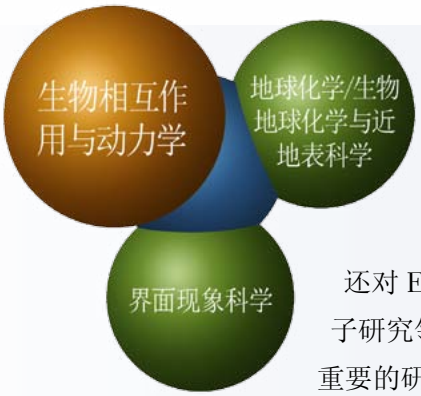
# 生物相互作用与动力学

了解并优化生物系统对其所处环境的反应在解决一些极富挑战性的环境能源问题中发挥着至关重要的作用。例如：充分理解厌氧微生物的新陈代谢为改善污染治理技术、实现绿色可持续管理、以及提供清洁、安全的能源等环保、洁能工作提供必要的科学基础。再如，测量分子尺度的生物化学过程，为计算模型的预测分析提供前提基础。计算模型可以促进我们高效、安全地利用微生物技术来减少生产能源给人类健康和自然环境带来的危害。 同时，计算模型对基础科学研究领域的发展发挥着积极的促进作用。

全基因组测序技术的不断提高与高通量仪器的不断改进极大地促进了传统的生物研究模式向系统生物研究法的转型。生物研究技术的不断提高促使生物学由描述性科学向定量科学的发展，随着收集与高效利用大量生物数据能力的进一步提高，生物学将最终发展为可预测科学。

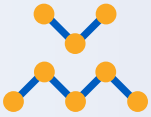
研究细胞基因表达模式的变化对生物特征的影响是系统生物学的基础。然而，细胞的内在结构及其所处的微生物环境的不同，可以导致细胞对生物特征影响存在很大的差异。了解细胞差异的特征和起因是建立模型来预测基因变化对种群变化的影响的基础。同时，建立复杂生物群落模型的另一个决定因素是对不同种类细胞间的相互作用具有充分了解。要建立生态系统模型需要新的技术和方法来确定细胞群的组成并跟踪细胞成分在时间和空间上的变化。




EMSL 的“科研主题”决定着其研究方向和科研设备扩充计划。它也是 EMSL 对用户申请的项目进行筛选，并最终确定入选项目的关键性评定标准之一。同时，“科研主题”还对 EMSL 的科研设备扩充计划起指导性的作用，以期提高环境分子研究领域的科研水平。不同的“科研主题”在各自领域内确定最重要的研究方向，各个主题之间又有相当比重的重叠和交叉。正因如此， EMSL 的一个科研项目所涉及的范围可能会涵盖到 EMSL 的全部三个“科研主题”。

生物的相互作用与动力学研究——对驱动细胞反应的蛋白和分子网络的动态结构以及不同细胞群是如何相互作用以形成具有特殊功能的细胞群落等问题进行定量的、系统的分析。

地球化学、生物地球化学和近地表科学——在分子尺度上研究矿物-水、微生物-矿物、流体-流体界面的反应机制，了解这些机理对污染物运移与转化的影响。

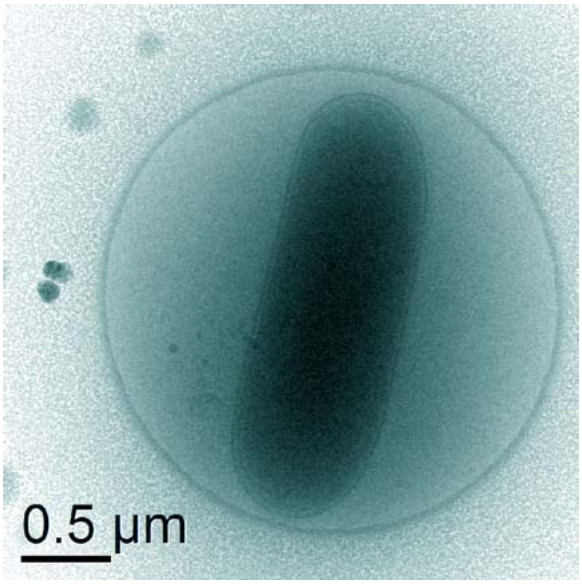


界面现象科学——理解和调控界面上原子、分子水平上的结构及功能的关系，从而实现对界面性能的优化，例如控制催化的活性与选择性。

为促进生物学发展成为更为定量的科学，EMSL 将会对以下科研领域的用户提供重点支持：

- 细胞成分的动态变化以及例如多蛋白复合物等细胞成分的附着与组装
- 蛋白质修饰及其对细胞调控网络的影响
- 决定并控制原核细胞群与真核细胞群内部及群落间相互作用的分子机理
- 研究细胞表型异质性，以及基因和环境在促进细胞表型异质性中所起的作用
- 在细胞尺度与细胞群尺度标定细胞调控网内与网络之间的特性，并把二者联系起来，其中包括控制细胞与其所处环境的相互作用的控制网络.

以上领域的科研工作在充分利用 EMSL 现有的科研设备的同时，有助于促进 EMSL 的科研能力应用到新的技术领域。例如：要对多蛋白复合物的结构、功能和动力学有更充分理解，对多细胞的代谢有更详细的监测记录，就必然需要扩展 EMSL 在高通量质谱和核磁共振方面的科研资源。目前， EMSL 正在扩充新的科研平台以加强在细胞异质性和细胞相互作用等方面的分析能力。这些新技术包括微生物流式细胞计数仪，多峰多谱显微镜，以及表面非线性光谱仪。




低温透射电子显微镜图片：沙雷菌 MR-1.

## 生物相互作用与动力学

学科带头人：Scott Baker
Scott.Baker@pnl.gov | 509-372-4759

## 关于 EMSL

EMSL 隶属于美国西北太平洋国家实验室，它是一所由美国能源部建立的国家级科研资源共享中心。EMSL 拥有丰富的集实验与计算为一体的科研资源，能够为环境分子科学领域的科技创新提供配套支持。

EMSL 不但强调不同学科之间的相互协作，而且非常重视实验与计算能力的优化整合，从而为用户提供了一个稳定而高效的科研环境。通过引进世界上最优秀的科学家和最先进的科研设备， EMSL 已成功地帮助数以千计的科研人员通过跨学科的合作实现了能源与环境科学领域上的一些重大突破。欲了解更多有关 EMSL 的科学成就、 EMSL 为用户提供的设备和技术支持等信息，请登陆 EMSL 的网页 www.emsl.pnl.gov.

## EMSL 用户申请指南

EMSL 欢迎科研人员向 EMSL 提出用户申请。 EMSL 的用户申请由业内知名专家进行评审。入选用户不但可以使用其世界一流的科研设备，而且有机会与世界知名专家合作。用户申请人可登陆 EMSL 网页 (www.emsl.pnl.gov) 点击 User Access 窗口，并完成其所列的五个步骤来提交申请。 EMSL 会在每年春季公布其一年一度的“用户申请项目建议书征集”的有关细则， EMSL 鼓励现有用户和希望成为 EMSL 用户的科研人员在截止日期前提出申请。此外，不在征集书指定范围内的有新意的申请可以在任何时候提交而不受限制。

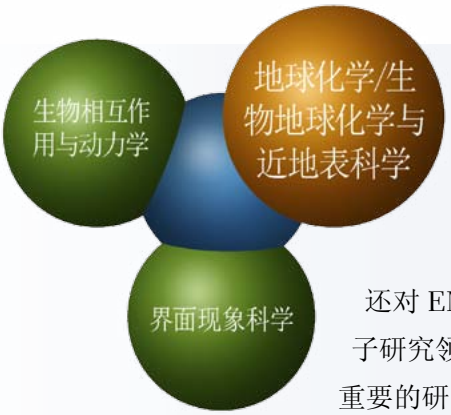
EMSL 鼓励申请人在其用户申请项目建议书中强调联合使用 EMSL 的计算与实验设备。大多数的入选项目用户可以免费使用 EMSL 的设备来进行“开放式的科研活动”。开方式的科研活动是指在科学界公开发表并共享其科研成果的科研活动。

EMSL

# 地球化学/生物地球化学与近地表科学

在自然环境中，分子尺度上的反应过程，诸如水相复合、在不同矿物相上的吸附、以及微生物还原具有氧化还原活性的金属等，通常控制着污染物的迁移和转化。这些过程发生在物理与化学特性极其不均一的次地表环境中。了解矿物-水界面与微生物-矿物界面的结构、化学特征及其纳米尺度的几何特征对于从机理上理解近地表反应活性和污染物运移是十分重要的。因此，在过去的十几年中对界面地球化学与生物地球化学反应进行分子尺度上的研究一直非常活跃。通过在分子尺度上的理解来推测这些现象对污染物运移和转变的影响是这一科研主题的主要目标。

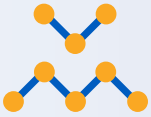
这一科研主题旨在解决一些美国目前所面临的最富挑战性问题，例如：环境污染物治理的安全和成本效益、能源有害副产品的安全处理、核废料、温室气体等问题。这些问题的解决方案对于发展新型能源技术和实现可持续的自然环境都极其重要。




EMSL 的“科研主题”决定着其研究方向和科研设备扩充计划。它也是 EMSL 对用户申请的项目进行筛选，并最终确定入选项目的关键性评定标准之一。同时，“科研主题”还对 EMSL 的科研设备扩充计划起指导性的作用，以期提高环境分子研究领域的科研水平。不同的“科研主题”在各自领域内确定最重要的研究方向，各个主题之间又有相当比重的重叠和交叉。正因如此， EMSL 的一个科研项目所涉及的范围可能会涵盖到 EMSL 的全部三个“科研主题”。

生物的相互作用与动力学研究--对驱动细胞反应的蛋白和分子网络的动态结构以及不同细胞群是如何相互作用以形成具有特殊功能的细胞群落等问题进行定量的、系统的分析。

地球化学、生物地球化学和近地表科学--在分子尺度上研究矿物-水、微生物-矿物、流体-流体界面的反应机制，了解这些机理对污染物运移与转化的影响。



界面现象科学--理解和调控界面上原子、分子水平上的结构及功能的关系，从而实现对界面性能的优化，例如控制催化的活性与选择性。

这一“科研主题”决定了 EMSL 的科研资源将主要用于如下几个重要课题：

» 将反应输运过程的研究提高到分子尺度：这个领域主攻分子到微米尺度上的反应过程，其中主要包括微观上的对流和扩散对矿物溶解率的影响，细胞生长与生物膜的形成，以及颗粒物的聚合与输运。

» 明确地球化学与微生物群落结构及活性的关系：了解微生物群落结构在时间和空间上的变化情况，以及这些变化受地球化学条件的变化、微生物与地球物质以及包括放射性核素等污染物之间的相互作用等因素的影响程度。

» 有机污染物与天然有机物的生物地学变化：这一领域主要研究自然环境中难降解有机体的输运与转化。其中，既包括研究人造的有机化合物如何释放到地下环境，如温室气体的地下封存，也包括对天然的、难降解有机物的输运和转化的研究。

» 纳米传感器在表征实时变化中的应用：这一课题主要研究通过发展纳米探针技术来确定在地球化学或微生物相关的微环境中的化学条件， 以及运用纳米探针技术探测田间尺度中的化学条件。

» 复杂界面的化学与生物反应：这一课题主要研究如何通过研究微生物与矿物质界面的反应来实现污染物在微生物与矿物界面的固着，研究天然的地球化学环境中的反应速度，以及界面金属与配位体交互作用的动力学机理。此课题的重点在于把目前的预测能力从基于平衡理论的推测转向基于对分子机理了解上的反应速率的计算。

EMSL 对于生物地球化学及近地表科学的研究已经卓有成就，并将在仪器设备和科研技能上继续加大投入，用以研究近地表材料里包括放射性核素在内的污染物的化学成分。这一研究能够增进人们对于界面的动态过程以及该过程如何影响反应活性的理解，同时也能够推进科研工作者将分子尺度的地球化学及生物地球化学知识运用到田间尺度的输运过程当中。

## 地球化学/生物地球化学与近地表科学

学科带头人：Nancy Hess
Nancy.Hess@pnl.gov | 509-371-6385

## 关于 EMSL

EMSL 隶属于美国西北太平洋国家实验室，它是一所由美国能源部建立的国家级科研资源共享中心。EMSL 拥有丰富的集实验与计算为一体的科研资源，能够为环境分子科学领域的科技创新提供配套支持。

EMSL 不但强调不同学科之间的相互协作，而且非常重视实验与计算能力的优化整合，从而为用户提供了一个稳定而高效的科研环境。通过引进世界上最优秀的科学家和最先进的科研设备， EMSL 已成功地帮助数以千计的科研人员通过跨学科的合作实现了能源与环境科学领域上的一些重大突破。欲了解更多有关 EMSL 的科学成就、 EMSL 为用户提供的设备和技术支持等信息，请登陆 EMSL 的网页 www.emsl.pnl.gov.

## EMSL 用户申请指南

EMSL 欢迎科研人员向 EMSL 提出用户申请。 EMSL 的用户申请由业内知名专家进行评审。入选用户不但可以使用其世界一流的科研设备，而且有机会与世界知名专家合作。用户申请人可登陆 EMSL 网页 (www.emsl.pnl.gov) 点击 User Access 窗口，并完成其所列的五个步骤来提交申请。 EMSL 会在每年春季公布其一年一度的“用户申请项目建议书征集”的有关细则， EMSL 鼓励现有用户和希望成为 EMSL 用户的科研人员在截止日期前提出申请。此外，不在征集书指定范围内的有新意的申请可以在任何时候提交而不受限制。

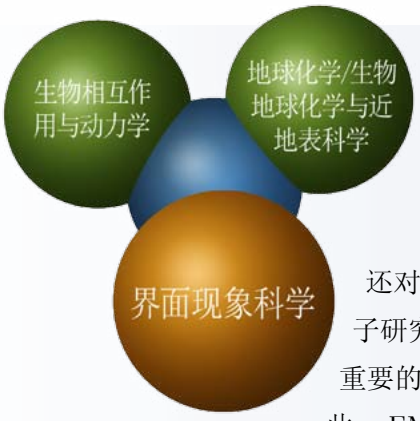
EMSL 鼓励申请人在其用户申请项目建议书中强调联合使用 EMSL 的计算与实验设备。大多数的入选项目用户可以免费使用 EMSL 的设备来进行“开放式的科研活动”。开方式的科研活动是指在科学界公开发表并共享其科研成果的科研活动。

# 界面现象科学

对天然材料及合成材料界面的物理和化学特征的基础研究，是环境和能源领域科研活动的重要组成部分，对于理解和控制全球变暖和开发新技术十分重要。界面研究的重要性也在能源部的有关地球科学、固态发光、太阳能以及先进核能系统等各种科学研讨会上被一再强调。

实验室制备的具有特定性能的表面和界面样品是重要的模型系统。这些模型不但在研究大气和地球次表面天然的多相材料的反应过程中发挥着重要作用，而且对研发能应用于能源生产、催化等新型材料至关重要。

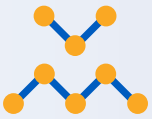
诸如气溶胶、光化学、污染物迁移等科研领域所涉及的多相材料在自然环境中的相互作用极其复杂，因此对其全面了解具有极大的挑战性。而界面模型系统为深入研究多相材料某一特定方面提供了条件，界面模型系统的这一功能使科研人员对多相材料之间的相互作用的深入了解变为现实。同样，通过优化材料系统的界面，可以使其具备特定的实用功能。这些具备优化界面的材料系统在研发保障能源安全、促进环境保护所需技术中发挥着至关重要的作用。研究复杂界面不但需要先进的技术来检测自然界中存在的复杂材料和矿物，而且需要更多地了解和研究为实现特定功能而人工合成的复杂材料。与此相关的科研问题对于生物和地球科学等领域的研究有很大交叉并互为补充。




EMSL 的“科研主题”决定着其研究方向和科研设备扩充计划。它也是 EMSL 对用户申请的项目进行筛选，并最终确定入选项目的关键性评定标准之一。同时，“科研主题”还对 EMSL 的科研设备扩充计划起指导性的作用，以期提高环境分子研究领域的科研水平。不同的“科研主题”在各自领域内确定最重要的研究方向，各个主题之间又有相当比重的重叠和交叉。正因如此， EMSL 的一个科研项目所涉及的范围可能会涵盖到 EMSL 的全部三个“科研主题”。

生物的相互作用与动力学研究——对驱动细胞反应的蛋白和分子网络的动态结构以及不同细胞群是如何相互作用以形成具有特殊功能的细胞群落等问题进行定量的、系统的分析。

地球化学、生物地球化学和近地表科学——在分子尺度上研究矿物-水、微生物-矿物、流体-流体界面的反应机制，了解这些机理对污染物运移与转化的影响。



界面现象科学——理解和调控界面上原子、分子水平上的结构及功能的关系，从而实现对界面性能的优化，例如控制催化的活性与选择性。

发展界面科学的两个主要挑战包括： (1) 建立并验证具有预测功能的界面模型，用以研究在能源与环境领域内具有应用前景的界面反应过程；(2) 将结构-功能间相互关系的研究拓展到更复杂的多元界面系统中。界面科学研究主题将以解决该两大挑战为重点，促进对环境和能源有深刻影响的特定领域的发展。例如：

- 多相态、多成分系统的成核与生长机理研究，例如：气溶胶、 合成材料、 碳捕集与封存和地球化学过程等；
- 相分离与相变，例如：溶解、析出、潮解、风化 、成冰等；
- 界面上的电荷与物质输运过程。这些过程对于理解化学变化、能源生成与存储等极为关键，因此与催化、光催化、光伏、固态照明、环境气溶胶、燃料电池及蓄电池等研究领域密切相关；
- 与产能、储能、传感、催化、固态照明及生物相容性等有关的材料和界面的理性合成。

加深对界面上分子结构、动态过程及输运特征的理解，将会促进以下科研领域的发展：

- 具有高选择性的新一代催化剂
- 固体氧化物燃料电池及储能
- 薄膜太阳能电池
- 固态发光
- 氢能生产与储存技术
- 气溶胶化学对气候变化和大气污染影响的模型
- 预测并减缓污染物对地下水的污染
- 碳封存
- 化学传感器和放射性物质检测器
- 新一代核反应堆材料
- 用于医疗设备和药物释放的生物材料

EMSL 先进的科研资源和科研专长使得用户可以设计和表征不同的具有特殊的原子、电子、离子输运或界面特性的材料系统。 EMSL 尤其在氧化物材料和矿物质表面研究方面具有突出优势。

## 界面现象科学

学科带头人： DON BAER

Donald.Baer@pnl.gov | 509-371-6245

## 关于 EMSL

EMSL 隶属于美国西北太平洋国家实验室，它是一所由美国能源部建立的国家级科研资源共享中心。EMSL 拥有丰富的集实验与计算为一体的科研资源，能够为环境分子科学领域的科技创新提供配套支持。

EMSL 不但强调不同学科之间的相互协作，而且非常重视实验与计算能力的优化整合，从而为用户提供了一个稳定而高效的科研环境。通过引进世界上最优秀的科学家和最先进的科研设备， EMSL 已成功地帮助数以千计的科研人员通过跨学科的合作实现了能源与环境科学领域上的一些重大突破。欲了解更多有关 EMSL 的科学成就、 EMSL 为用户提供的设备和技术支持等信息，请登陆 EMSL 的网页 www.emsl.pnl.gov.

## EMSL 用户申请指南

EMSL 欢迎科研人员向 EMSL 提出用户申请。 EMSL 的用户申请由业内知名专家进行评审。入选用户不但可以使用其世界一流的科研设备，而且有机会与世界知名专家合作。用户申请人可登陆 EMSL 网页 (www.emsl.pnl.gov) 点击 User Access 窗口，并完成其所列的五个步骤来提交申请。 EMSL 会在每年春季公布其一年一度的“用户申请项目建议书征集”的有关细则， EMSL 鼓励现有用户和希望成为 EMSL 用户的科研人员在截止日期前提出申请。此外，不在征集书指定范围内的有新意的申请可以在任何时候提交而不受限制。

EMSL 鼓励申请人在其用户申请项目建议书中强调联合使用 EMSL 的计算与实验设备。大多数的入选项目用户可以免费使用 EMSL 的设备来进行“开放式的科研活动”。开方式的科研活动是指在科学界公开发表并共享其科研成果的科研活动。