊断学的手性无机纳米材料

王雅欣<sup>\*</sup>, 童志<sup>\*</sup>, 周雅洁, 郭雪儒, 张铭江, 赵珊珊, 庄涛涛✉

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

\*共同第一作者

✉通讯作者: 庄涛涛, E-mail: tzhuang@ustc.edu.cn

摘要: 无机手性纳米材料因其优越的手性光学活性和物理性能而被广泛关注, 其中贵金属和半导体等手性材料的制备取得了重大进展。本文介绍了几种具有良好生物相容性和低细胞毒性的手性纳米材料, 并重点介绍了它们的合成方法以及手性光学特性。此外, 我们总结了手性纳米材料在一些常见疾病的诊断和治疗中的应用, 如阿尔茨海默症(AD)、帕金森症(PD)、糖尿病甚至癌症等, 无机手性的引入将为诊断和治疗这些疾病提供一种新的策略。

关键词: 无机手性; 纳米结构; 治疗诊断学; 疾病

引用格式: JUSTC, 2023, 53(3): 0303

## 论文

中心电子富集的 NO-FeN<sub>4</sub> 位点作为质子交换膜燃料电池的高级酸性氧还原反应电催化剂钟程安<sup>1\*</sup>, 周天培<sup>1,3\*</sup>, 张楠<sup>2</sup>, 陈明龙<sup>1</sup>, 谢友学<sup>1</sup>, 闫文盛<sup>2</sup>, 储旺盛<sup>2</sup>, 郑旭升<sup>2</sup>, 徐倩<sup>2</sup>, 葛建开<sup>1</sup>, 吴长征<sup>1,3</sup>✉

(1. 中国科学技术大学化学与材料科学学院, 中国科学院纳米科学卓越创新中心, 安徽合肥 230026; 2. 中国科学技术大学国家同步辐射实验室, 安徽合肥 230029; 3. 合肥综合国家科学中心能源研究所, 安徽合肥 230031)

\*共同第一作者

✉通讯作者: 吴长征, E-mail: czwu@ustc.edu.cn

摘要: 开发非贵金属催化剂, 特别是用于碳上铁氮(FeNC)材料的催化剂, 对于质子交换膜燃料电池(PEMFC)的广泛应用是一个迫切需求。然而, 传统铁氮位点在酸性条件下的氧还原反应(ORR)活性较差, 严重阻碍了其电池性能的进一步提高。本文通过限域的小分子合成策略, 大规模合成了具有一氧化氮(NO)基团轴向修饰的 FeN<sub>4</sub> (表示为 NO-FeN<sub>4</sub>)。得益于 NO 基团的强吸电子效应, 与传统的 FeN<sub>4</sub> 样品相比, 富含电子中心 FeN<sub>4</sub> 位点表现出超高的 ORR 活性, 具有三倍高的质量活性(0.85 V 时为 1.1 A·g<sup>-1</sup>), 以及全四电子反应选择性。此外, 用所制备的电催化剂组装的质子交换膜燃料电池也表现出显著增强的

峰值功率密度 ( $>725 \text{ mW} \cdot \text{cm}^{-2}$ )。这项工作为合理设计用于氧还原的先进  $\text{M-N}_x$  非贵金属电催化剂提供了一种新的方法。

**关键词:** 大规模定制合成; 氧还原反应; 质子交换膜燃料电池; 限域小分子合成

**引用格式:** JUSTC, 2023, 53(3): 0304

**由  $\alpha$ -氨基酸合成 pH 响应超分子聚多肽纳米粒用于联合化学和光热治疗**

钱红云<sup>1</sup>, 党慧萍<sup>1</sup>, 滕畅畅<sup>1</sup>, 尹大龙<sup>2</sup>, 闫立峰<sup>1</sup>✉

(1. 中国科学技术大学化学物理系, 安徽合肥 230026;  
2. 中国科学技术大学附属第一医院肝胆外科, 安徽合肥 230001)

✉**通讯作者:** 闫立峰, E-mail: lfyan@ustc.edu.cn

**摘要:** 以  $\alpha$ -氨基酸为原料, 首先合成了 L-谷氨酸和 L-赖氨酸的 N-硫代羧酸酐单体 (NTA), 而后聚合制备了聚多肽共聚物 P (Glu-co-Lys)。该共聚物可以通过超分子自组装形成聚多肽纳米粒, 可以包裹憎水性药物。形成的纳米粒具有 pH 响应特性, 在正常生理环境中 (pH 7.4) 纳米粒稳定存在, 但在肿瘤弱酸性环境中 (pH 5.5) 纳米粒解体并可释放出包裹的药物。采用该超分子纳米粒可同时负载化疗药阿霉素 (DOX) 和近红外光热染料 (HQS-Cy), 细胞实验表明, 该纳米粒可以实现 pH 响应的负载药物和染料的递送, 并可以实现近红外二区荧光成像引导的化疗-光热治疗的联合治疗。

**关键词:** 有机近红外染料; 纳米粒; 聚多肽; 化疗; 光热治疗

**引用格式:** JUSTC, 2023, 53(3): 0305

**人源 CLC-7/Ostm1 复合物结构揭示一种新构象**

张峙轩\*, 陈龙\*, 贺金, 余继✉

(中国科学技术大学生命科学与医学部生命科学学院,

安徽合肥, 230027)

\*共同第一作者

✉**通讯作者:** 余继, E-mail: jishe@ustc.edu.cn

**摘要:** CLC-7 是位于溶酶体膜上的  $\text{Cl}^-/\text{H}^+$  交换转运蛋白。CLC-7 及其  $\beta$  亚基 Ostm1 的缺陷均会导致骨质疏松症和神经退行性疾病。本文解析了一个具有 3.6 Å 分辨率的人源 CLC-7/Ostm1 复合物的冷冻电镜结构。该结构揭示了 CLC-7/Ostm1 异源四聚体的一种新构象, 其中 CLC-7 的胞质结构域可能由于高度柔性而缺失。柔性的胞质结构域无法限制 CLC-7 的跨膜结构域, 从而允许两个亚基相对远离, 使得 CLC-7 跨膜结构域的二聚界面与已知具有稳定胞质结构域的结构相比减小了约一半。这种二聚界面的变化影响了多个骨质疏松症相关残基的相互作用。

**关键词:** CLC-7; Ostm1; 骨质疏松症; 氯离子转运蛋白; 单颗粒冷冻电镜

**引用格式:** JUSTC, 2023, 53(3): 0306

**同向马达蛋白在细胞内的运输**

谢可为, 汪骞✉

(中国科学技术大学物理系, 安徽合肥 230026)

✉**通讯作者:** 汪骞, E-mail: wqq@ustc.edu.cn

**摘要:** 细胞内物质的主动运输主要通过马达蛋白这一特殊的纳米机器来完成。在运输过程中, 马达蛋白之间的协作性显著影响着距离、速度等重要的运输特性。为了理解这一机制, 我们结合 Gillespie 模拟和理论推导, 解释了单马达蛋白的力学特性如何影响了多个马达蛋白之间的协作性, 进而对运输距离进行调节。我们建立了一个深度学习模型来帮助快速获得马达蛋白的运动参数。我们的结果揭示了同向马达蛋白在细胞内运输的物理本质。

**关键词:** 马达蛋白; 胞内运输; 深度学习

**引用格式:** JUSTC, 2023, 53(3): 0307