

选任务:针对约1万个人类蛋白,对5亿个化合物进行筛选。在仅使用8块GPU的情况下,模型在24 h内完成了超过10万亿个蛋白-配体对的打分。该筛选共获得200多万个候选分子,覆盖约2万个结合口袋,相当于人类基因组的1/2。所有筛选数据均已公开,以支持广泛的药物研发应用。

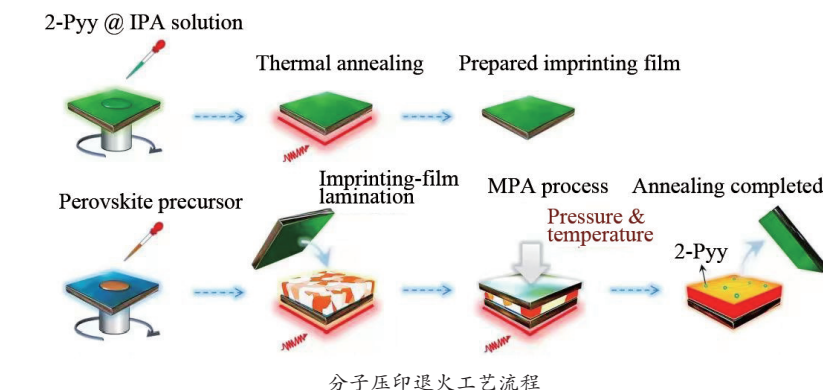
研发人员表示,未来 Drug-CLIP将与科研及产业生态合作伙伴深度协作,聚焦抗癌、传染病、罕见病等领域,加速新靶点与 First-in-class 药物(首创新药)发现。团队将持续优化引擎性能、拓展支持模态,助力构建更智能、高效、普惠的全球药物创新生态。

(综合:《Science》、清华大学官网、中国科技网、《中国教育报》《光明日报》)

“分子压印”与“分级壳层” 奏响钙钛矿维稳双重奏

钙钛矿材料在太阳能电池和显示技术领域的应用代表了当代光电子学的前沿突破,其核心优势源于独特的 ABX_3 晶体结构所赋予的优异光电特性。在太阳能电池方向,钙钛矿凭借高光吸收系数、长载流子扩散长度和可调带隙等特性,实现了从3.8%到26.1%的效率飞跃,而其在显示材料领域的应用则主要依托于高光致发光量子产率(photoluminescence quantum yield, PLQY)和窄发射光谱的特性,为下一代显示器提供了革命性解决方案。

尽管钙钛矿在2个领域都展现出巨大潜力,但仍面临共同的



分子压印退火工艺流程

(图片来源:厦门大学官网)

挑战——材料的稳定性。影响钙钛矿结构稳定的主要有内外2个因素,分别是材料制备过程的退火(annealing)阶段产生缺陷的“内因”,以及材料本身对水分、氧气、光照和热敏感的“外因”。

退火在钙钛矿薄膜制备中是一个“双刃剑”般的关键步骤。虽然它的目的是为了去除溶剂、促进结晶,但如果控制不当(温度过高、时间过长或环境不适),常会诱发晶体缺陷的产生与累积,制约器件稳定运行。厦门大学材料学院张金宝团队与西安交通大学梁超团队合作,提出了一种全新的“固态分子压印退火”方法,在加热阶段精准、实时地控制缺陷的产生和变化,实现了在钙钛矿结晶的同时,同步进行晶体结构稳定化控制。2026年1月9日,相关研究成果发表于《Science》。

这种方法的具体操作是:在加热退火过程中,将一种吡啶基分子模板直接压印在钙钛矿薄膜表面,不需要添加任何额外溶剂,就能从分子层面“实时约束”钙钛矿的缺陷演化。其中,优化设计的2-吡啶乙胺的分子和钙钛矿表面欠配位的铅离子形成稳定的双齿配位结构,在加热退火过程

有效稳固铅-碘键的连接网络,从而从源头上阻止碘空位缺陷的产生和扩散。实验数据表明,用该法制作的厘米级(1 cm^2)钙钛矿太阳能电池,效率接近25%。在 85°C 、60%相对湿度(ISOS-L-3标准)的连续工作条件下运行1600余小时后,电池仍可保持98%以上的初始效率。

针对显示常用的体相钙钛矿晶体(PeNCs)材料,光或热诱导的晶格膨胀和拉伸应变已被确认是关键降解途径,它们会削弱离子键合并加速离子迁移、相分离和缺陷形成。首尔大学 Tae-Woo Lee 等设计分级壳层(hierarchical shell, HS)结构,由相互键合的硫酸铅、二氧化硅和聚合物网络组成,可在 PeNCs 中同时实现高 PLQY 和商业可行的使用寿命。2026年1月16日,相关研究成果发表于《Science》。

该 HS 设计通过引入“晶格-界面互锁”的稳定化策略,对钙钛矿晶格形成空间约束并对表面进行锁定,从而抑制由晶格软化、离子迁移及界面反应驱动的降解途径。最终制备的薄膜实现了100.0%的 PLQY(平均值为98.6%),显著降低了非辐射损失,

并将自吸收转化为有利的光子循环过程。

(综合:《Science》、厦门大学官网、科学网、光明网)

绝热房间“最热点”为何总在墙角

设想一个绝热房间(墙壁既不吸热也不放热),在房间某处短暂加热后,热量会从高温区域向低温区域扩散并最终趋于均匀。人们基于直觉认为,在时间足够长但尚未平衡时,房间极热或极冷点更可能出现在墙面边缘,而非房间内部——这正是美国数学家 Rauch 于 1974 年提出的“热点猜想”。

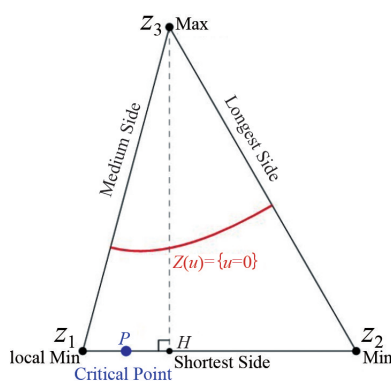
华南理工大学数学学院姚若飞团队联合西安交通大学陈红斌、澳门大学桂长峰等研究人员,成功破解了“热点猜想”这一关键难题。2026 年 1 月 13 日,相关研究成果发表于《Inventiones Mathematicae》。

从数学角度来看,温度的演化遵循带有绝热(neumann)边界条件的热方程。在时间足够长的情况下,温度分布主要由“衰减最慢的首个非平凡模式”主导,即拉普拉斯算子的第二 neumann 特征函数(第一特征函数为常数,对应完全均温状态)。拉普拉斯算子的特征函数,就是“系统最自然、最基本的变化模式”,它规定了在给定几何形状和边界条件下,温度、振动、声压、浓度等场量,最容易以什么空间形态变化。因此,在数学家眼中,“热点猜想”可等价表述为:对于平面上的凸区域,

拉普拉斯算子的第二 neumann 特征函数的最大值与最小值只能在区域边界处取得。

半个多世纪以来,“热点猜想”持续吸引着国际数学界的广泛关注。菲尔兹奖得主陶哲轩、Wendelin Werner 及美国艺术与科学院院士、麻省理工学院 David Jerison 等多位顶尖学者,围绕不同几何区域和特殊情形取得了一系列重要进展。然而,作为最基本的凸多边形之一,平面三角形虽结构简单,但因缺乏连续对称性,且无法像多边形进行拆分,因此角点带来的边界奇异性会放大到整个区域,使得扩散与振动模式对几何细节高度敏感。这种“最小却最不平衡”的结构,恰恰成为检验数学物理方法极限的典型模型。

在这项研究中,姚若飞等系统揭示了三角形中第二 neumann 特征函数的几何结构,证明其内部至多存在一个鞍型临界点(热场中的“平衡节点”),而全局极值必然出现在最长边的端点。这一结果不仅解决了多个长期悬而未决的数学猜想,也表明在缺乏对称性的



三角形域上的热点猜想:最大最小值的准确位置、临界点个数和位置
(图片来源:华南理工大学官网)

简单几何结构中,扩散与振动的最强响应仍受到严格的几何约束,为谱几何与工程物理问题提供了重要理论基准,如材料的结构疲劳分析、热应力集中判断等。

(综合:《Inventiones Mathematicae》、华南理工大学官网、《中国科学报》)

“拍摄”原子级碰撞瞬间证实 87 年前量子力学预言

在探索宇宙中最神秘成分——暗物质的过程中,一项长期悬而未决的物理效应在中国的实验室中得到了直接确认。利用自主研发的专用气体探测器和像素读出芯片,由中国科学院大学主导的联合研究团队,在实验中直接观测到中子与原子核碰撞过程中的米格达尔(Migdal)效应,不仅证实了 87 年前的量子力学预言,也为搜寻宇宙中更轻的暗物质粒子提供了关键实验依据。2026 年 1 月 15 日,相关研究成果发表于《Nature》。

Migda 效应是 1939 年苏联科学家 Migdal 通过量子力学计算,描述的是在原子核受到快速冲击时,电子也会因核的突然加速而被“激发”或甩出原子,从而产生可探测的电子信号。理论上,这种同时出现的核反冲与电子信号可极大提升对极轻质量暗物质粒子的探测灵敏度,但长期以来,这一效应在受控实验中从未被直接观察到。

研究团队自主研发了“微结构气体探测器+像素读出芯片”组合的超灵敏探测装置,相当于可拍摄“单原子运动中释放电子过