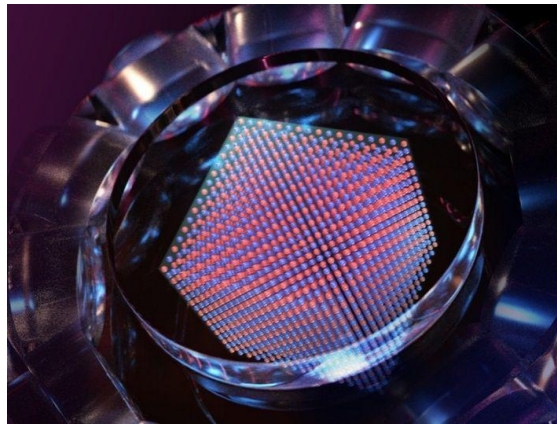




中国“天元”量子模拟器率先取得量子计算 第二阶段重大进展



图注：“天元”量子模拟器示意

中国科大潘建伟、陈宇翱、姚星灿、邓友金等人成功构建了求解费米子哈伯德模型的超冷原子量子模拟器“天元”，以超越经典计算机的模拟能力首次验证了该体系中的反铁磁相变，朝向获得费米子哈伯德模型的低温相图、理解量子磁性在高温超导机理中的作用迈出了重要的第一步。相关研究成果发表于《自然》。

由于其科学价值和潜在的巨大经济效益，以高温超导为代表的强关联量子材料将极大地推动未来科技的发展。然而，这些新型量子材料背后的物理机制尚不明确，难以实现有效可控的规模化制备和应用。费米子哈伯德模型是晶格中电子运动规律的最简化模型，被认为是可能描述高温超导材料的代表性模型之一，但其研究一直面临着巨大挑战：一方面，该模型在二维和三维下没有严格解析解；另一方面，计算复杂度非常高，即使是超级计算机也无法进行有效的数值模拟。

研究团队在前期实现盒型光势阱中的均匀费米超流的基础上[*Science* 375, 528 (2022); *Nature* 626, 288 (2024)], 进一步降低了盒型光势阱的强度噪声，并结合机器学习优化技术实现了最低温度的均匀费米简并气体制备，满足了实现反铁磁相变所需要的低温。研究团队进一步创造性地将盒型光势阱和平顶光晶格技术相结合，实现了空间均匀的费米子哈伯德体系的绝热制备。该体系包含大约80万个格点，比目前主流实验的几十个格点规模提高了约4个数量级，且体系具有一致的哈密顿量参数，温度显著低于奈尔温度。在此基础上，研究团队通过精确调控相互作用强度、温度和掺杂浓度，直接观察到了反铁磁相变的确凿证据——自旋结构因子在相变点附近呈现幂律的临界发散现象，从而首次验证了费米子哈伯德模型包括掺杂条件下的反铁磁相变。

该工作推进了对费米子哈伯德模型的理解，为进一步求解该模型、获取其低温相图奠定了基础，也首次展现了量子模拟在解决经典计算机无法胜任的重要科学问题上的巨大优势。《自然》杂志审稿人对该工作给予了高度评价，称该工作“有望成为现代科技的里程碑和重大突破(...which could become a notable milestone for modern science and technology and a major breakthrough)”；“标志着该领域向前迈出了重要的一步(...marks an important step forward for the field)”；“是实验的杰作，是期待已久的成就(...is an experimental tour de force. This is a long-awaited achievement)”。



研究进展

中国科大成功开发低成本硫化物 固态电解质

近日，中国科大马骋教授开发了一种新型硫化物固态电解质。这种固态电解质在展示硫化物固态电解质固有优势的同时，实现了其它硫化物固态电解质所无法达到的极其低廉、适合商业化的成本。该成果以“A Cost-Effective Sulfide Solid Electrolyte $\text{Li}_7\text{P}_3\text{S}_{7.5}\text{O}_{3.5}$ with Low Density and Excellent Anode Compatibility”为题发表于《Angewandte Chemie International Edition》。

硫化物固态电解质成本居高不下的根源，在于它们的合成需要使用大量昂贵的硫化锂（不低于650美元每公斤）。在多年的探索中，研究者曾尝试了各种降低硫化锂成本的方法，但发现实现这一目标极为困难。而在此次研究中，马骋教授采取了完全不同的策略：他不再致力于降低硫化锂的成本，而是开发了一种不以硫化锂作为原料的硫化物固态电解质——氧硫化磷锂。这种固态电解质可以水合氢氧化锂和硫化磷作为原材料合成。由于这两种物质均成本低廉，氧硫化磷锂的原材料成本仅14.42美元每公斤，不到其它硫化物固态电解质的8%，也远低于50美元每公斤这一商业化的要求，具有很强的成本竞争力。

同时，氧硫化磷锂也很好的继承了使硫化物固态电解质区别于氧化物、卤化物固态电解质的独特优势：它同时具备极低的密度和良好的负极相容性。氧硫化磷锂的密度仅1.7克每立方厘米，和其它硫化物固态电解质相近，并且低于卤化物（约2.5克每立方厘米）和氧化物固态电解质（大都高于5克每立方厘米）。与此同时，氧硫化磷锂和锂金属、硅这两种高能量密度负极都展示了良好的相容性；它和锂金属组成的对称电池能实现4200小时以上的室温稳定循环，而它和硅负极、高镍三元正极组成的全固态软包电池，在60摄氏度下循环200次后，仍具有89.29%的容量保持率。

审稿人认为氧硫化磷锂固态电解质“同时具备低密度、良好的负极相容性、以及强劲的成本竞争力”，由氧硫化磷锂组成的全固态电池具有“出色的循环性能”，它的发现对全固态电池的实际应用具有重要的推动作用。

中国科大在快充型锂离子电池 研究中取得新进展

近日，中国科大季恒星教授、武晓君教授团队联合加州理工洛杉矶分校段镡锋教授团队，在快充型锂离子电池领域取得突破性进展。研究人员成功突破传统意义上固/液、固/气等两相界面上的电催化模型，实现了一种全新的“固相电催化”，并成功将该策略应用于纯固相反应的负极材料中，从而实现了锂离子电池在达到 302Whkg^{-1} 高能量密度的同时实现9min充电至80%。相关成果以“Solid-State Electrocatalysis in Heteroatom-Doped Alloy Anode Enables Ultrafast Charge Lithium-Ion Batteries”为题发表于《J. Am. Chem. Soc.》。

以合金化反应来存储锂离子的负极材料（如硅、磷等），相对于传统的石墨负极具有明显更高的比容量($>2000\text{mAhg}^{-1}$)。然而这类负极材料存储锂离子过程中迟缓的锂化反应动力学是限制该材料体系快充性能的主要因素。电化学研究中常选用电催化的策略来提高反应动力学，然而合金化反应电极材料的锂化反应过程中，反应物和生成物是完全的固相接触，反应物和生成物之间不存在常规电催化所需要的两相界面。因此催化合金化反应负极材料和锂离子的反应动力学目前仍然是研究空白。

针对以上问题，季恒星教授联合武晓君和段镡锋教授团队提出异质原子掺杂催化和进化类负极材料的转化反应速率。结合理论计算和原位X射线吸收谱测试，可以得到以下物理图像：少量的杂原子掺杂（1~5%原子比）能够为合金型负极材料合金化反应提供高反应活性的位点，促进固有化学键的断裂，使得负极材料在掺杂位点负极持续断键分裂成更多更小的结构单元，为进一步的反应提高更多的反应位点，从而降低反应阻抗，提高反应动力学。将合成的硫掺杂磷负极(S/bP)和商用的钴酸锂(LCO)正极配对组装的软包电池，成功实现了 302Whkg^{-1} 的能量密度，9min充电至80%的容量，并且该快充性能能够稳定循环超过300圈。



研究进展

中国科大钙钛矿光伏研究成果创造新世界纪录

7月3日，国际权威的太阳能电池世界纪录榜《Solar cell efficiency tables》(Version 64)发布中国科学技术大学徐集贤教授团队钙钛矿电池性能世界纪录，认证稳态效率性能达26.7%。

这是该团队继2022年(Version 60)、2023年(Version 63)之后代表中国科大持续第三次更新该世界纪录榜。2023年该团队创造的反式器件认证效率26.1%实现了钙钛矿电池效率超越26%、打破传统正式器件垄断世界纪录的双重突破。本次成果是在此基础上持续艰苦攻关的又一引领性突破，对于构建叠层电池具有积极推动作用。

《Solar cell efficiency tables》效率表由澳大利亚先进光伏中心联合美、日、意、澳等多国科学家统一审核和发布，具有近30年历史，其客观性和荣誉为国际光伏学术界和工业领域所公认，代表了光伏各细分领域的最前沿技术动态，具有重要指导意义。本次收录代表着中科大在光伏前沿研发的突破和引领能力。

此次研究是徐集贤教授团队在新型钙钛矿单结、下一代晶硅-钙钛矿叠层电池方面的最新成果，对产业化具有推动作用。

Received: 14 May 2024 | Accepted: 3 June 2024
DOI: 10.1002/pip.3831

SHORT COMMUNICATION

PHOTOVOLTAICS WILEY

Solar cell efficiency tables (Version 64)

Martin A. Green¹ | Ewan D. Dunlop² | Masahiro Yoshita³ | Nikos Kopidakis⁴ | Karsten Bothe⁵ | Gerald Siefer⁶ | David Hinken⁵ | Michael Rauer⁶ | Jochen Hohl-Ebinger⁶ | Xiaojing Hao¹

¹Australian Centre for Advanced Photovoltaics, School of Photovoltaic and Renewable Energy Engineering, University of New South Wales, Sydney, 2052, Australia

TABLE 2 'Notable Exceptions' for single-junction cells and submodules: 'Top dozen' confirmed results, not class records, measured under the global AM1.5 spectrum (1000 Wm⁻²) at 25 °C (IEC 60904-3: 2008 or ASTM G-173-03 global).

Classification	Efficiency (%)	Area (cm ²)	V _{oc} (V)	J _{sc} (mA/cm ²)	Fill factor (%)	Test centre (date)	Description
Perovskite (thin-film)	26.7 ± 0.6 ¹⁰	0.0519 (da)	1.193	26.49 ¹⁰	84.5	NPVM (5/24)	USTC ¹¹ 中国科大徐集贤团队
Organic (thin-film)	19.2 ± 0.3 ⁹	0.0326 (da)	0.9135	26.61 ¹⁰	79.0	NREL (3/23)	SJTU ¹²
Dye sensitised	13.0 ± 0.4 ⁸	0.1155 (da)	1.0396	15.55 ¹⁰	80.4	FHG-ISE (10/20)	EPFL ¹³



国家研究中心简讯

◆国家重大科研仪器研制项目“太赫兹近场高通量材料物性测试系统”结题验收会召开

7月27日，中国科学技术大学承担的国家重大仪器设备研制专项（部门推荐）“太赫兹近场高通量材料物性测试系统”结题验收会在合肥召开。国家自然科学基金委员会窦贤康主任及相关部门负责人、中国科学院科技基础能力局相关负责人、项目验收专家组（含仪器测试验收专家组、财务验收专家组、技术档案验收专家组）、项目监理组、中国科学技术大学包信和校长及相关部门负责人、项目负责人陆亚林及项目组成员等80余人参加了验收会。验收会由国家自然科学基金委工程与材料科学部常务副主任王岐东主持。

项目通过研发可调谐预聚束太赫兹激光光源和宽谱脉冲光源、探针和样品双扫描、大口径矢量磁体等核心技术，研制了一套太赫兹近场高通量材料物性测试系统。该系统由复合光源、传输光路、多物理场、近场探测、中央控制及通用系统等构成，主体设备和相关部件已全部就位，系统运行状态良好。达到了计划书的全部技术指标，其中部分指标优于计划书指标。

