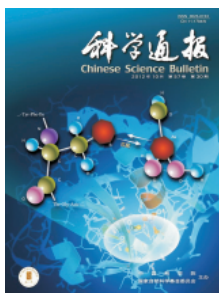


## · 科技期刊亮点 ·

## 预测酶催化反应的分子间活性



辽宁师范大学化学化工学院**赵东霞**等基于 HSAB 原理和局域 HSAB 原理提出了广义活性指标,包括广义 Fukui 函数和广义局域软度,从而可以预测分子之间发生反应的活性位点。

在概念密度泛函理论中,由于 Fukui 函数的限制性条件,它只能作为预测分子内部各个位点活性的指标,而预测分子间反应的活性位点则需要使用局域软度,具有很大的局限性。目前,已经将广义活性指标成功地应用到了一些小体系的反应中,如 Diels-Alder 反应。

为了进一步验证广义活性指标的合理性与准确性,研究组将其应用到大的生物分子体系中,利用广义局域软度匹配规则,研究了酶催化反应的分子间活性位点的选择。研究发现,广义局域软度在预测分子间活性方面能够给出合理的预测。然而,原局域软度结合软度的匹配原则在预测接近真实体系的分子间活性的时候,却得到与实验相反的结果。

《科学通报》[2012-10-23]

设计协作分集 OFDM 系统中的  
时频同步方案

西安电子科技大学综合业务网理论及关键技术国家重点实验室**郭漪**等针对协作分集 OFDM 系统中中继到目的端的同步,设计了一种新的训练序列结构并提出了相应的时频同步方案。

在协作分集系统中,不同中继与目的端之间信号的时间延迟和频率偏移均不相同,因而同时估计各中继与目的端之间的定时和频率偏移是协作分集系统同步中最关键、最具挑战性的部分之一。

本研究在定时同步方面,首先利用训练序列的时域共轭对称性完成粗定时同步,在此基础上进一步通过接收信号与本地时域训练序列分段移动相关完成细定时同步;在频率同步方面,它利用频域训练序列良好的自相关性通过分段移动相关估计整数倍频偏,利用前后两个相同训练符号对应子载波上的相位差估计小数倍频偏。理论分析与仿真结果表明,相比传统方案,该方案不仅具有更好的定时和频率偏移估计性能,而且复杂度大大降低。



《中国科学 F 辑》[2012-09-27]

发现大气中硫酸盐微粒与气候冷  
暖相关

日本北海道大学 **Yoshinori Iizuka** 等通过对南极冰芯进行分析后发现,大气中硫酸盐微粒的变化与 30 万年来气候冷暖变化相关,硫酸盐微粒越多的时期气候越寒冷。相关研究成果发表在 10 月 4 日出版的 *Nature* 杂志上。



大气中的硫酸盐主要是来自海水中的盐分,容易成为云层微滴的核心。在理论上,大气中的硫酸盐微粒越多,就越容易形成云层,阳光越容易被遮蔽,从而使气候趋冷。可是迄今对冰芯的分析大多是将其由固态转化为液态,这样就无法将硫酸盐和硫酸区别开来。

新研究中,研究人员使用一种直接将冰芯气化的方法,可以直接观测到硫酸盐微粒,并与各历史时期的气候数据进行对比。结果发现,在气温较高的间冰期,冰芯中硫酸盐的含量很少,但是在气温较低冰期,硫酸盐含量较多。这是大气中硫酸盐微粒与气候冷暖变化相关的直接证据。

新华网 [2012-10-18]

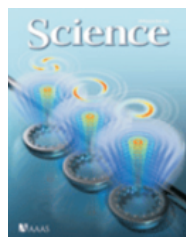
## 发现 2.5 亿年前地球出现致命高温

中国地质大学(武汉)地球科学学院教授**赖旭龙**等发现 2.5 亿年前地球出现致命高温。相关研究成果发表在 10 月 19 日出版的 *Science* 杂志上。

二叠纪末生物大灭绝后的死亡区是一个非常奇怪的世界:赤道低纬度地区异常潮湿但几乎没有生物生长;陆地上没有森林和动物,仅有一些灌木和蕨类;海洋里没有鱼和海洋爬行类动物,只有一些贝壳类生物。

为了探究这一谜题,研究小组的科研人员在位于贵州和广西的南盘江地区先后测制了 16 条地质剖面,采集和处理了 2 吨多岩石样品,获得了 35000 多枚牙形石标本。研究结果显示,当时的海洋表面温度高达 40°C,接近海洋生物死亡及光合作用停止的致命温度值;陆地温度则更高,可能达到 50°C。

《中国科学报》[2012-10-23]



## 揭示炎症性肠病关键分子

英国伦敦国王学院 **Graham M. Lord** 等发现,一种名为 T-bet 的蛋白在维持肠道免疫系统与肠内菌群微妙平衡时起到

重要的作用,实验表明,该蛋白缺失会导致小鼠出现类似人类炎症性肠病的症状。相关研究成果发表在 10 月 11 日出版的 *Immunity* 杂志上。

炎症性肠病是指溃疡性结肠炎和克罗恩病两种消化道疾病,这种疾病在西方国家比较常见。炎症性肠病的病因至今尚不明确,但大多数研究都将目标指向了肠道免疫系统。研究发现,一种名为 T-bet 的蛋白对肠道免疫系统细胞间的相互作用具有很强的影响力,该种蛋白缺失,会导致免疫细胞功能失调,引起炎症,最终导致炎症性肠病的发生。实验证明,一旦将小鼠免疫系统中的 T-bet 蛋白移除,会导致小鼠发生类似人类炎症性肠病的症状出现;而以这些蛋白为治疗靶靶,则可逆转小鼠的炎症性肠病症状。

新研究确认了可导致炎症性肠病的免疫细胞和分子过程,具有十分重要的意义;对于 T-bet 蛋白作用的理解有助于科学家更好地应对该类疾病,为研发治疗新法铺平道路。



《科技日报》[2012-10-30]

(责任编辑 高靖云(实习生),李娜)