



强星冕物质抛射可能引发快速射电暴

(图片来源:地球网)

内太阳活动引发的日冕物质抛射极为相似——恒星通过剧烈活动抛射出携带磁场的等离子体云,当这些物质穿过观测视线时,便会引发法拉第旋转量的显著变化。

进一步的模型比对与物理分析表明,假设重复快速射电暴 FRB 20220529 起源于一颗孤立的中子星,现有理论无法解释如此大幅且快速的磁环境突变;而如果其处于双星系统中,来自伴星的剧烈活动(如强星冕物质抛射)或双星轨道的特殊几何结构,就能自然且合理地解释为什么法拉第旋转量出现了急剧飙升又回落的现象。这一发现为快速射电暴起源于双星系统提供了强有力的证据。

(综合:《Science》、中国科学院紫金山天文台官网、中国科学院官网、央视网新闻网)

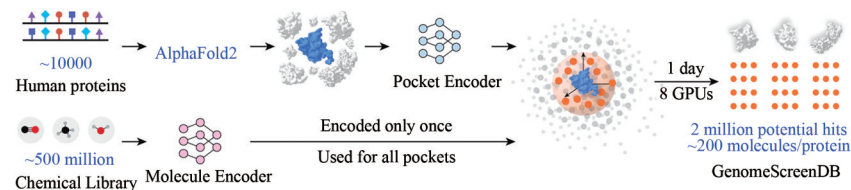
药物筛选平台首次实现人类基因组级靶点全覆盖

在人类可成药基因组中,仍有相当大一部分尚未被小分子治疗药物靶向。随着 AlphaFold 等

蛋白结构预测技术的突破,全基因组药物发现正逐渐成为现实。然而,现有的虚拟筛选工具远不能满足这一需求。无论是传统的分子对接方法,还是近年来发展的深度学习方法,其计算成本都过于高昂,难以覆盖基因组尺度的靶点筛选。

清华大学智能产业研究院兰艳艳团队联合生命学院、化学系团队创新研发人工智能(AI)驱动的超高通量药物虚拟筛选平台 DrugCLIP,筛选速度对比传统方法实现了百万倍提升,同时在预测准确率上也取得显著突破。2026年1月9日,相关研究成果发表于《Science》。

DrugCLIP 是一种用于快速、精准虚拟筛选的对比学习框架。



DrugCLIP 技术实现了基于 5 亿化合物库的全基因组虚拟筛选,在 8 台 GPU 上仅用 1 d 就完成了对约 10000 个 AlphaFold 预测的人类蛋白质结构的筛选

(图片来源:《Science》)

该方法将蛋白结合口袋与小分子编码到共享的潜在表示空间中,训练过程同时利用了大规模合成数据以及实验解析的蛋白-配体复合物结构。借助类似现代搜索引擎的稠密检索(dense retrieval)技术,可以高效地使用蛋白靶点查询超大规模化合物库。

结果表明,在 DUD-E 和 LIT-PCBA 2 个广泛使用的虚拟筛选基准数据集上,DrugCLIP 在速度与准确性方面均优于传统分子对接方法以及当前最先进的深度学习模型。该方法在不同化学骨架、不同蛋白家族之间同样表现出良好的泛化能力,并且对结构扰动具有较强鲁棒性。在实验验证中,DrugCLIP 成功识别出 5-羟色胺 2A 受体(5HT2AR)和去甲肾上腺素转运体(NET)的高效配体,这 2 个靶点在精神类疾病中具有关键作用。其中,2 种 5HT2AR 激动剂的半数有效浓度(EC50)均低于 100 nmol/L;2 种 NET 抑制剂则通过冷冻电镜结构解析获得了结构验证。

为提升对 AlphaFold 预测结构的适用性,研究团队进一步开发了 GenPack——一种生成式口袋精修模块,用以提高结合口袋识别的精度。研究团队将 DrugCLIP 应用于一次全基因组虚拟筛

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。

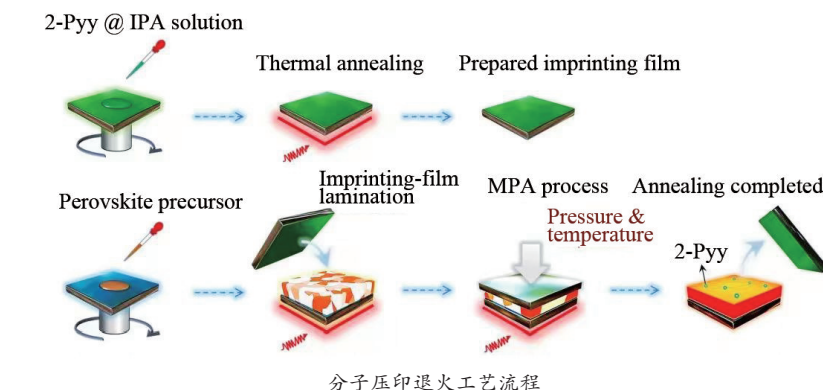
研发人员表示,未来 Drug-CLIP将与科研及产业生态合作伙伴深度协作,聚焦抗癌、传染病、罕见病等领域,加速新靶点与 First-in-class 药物(首创新药)发现。团队将持续优化引擎性能、拓展支持模态,助力构建更智能、高效、普惠的全球药物创新生态。

(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,