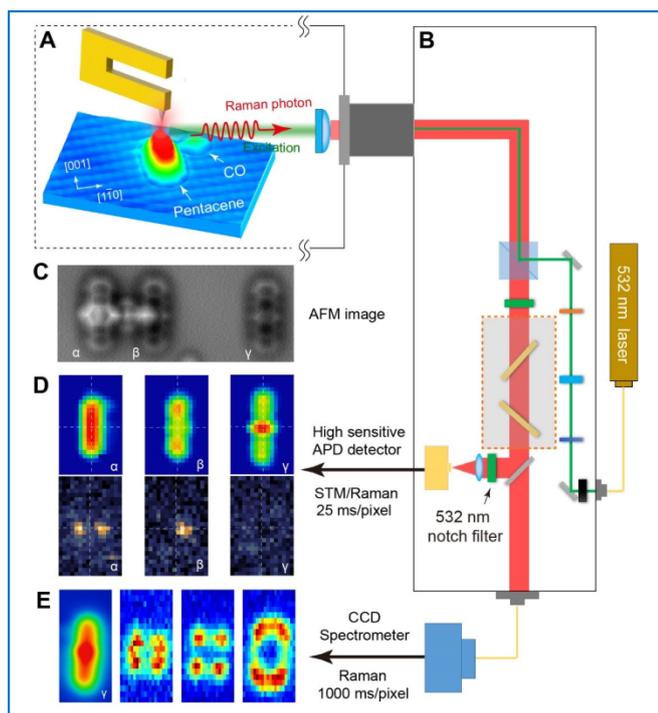




中国科大在单分子精密测量中取得重要进展



图注：基于扫描探针的单分子多参量测量示意图：
(A) 探针，(B) 拉曼光谱光路，(C) AFM像，(D) STM像和利用高灵敏单光子计数器同步采集的C-H振动拉曼光谱像，(E) 分子骨架结构的拉曼光谱像。

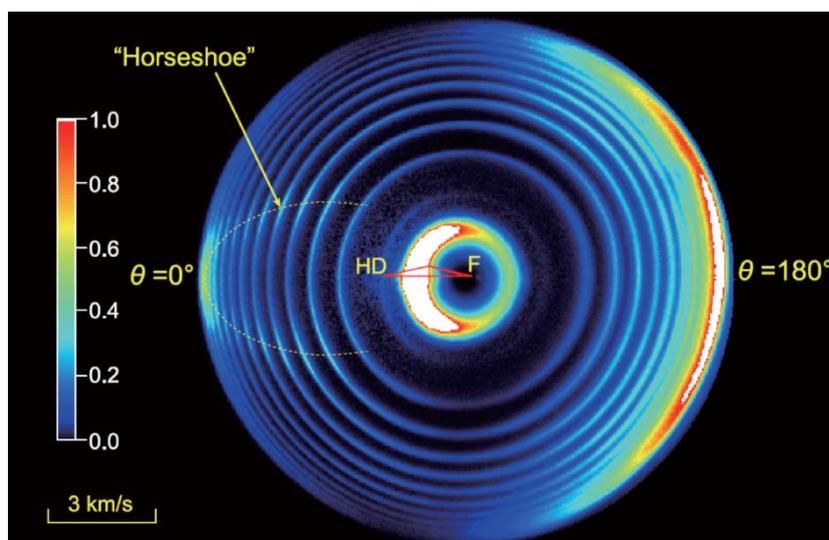
中国科学技术大学单分子科学团队侯建国院士、王兵教授、谭世惊教授等发展了多种扫描探针显微成像联用技术，实现了对单分子在电、力、光等外场作用下不同内禀参量响应的精密测量，在单化学键精度上实现了单分子多重特异性的综合表征，这一研究成果于近期发表在《科学》杂志上（*Science* 2021, 371, 818–822）。

精确测定分子的化学结构、识别其化学物种一直是表面科学的核心问题。即使在单个分子层次上，分子结构、电子态及其激发态、化学键振动、反应动力学行为等多维度的内禀属性均表现出显著的特异性。针对分子多维度内禀参量的精密测量是全局性和综合性理解分子特异性的基础，但始终是一个极具挑战性的前沿问题。在过去的40多年里，扫描隧道显微术（STM）及其衍生出的多种高分辨的显微成像技术，如q-Plus原子力显微术（AFM），已经获得1埃量级的空间分辨能力。但是，这些显微技术缺乏化学识别能力。直到2013年，中国科大单分子科学团队利用针尖增强拉曼成像技术（TERS），首次实现了亚纳米级的化学识别（*Nature* 2013, 498, 82），并于2019年将该技术的空间分辨推进至1.5埃（*Nat. Sci. Rev.* 2019, 6, 1169），为进一步拓展针对分子特异性的全局表征研究打下了基础。

该团队在前期工作基础上，采用融合STM, AFM, TERS等扫描探针技术的策略，发展了STM-AFM-TERS联用技术，突破了单一显微成像技术的探测局限。利用这一高分辨的综合表征技术，以并五苯分子及其衍生物作为模型体系，结合电、力、光等不同相互作用实现了对电子态、化学键结构和振动态、化学反应等多维度内禀参量的精密测量。实验结果揭示了Ag(110)表面吸附的并五苯分子转化为不同衍生物的机理，其中纳腔等离激元激发是导致特定吸附构型下C—H键选择性断裂的原因。在技术上，通过集成高灵敏度的单光子计数器，把拉曼光谱的实空间成像速度提高了2个数量级，成功地实现了并五苯分子化学反应前后的动态跟踪与测量。结合理论计算，揭示了分子化学反应过程的机理，验证了实验观测结果。这一融合多维度表征技术策略将为表面催化、表面合成和二维材料中的化学结构与物种识别，以及构效关系的构建提供可行的解决方案，在表面化学、多相催化等研究领域具有重要的科学价值。《科学》杂志审稿人评价该技术将具有跨领域的影响力“becoming highly influential across the fields”。


 研究进展

中国科学家发现化学反应中自旋轨道分波的量子干涉现象



图注：D原子产物离子速度影像，图左侧显示为前向散射方向的“马蹄铁”形结构。

中国科学技术大学王兴安教授课题组与中国科学院大连化学物理研究所孙志刚研究员和杨学明院士课题组合作，发现了基元化学反应中自旋轨道分波的量子干涉现象，揭示了电子自旋-轨道相互作用对化学反应动力学过程的影响。这一研究成果于2021年2月26日发表在《科学》杂志上。

自1925年乌伦贝克和古德施密特发现电子自旋现象起，人们在原子和分子等体系中发现电子自旋与轨道角动量的耦合会导致许多有趣现象的发生，比如：原子能级的分裂，磁晶各向异性和半导体中的量子霍尔效应等。电子自旋和轨道角动量的耦合会对原子和分子的碰撞过程产生影响。在化学反应中，电子自旋轨道耦合会导致反应散射分波的分裂，进而使得分波可能存在一些精细结构。但是长期以来，电子自旋轨道耦合是否能够以及如何影响化学反应的动力学过程仍然是一个未知并极具挑战的问题。

为了解决这一问题，研究人员以实验和理论相结合对电子自旋和轨道角动量在氟原子与氢分子的反应 $F+HD \rightarrow HF+D$ 中的影响进行了研究。实验方面，通过将交叉分子束方法、时间切片离子速度成像技术与近阈值电离技术相结合，应用高分辨的实验测量获得了产物转动量子态分辨的微分散射截面，并在微分散射截面前向散射方向观测到了一个独特的马蹄铁形结构。理论方面，发展了考虑电子角动量效应的量子动力学理论模拟方法，对这个独特的马蹄铁形动力学结构进行了解释。理论表明这个动力学结构是由具有正负宇称的自旋轨道分裂的共振分波的量子干涉导致的。这一研究结果表明自旋-轨道相互作用能够有效地影响化学反应动力学过程。



研究进展

中国科大提出高效低毒抗菌纳米酶的构建策略

纳米酶是一类具有酶一样高效催化性能的无机纳米颗粒。其中，可以模拟氧化酶、过氧化酶等原位催化生成活性氧物种的纳米酶，被认为是一类具有广阔应用前景的新型抗菌剂。由于活性氧物种能通过氧化作用同时破坏多种对细菌细胞正常生理活动至关重要的生命物质（如核酸，蛋白，脂质），纳米酶被认为能高效清除抗药性细菌，并能延缓细菌抗药性的出现。然而，“成也萧何，败也萧何”。由于活性氧物种无法区分细菌和哺乳动物细胞，纳米酶失去了理想抗菌剂所必需的选择性。

针对这一挑战，中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家研究中心、化学与材料科学学院的阳丽华课题组与熊宇杰团队合作，提出了构建高效低毒抗菌纳米酶的新策略。2013年至2015年间，熊宇杰团队发现在钯基金属纳米结构表面可以形成具有类单线态氧的吸附态活性氧物种。阳丽华课题组利用哺乳动物细胞能通过内吞摄取纳米颗粒而细菌却不能的特点，与熊宇杰团队合作提出将此类可以原位催化生成表面吸附态活性氧物种（而非游离态活性氧物种）的纳米颗粒用于构建高效低毒抗菌纳米酶的策略，相关研究成果以“Surface-bound reactive oxygen species generating nanozymes for selective antibacterial action”为题于2021年2月发表在国际学术期刊《Nature Communications》上。

为了检验这一策略是否成立，阳丽华课题组与熊宇杰团队首先设计了一系列银钯合金（AgPd）纳米笼，并从中筛选出了能高效地原位催化生成表面吸附态活性氧物种的AgPd_{0.38}纳米笼作为模型纳米酶。体外抗菌实验结果显示AgPd_{0.38}纳米笼能借助于其表面原位生成的活性氧物种，实现对细菌包括抗药性细菌的高效清除（在4-16ug/mL即可实现99.9%的细菌杀灭效率），且经多次反复使用也未见导致细菌抗药性出现。与此同时，体外细胞毒性实验结果显示AgPd_{0.38}纳米笼对多种哺乳动物细胞均无毒性。

这项工作首次提出了一种高效低毒抗菌纳米酶的构建策略，有望促进生物相容性纳米酶的应用研究并有助于应对细菌抗药性危机。

中国科大在超导自旋输运研究方面取得重要进展

近日，中国科大合肥微尺度物质科学国家研究中心国际功能材料量子设计中心与中科院强耦合量子材料物理重点实验室曾长淦教授研究组与西湖大学李华教授研究组实验与理论合作，在超导自旋输运研究方面取得重要进展，发现栅压控制的Rashba自旋轨道耦合可以有效调控零偏压电导峰所表征的相位相干多重Andreev反射。这一研究成果发表在《Phys. Rev. Lett.》上[Phys. Rev. Lett. 126, 057701 (2021)]。

零偏压电导峰是一系列隧穿效应的关键信号，包括Majorana束缚态、Andreev束缚态以及无反射隧穿效应等。尽管这些效应的内容有所不同，但它们所表现出来的零偏压电导峰却具有相同的微观物理起源，即在零能处发生了相位相干的Andreev反射。另一方面，自旋轨道耦合已经成为凝聚态物理领域近期许多重大发现（从新奇的自旋电子学器件到各种拓扑量子物相）的基石。那么在零偏压电导峰表征的相位相干Andreev过程中，自旋轨道耦合是否也会产生重要的影响呢？这是超导自旋输运研究的一个重要科学问题。

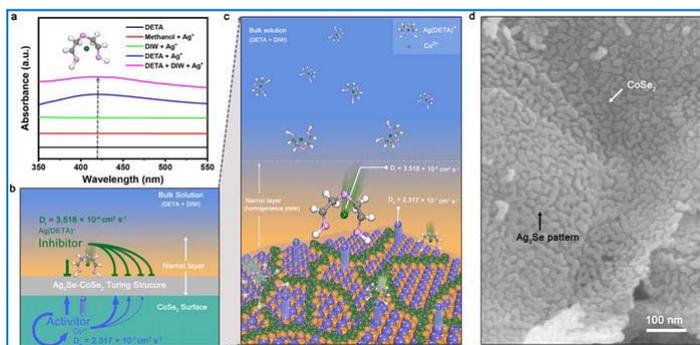
曾长淦教授团队与李华教授团队合作，构建了由超导体铌（Nb）和钙钛矿氧化物异质结铝酸镧/钛酸锶（LaAlO₃/SrTiO₃）组成的超导复合结构。其中LaAlO₃/SrTiO₃界面存在二维电子系统，且界面的Rashba自旋轨道耦合随栅压呈非单调变化。结合隧穿实验和理论计算，该团队发现根据超导体和二维电子系统之间耦合强度的不同，自旋轨道耦合可以有效地调控量子相位相干或者Andreev反射几率，进而调节隧穿谱中的零偏压电导峰强度。

该研究不仅发现了非平庸的超导自旋输运现象，也为在栅压控制的超导复合结构中实现拓扑超导提供了新思路。



研究进展

中国科大成功构筑无机“图灵结构”催化界面



“反应-扩散”过程驱动复杂无机“图灵”结构形成。

1952年，计算机科学与人工智能之父图灵提出：某些重复的自然图案可能是由两种特定物质（分子、细胞等）通过“反应-扩散”的过程相互作用产生。在该系统中，一种物质促进反应的发生（激活剂），另一种物质抑制反应的进行（抑制剂），两者相遇后反应扩散。在均相体系中一般不会产生图案，但当两者的扩散系数差异达到一定程度时，激活剂和抑制剂这两种物质之间的高扩散比会导致系统失稳，诱导周期性复杂图案的形成。

近日，中国科学技术大学高敏锐教授研究组利用“反应-扩散”的机制，首次实现了在无机过渡金属硫族化合物上图灵结构的构筑。在二乙烯三胺(DETA)与水的二元溶液中， Ag^+ 会和DETA发生络合反应形成 $\text{Ag}(\text{DETA})^+$ ，其扩散系数为 $3.518 \times 10^{-6} \text{cm}^2 \text{s}^{-1}$ 。同时， Co^{2+} 从二硒化钴(CoSe_2)纳米带表面溢出，其扩散系数为 $2.317 \times 10^{-7} \text{cm}^2 \text{s}^{-1}$ 。因此，在该系统中， $\text{Ag}(\text{DETA})^+$ 是抑制剂而 Co^{2+} 是激活剂。快速扩散的 $\text{Ag}(\text{DETA})^+$ 到达 CoSe_2 表面的能斯特层(Nernst layer)时，与扩散到 CoSe_2 表面的激活剂 Co^{2+} 发生作用，最终在 CoSe_2 表面形成复杂美丽的 Ag_2Se 图灵图案。相关研究成果以“An Efficient Turing-Type $\text{Ag}_2\text{Se-CoSe}_2$ Multi-Interfacial Oxygen-Evolving Electrocatalyst”为题发表在《德国应用化学》杂志上(*Angew. Chem. Int. Ed.* 2021, 60, doi.org/10.1002/anie.202017016)，并被选为**Hot Paper**和**Back Cover**。

中国科大实现新型微波激射器

中国科学技术大学中国科学院微观磁共振重点实验室在量子精密测量领域取得重要进展，该实验室彭新华教授研究组及其合作者首次在弗罗凯量子体系上实现微波激射器，为超高精度超低频磁场测量以及暗物质搜寻等研究提供了全新的途径。这项研究成果以“Floquet maser”为题，于2021年2月18日在线发表在国际学术期刊《Science Advances》[*Science Advances* 7, eabe0719 (2021)]。同期《Science》“展望”栏目和国际知名学术网站Phys.org分别以“A masing ladder”和“Extending maser techniques to Floquet systems”为题专文报道了该工作。

本工作首次从理论上提出这种新型微波激射器的可行性，并成功在核自旋体系上实验实现。为实现这一目标需要克服诸多挑战：（1）通常情况下，原子核自旋的布居度只有百万分之一，远达不到微波激射器的阈值条件。为此，研究人员采用同位素惰性气体氙气(^{129}Xe)作为微波激射器介质，利用自旋交换碰撞方法，成功将 ^{129}Xe 核自旋的布居度提高5个数量级。（2）以往微波激射器需要实现布居度的反转，已致许多体系无法用于建造微波激射器。研究人员设计了一套精巧的外腔反馈控制系统，消除了传统微波激射器对反转布居度的苛刻要求，扩大了微波激射器的适用范围。在解决以上两个挑战的基础上，进一步利用射频磁场周期调制氙自旋体系的能级分裂，从而形成弗罗凯量子态(Floquet state)。经过两年多的努力，研究团队首次观测到了弗罗凯量子态之间的受激辐射，标志着在周期变化的量子体系上实现了微波激射器。这种新型微波激射器完全不同于以往，它呈现多个相位锁定的多频振荡，它们的频率值等于弗罗凯能级间距，该现象类似于“频率梳”结构。在本工作中，研究人员还利用该微波激射器攻克了低频磁场噪声难题，实现了迄今为止超低频段(1-100 mHz)最高的磁场测量灵敏度。

本文作者将这种全新的量子器件命名为弗罗凯微波激射器(Floquet maser)。该研究工作建立起一座连接弗罗凯物理(Floquet physics)和微波激射器的桥梁，有望在广泛的量子体系上实现微波激射器，为精密测量研究提供全新的技术手段。

《Science》杂志以专文报道该工作，盛赞其“展示了全新的微波激射器”，“能够有效克服以往精密测量的低频噪声难题”，“为实现伽马激光提供了新可能性”，“该工作有望应用于高精度时钟以及探测超轻暗物质”。