



世界科技强国缘何竞相开建硬 X 射线自由电子激光装置——

这台“高速摄像机”能给分子拍电影

■本报首席记者 许琦敏

我国迄今为止投资最大的重大科技基础设施项目——硬 X 射线自由电子激光装置 (XFEL) 最近获批启动。选址上海张江综合性国家科学中心核心区，这个总长 3.1 公里的装置，将建设埋深约 30 米的地下隧道，沿浦东新区罗山路，一直延伸到上海科技大学园区。

早在 2009 年，美国就建成了世界上第一条 XFEL。近年来，日本、瑞士、韩国都在加紧研制这一科研利器。去年 9 月，欧洲 12 国共同投资 12 亿欧元，建在德国汉堡附近的欧洲 XFEL 开始进行首批实验。

硬 X 射线自由电子激光装置所提供的 X 射线，峰值亮度比第三代同步辐射光源可以高出上万倍，能帮助科学家看清原子，乃至电子尺度上的微观世界，可将对微观世界的研究从拍“分子照片”提升到拍“分子电影”的水平，因而成为全世界科学家追逐的热门。英国《自然》杂志将这种装置称为科学家的“高速摄像机”。

比普通 X 光亮上亿倍 具备超快时间分辨率

高速运动的电子在受磁场影响发生偏转时，会沿切线方向释放同步辐射光，这种光比普通 X 光强上亿倍。而 X 射线自由电子激光则比同步辐射光更强，这种光是高能电子在受磁场作用，发生扭摆的时候，在前进方向上放出的激光。

X 射线自由电子激光根据能量和波长的不同，分为软、硬 X 射线两种，后者亮度更高，比同步辐射光还要高出上万倍，其波长可达到几个纳米 (10⁻⁹ 米)。

与同步辐射光相比，X 射线自由电子激光具有更高的亮度、更短的脉冲结构和更好的相干性。同步辐射光所能看到的是分子层面的结构，而硬 X 射线自由电子激光则能看清原子级别的结构。这有什么不同？如果说，同步辐射光可以看清一幅大楼的表面，那么硬 X 射线自由电子激光则可以看清每个窗户里发生的事情。

显然，XFEL 可以帮助科学家看清以前从未看过的微观世界，一些科学猜测也许就此解开谜团。尽管现有的 XFEL 性能还有不少提升空间，但科学家已经利用这种超强光源，得到了一些新发现。例如，中国科学院上海药物研究所徐华强研究员领衔的国际交叉团队经过联合攻关，利用美国斯坦福直线加速器中心 (SLAC) 国家加速器实验室的 XFEL，成功解析了磷酸化视紫红质与阻遏蛋白复合物的晶体结构，攻克了细胞信号传导领域的重大科学难题。随着数据分析方法的提升和改进，他用同一套数据，先后有了两次重大发现，论文均发表在美国《细胞》杂志上。这也从一个侧面说明，XFEL 将为科学发现带来极具价值的研究数据。

近十年来，全球科学家都在追求这种激光，不断提升其性能，希望借此推动人类对自然界的认识更加深入。就在去年 9 月，欧洲 12 国共同投资的 XFEL 在德国汉堡附近开始进行首批实验，其能量高达 17.5GeV (10⁹ 电子伏特)，每秒可发射 2.7 万个脉冲。美国 2009 年建成的 XFEL 能量达到 14.5GeV，现在又开始建设其升级版，虽然能量指标为 4GeV，但其每秒可发射 100 万个脉冲，是目前装置的 1 万倍。我国新启动的 XFEL 能量为 8GeV，可以产生品质非常高的光子，它还将同时具备纳米级的超高空间分辨率，以及飞秒 (10⁻¹⁵ 秒) 级的超快时间分辨率。

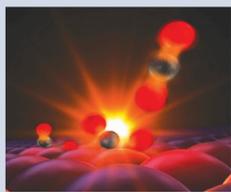
最近，作为《国家重大科技基础设施建设“十三五”规划》优先布局的、我国迄今为止投资最大的重大科技基础设施项目——硬 X 射线自由电子激光装置 (XFEL) 获批启动。这种装置因为能帮助科学家看清原子乃至电子尺度上的微观世界，被英国《自然》杂志称为科学家的“高速摄像机”。

由于原子、电子运动得太快了，人类至今从未看清过它们是怎样运动的。XFEL 可以捕捉微观世界的瞬时图像，并可慢速回放，让科学家弄清其中的奥秘，因而成为各国争相研制的一大科研利器。



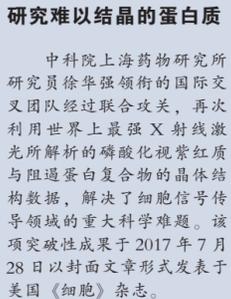
去年 9 月投入使用的欧洲 XFEL 是目前发射速率最快的硬 X 射线自由电子激光器，1 秒能为分子拍 3000 张高质量 X 光片。

硬 X 射线自由电子激光的用途



XFEL 的第一个实验

自由电子激光从揭秘原子开始。该研究成果发表于 2010 年 7 月 1 日英国《自然》杂志。



研究难以结晶的蛋白质

中科院上海药物研究所研究员徐华强领衔的国际交叉团队经过联合攻关，再次利用世界上最强 X 射线激光所解析的磷酸化视紫红质与阻遏蛋白复合物的晶体结构数据，解决了细胞信号传导领域的重大科学难题。该项突破性成果于 2017 年 7 月 28 日以封面文章形式发表于美国《细胞》杂志。

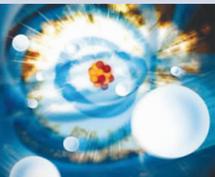
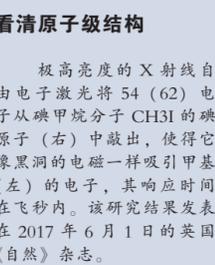
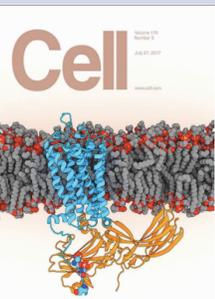


看清原子级结构

极高亮度的 X 射线自由电子激光将 54 (62) 电子从碘甲烷分子 CH₃I 的碘原子 (右) 中敲出，使得它像黑洞的电磁一样吸引甲基 (左) 的电子，其响应时间在飞秒内。该研究成果发表在 2017 年 6 月 1 日的英国《自然》杂志。

揭示化学反应机理

捕获化学键的形成瞬间。该研究成果发表于 2015 年 2 月 12 日美国《科学》杂志。



为科学家拍分子电影 鲜活展现微观世界

利用硬 X 射线自由电子激光，科学家能做什么？在早期的 XFEL 上，科学家每秒可以收集到 100 张左右的 X 射线照片，而在新启用的欧洲 XFEL 实验站，科学家每秒可收集 3000 多张高质量的 X 射线照片。那么，如果脉冲数高达百万的话，将为科学家带来多少微观世界的瞬时图像？

众所周知，每秒 24 帧的画面就可形成视觉上连续不断的动态影像，也就是最基本的电影，当每秒图像超过 1000 帧，就进入了高速摄像机的水准。每秒百万次脉冲，就意味着每秒拍摄下的 X 射线照片可能多达约 10 万张，那真是名副其实的超级高速照相。

一般来说，高速摄像机的图像质量并不会很高，但 XFEL 这台高速摄像机目前的分辨率已达到百纳米级别，未来还将向纳米级别冲刺。

为何科学家需要如此高速高清的摄像机？那是因为原子、电子的运动太快了，人类至今从未看清过它们是怎样运动的，只能看到一团电子云——那是电子快速运动所形成的轨迹迷雾，就好比武侠小说中的落英缤纷、天罗地网或无影神拳。而 XFEL 则有望将这一过程抓拍下来，并让科学家慢速回放，弄清过程中的奥秘，清晰地看到电子、原子结构的动态变化，如电子怎样从一个分子跑到另一个分子，这相当于将微观世界活生生展现在人们面前，而这目前还做不到的。

新发现将可能颠覆以前的很多科学认知，因为我们现在只能看到模模糊糊的影像，只能用平均图像来猜测真实的微观粒子世界。比如超导如何产生，“生命机器”蛋白质分子如何运行，化学反应中化学键如何形成，等等。科学家曾用这种光源将电子从碘甲烷分子 (CH₃I) 中的碘原子几乎全部敲出，使得碘原子像黑洞的电磁一样吸引甲基的电子，其响应时间在飞秒级别。这一研究成果发表在去年 6 月的英国《自然》杂志上。

由于自由电子激光是在电子前进的方向上发出的光，所以它不能像同步辐射光那样，绕着一个大圆环引出一束束光，建成几十个实验线站，而只能让光稍稍偏转，分成有限的几束，接到实验站上 (数量一般不超过十个)。这也让它显得尤为宝贵。

一般 XFEL 包含直线加速器隧道、波荡器隧道、光束线隧道、用户装置等设施。要获得更高能量的电子，就需要更长的电子加速距离，所以装置会越造越长，为了缩短电子加速的距离，基于超导技术的加速器正在成为世界上建造 XFEL 的主流。

上海即将建造的 XFEL，也采用超导加速器，以期在建成后成为世界上最高效和最先进的自由电子激光用户装置之一。

该装置建成后，将为物理学、化学、生命科学、材料科学、能源科学等多学科提供高分辨成像、超快过程探索、先进结构解析等尖端研究手段。张江地区也将成为集聚同步辐射光源、软 X 射线自由电子激光、硬 X 射线自由电子激光和超强超短激光于同一区域的国际光子科学研究高地。



远古盾皮鱼 是人类的祖先吗

中澳科学家通过对一种生活在 4 亿年前叫做“盾皮鱼”的鱼类化石研究发现，这种远古鱼类有着和人类一样的颌骨。中国科学院古脊椎动物与古人类研究所和澳大利亚国立大学的科学家通力合作，用全新的研究方法，在探索从鱼到人的演化问题上取得了重大进展。

他们通过显微 CT、计算机重建和高精度 3D 打印，对一块在澳大利亚首都堪培拉附近发现的盾皮鱼化石，进行了 6 倍大小的还原。“这是我们第一次把 3D 打印技术用到古鱼类研究中。”中科院古脊椎动物与古人类研究所副研究员卢静说，“新的研究把盾皮鱼这种过去一直被认为是一个演化旁支的脊椎动物，拉回到了人类演化的主干中。”

打印一条 3D 的鱼

整个古生物学建立在对化石与现生物细致入微的观察和比较之上，不反复摆弄这些化石和现生物标本，研究根本无从谈起。

走进卢静的办公室，丝毫不感受到古生物学的气息，而完全像一个现代化的设计工作室：计算机屏幕上显示着多彩酷炫的数字建模，柜子和桌子上放着许许多多不同大小的精细模型。

卢静是研究化石鱼类脑颅结构的专家，她所研究的化石标本大都很小，并且非常脆弱。在研究的过程中，即使对这些标本进行了加固，且操作过程极为小心翼翼，但多年使用之后，标本还是会遭受一定的损伤。难上加难的是，很多重要的结构深藏在化石内部，很难观察到。所以，究竟是要保护标本还是深入研究标本，两者一度有所矛盾。

正因如此顾虑，卢静等人最近研究的一件来自澳大利亚的罕见精美鱼类化石，足足尘封了 30 年——这就是发现于澳大利亚早泥盆世的盾皮鱼类巴坎鱼科化石。

此前，一般印象中的鱼化石是像图画一样扁平保存的骨架，但这件鱼化石保存了立体的原貌，各部位之间具有轻微移位。在它的头颅深处，甚至可以看到许多精密的血管和神经通路，以及容纳脑的腔体。所有这些珍贵信息都包含在一个只有乒乓球大小的钙质结构中。学者们一直很想了解这些骨头之间的位置关系和精细的解剖结构，但又难以在不破坏化石的前提下探查。

对古鱼进行虚拟解剖

近年来，在古生物学界兴起的 X 光显微断层扫描和计算机重建技术，为重启对这件精美化石的研究提供了机会。

X 光的波长短，穿透力强，其光束因而能穿透化石，“照亮”其内部结构。更进一步，研究者可以根据扫描所得图像，在计算机中对这些结构的立体形态进行数字建模。

但是，随着研究的深入，学者们不仅想看到一目了然的结构形态，更想知道特定结构之间精确的关联和接触关系。针对这一难点，卢静和澳大利亚国立大学的研究人员首次在这一领域应用了一项时髦的新技术——3D 打印。

其实，古生物学家过去也使用石膏和树脂复制化石模型来辅助研究工作。不过，3D 打印技术的功能要强大多。这次，卢静等人使用了一台最新型号的大型高分辨率 3D 打印机，把计算机中重建的标本内部结构都分解开来，并分别打印成比原化石放大许多倍、但仍十分精细并完全忠实于建模原貌的实体模型。利用这些他们可以随意、反复摆弄的模型，他们就可以像传统解剖学家用刀剪解剖动物一样 (其实，这一技术同样可



3D 打印的澳大利亚早泥盆世盾皮鱼类颌部模型。



研究人员用三维软件对原始盾皮鱼进行虚拟解剖。下图是用三维软件重建的原始盾皮鱼图像。



澳大利亚科学院供图

以并已经应用在对现生生物的形态解剖学研究中)，对化石内部的精细结构进行分割、拼合、比较等研究。如此一来，就完全不会对化石本身造成损伤。

卢静和她的同事们对这条已经死去 4 亿年的鱼头部的细小骨片、上下颌关节、细密的血管和分支神经，进行了准确的复原。

盾皮鱼虽然体形不大，身长约 25 厘米，但却属于比较凶猛的捕食动物，而且与泥盆纪晚期称霸海洋的邓氏鱼也可能有很近的亲缘关系。过去人们曾经以为，这个被称为盾皮鱼的类群都是鱼类早期演化的灭绝旁支，但包括本次研究在内的越来越多的证据显示，盾皮鱼是最原始的有上下颌的鱼类，它们和人类的水生鱼类祖先演化密切相关。

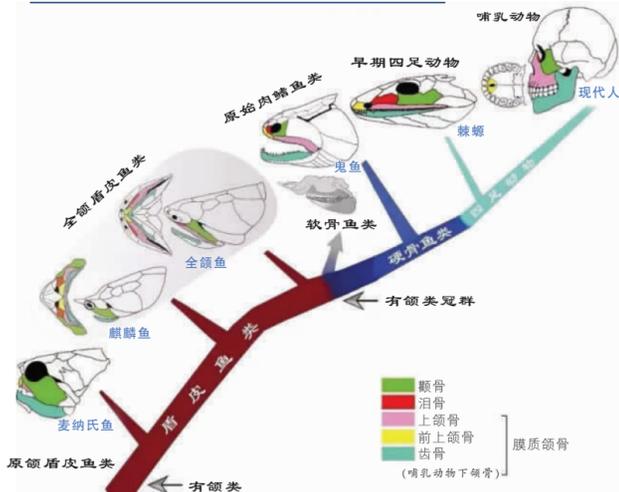
4 亿年前的泥盆纪早期，澳大利亚的地理位置十分靠近中国，两地的鱼类化石也很相似。但澳大利亚发现的盾皮鱼化石，颌的内部结构比在中国发现的盾皮鱼化石保存得更加完好。

科学家推测，人类的鱼类祖先在之前某一时期起源于中国南方大陆沿海，并在之后的几千万年中经过澳大利亚，扩散到世界各地，开启了“鱼类的时代”。其中的一支最终演化成包括人类在内的所有陆地脊椎动物。

应用新技术对中澳两地化石进行全面、仔细的研究和对比，有望找到有关上述理论的更多证据，更清晰地还原人类的鱼类祖先曾经的形态和史诗般的演化历程。

(中国科学院古脊椎动物与古人类研究所供稿)

从鱼到人：脊椎动物膜质颌骨演化进程



澳大利亚弗林德斯大学博士后楚步润 (BrianChoo) 绘