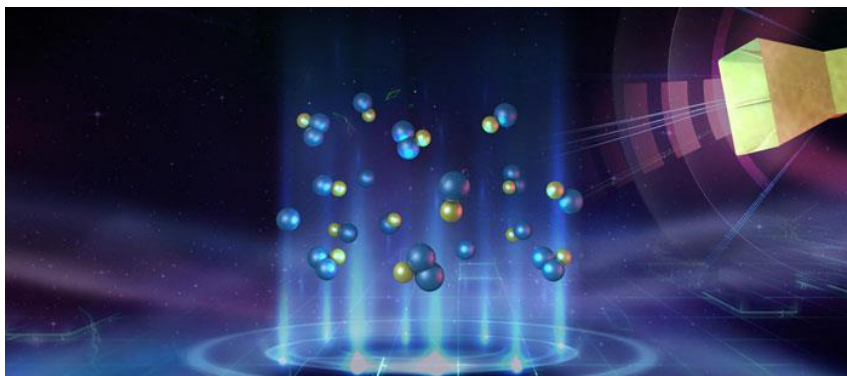




我国科学家首次在超冷原子分子混合气中 实现三原子分子的量子相干合成

中国科学技术大学潘建伟、赵博等与中国科学院化学所白春礼小组合作，在超冷原子双原子分子混合气中首次实现三原子分子的相干合成。在该研究中，他们在钾原子和钠钾基态分子的Feshbach共振附近利用射频场将原子和双原子分子相干地合成了超冷三原子分子，向基于超冷原子分子的量子模拟和超冷量子化学的研究迈出了重要一步。这一重要研究成果发表在国际权威学术期刊《自然》杂志上。



图：从超冷原子和双原子分子混合气中利用射频场合成三原子分子的示意图

量子计算和量子模拟具有强大的并行计算和模拟能力，不仅能够解决经典计算机无法处理的计算难题，还能有效揭示复杂物理系统的规律，从而为新能源开发、新材料设计等提供指导。量子计算研究的终极目标是构建通用型量子计算机，但实现这一目标需要制备大规模的量子纠缠并进行容错计算，仍然需要长期不懈的努力。

超冷分子将为实现量子计算打开新的思路，并为量子模拟提供理想平台。但由于分子内部的振动转动能级非常复杂，通过直接冷却的方法来制备超冷分子非常困难。超冷原子技术的发展为制备超冷分子提供了一条新的途径。人们可以绕开直接冷却分子的困难，从超冷原子气中利用激光、电磁场等来合成分子。

超冷基态分子的成功制备重新唤起了人们对合成三原子分子的研究兴趣。中国科学技术大学的研究小组在2019年首次观测到超低温下原子和双原子分子的Feshbach共振，相关成果发表于《科学》杂志 [Science 363, 261 (2019)]。在Feshbach共振附近，三原子分子束缚态的能量和散射态的能量趋于一致，同时散射态和束缚态之间的耦合被大幅度地共振增强。

在该项研究中，中国科学技术大学的研究小组和中科院化学所的研究小组合作，首次成功实现了利用射频场相干合成三原子分子。在实验中，他们从接近绝对零度的超冷原子混合气出发，制备了处于单一超精细态的钠钾基态分子。在钾原子和钠钾分子的Feshbach共振附近，通过射频场将原子分子的散射态和三原子分子的束缚态耦合在一起。他们成功地在钠钾分子的射频损失谱上观测到了射频合成三原子分子的信号，并测量了Feshbach共振附近三原子分子的束缚能。这一工作为量子模拟和超冷化学的研究开辟了一条新的道路。超冷三原子分子是模拟量子力学下三体问题的理想研究平台。三体问题极其复杂，即使经典的三体问题由于存在混沌效应也无法精确求解。在量子力学的约束下，三体问题变得更加难以捉摸。如何理解和描述量子力学下的三体问题一直都是少体物理中的一个重要难题。此外，超冷三原子分子可以用来实现超高精度的光谱测量，这为刻画复杂的三体相互作用势能面提供了重要的基准。由于计算势能面需要高精度地求解多电子薛定谔方程，超冷三原子分子的势能面也为量子化学中的电子结构问题提供了重要的信息。



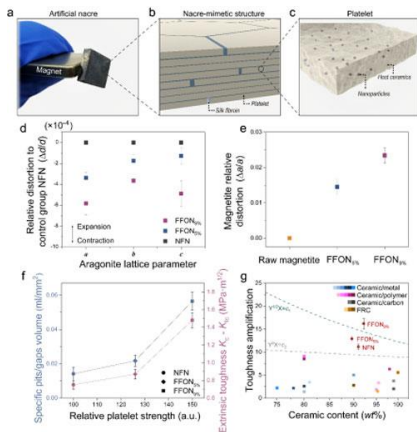
研究进展

中国科大在探究限域效应促进CO₂电还原制多碳产物取得重要进展

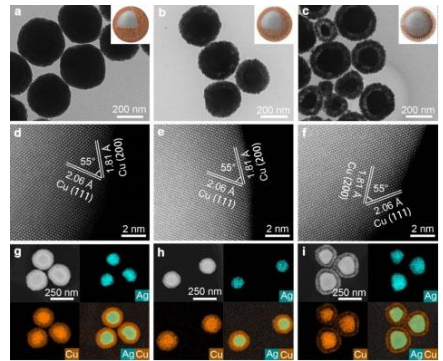
中国科大提出仿生结构陶瓷增韧的新策略

近期，中国科大俞书宏院士课题组茅璨波副研究员等从生物矿物的残余应力增强机制中获得启发，提出了一种新的仿生增韧路径，并运用于人工珍珠母的矿化生长，显著提升了仿珍珠母陶瓷块材的韧性放大效率（ 16.1 ± 1.1 ）。相关研究成果发表在《Advanced Materials》上。

研究人员利用他们以往发展的框架诱导矿化生长的方法（Science 2016, 354, 107），首次实现了将纳米四氧化三铁颗粒与碳酸氢钙前驱体溶液在几丁质模板上共矿化，使纳米颗粒原位生长入文石基元片中。利用同步辐射衍射技术，分析了文石片层中残余应力的类型及其作用机制。结果表明四纳米颗粒承担拉应力，由于其尺寸小（纳米级）对缺陷不敏感，因此拉应力对其强度削弱影响不大；文石颗粒承担压应力，使得文石片发生破坏时需要额外的外部拉力来平衡压应力，因此基元片的总拉伸强度得以提升。结合实验与有限元分析，证实了基元片强度的提升有利于基元片滑移与裂纹偏转，有效的提高了外部增韧机制的耗能作用。此外，由于纳米颗粒诱发的残余应力对裂纹有闭合作用，材料的本体韧性也得到了提升。因此，结合珍珠母层状结构的优点，通过纳米尺度残余应力的设计，显著的提升了仿珍珠母结构陶瓷的韧性放大因子。同时，材料的动态力学性能也有相应提升。



图注：仿珍珠母结构陶瓷实物图和结构示意图以及残余应力与韧性分析。



图注：三种Ag@Cu核壳催化剂结构表征

近日，中国科学技术大学耿志刚副教授等在CO₂电还原制多碳（C₂₊）产物领域取得重要进展。研究人员通过制备一类具有不同孔径的Cu多孔外壳Ag内核的Ag@Cu核壳催化剂，深入研究了Cu外壳不同孔径的限域效应与CO₂电还原制C₂₊产物选择性的作用机制。相关成果发表于《纳米快报》上（Nano Letters. 2022, 22(6), 2554–2560）。该文入选杂志当期封面。

利用清洁能源将CO₂还原转化为C₂₊产物，不仅为实现碳中和提供一种有效途径，更对能源和环境的发展具有重要意义。在CO₂电还原过程中，C-C偶联是形成C₂₊产物的关键步骤，而增加局部*CO中间体浓度可有效促进C-C偶联。因此，通过调控Cu基催化剂的多孔微观结构，利用孔隙结构的限域效应去增强局部*CO中间体浓度可有效提高生成C₂₊产物能力。但当前催化剂的孔径与限域效应强度关系尚不明确。鉴于此，设计孔径可调的多孔Cu基催化剂以深入研究孔径与限域效应强度关系对优化C₂₊产物选择性具有重要意义。

研究人员利用Ostwald熟化和原位电化学还原反应过程制备了一类多孔Cu外壳Ag内核的Ag@Cu核壳催化剂。通过控制不同的Ostwald熟化反应时间，分别制备了Cu外壳的平均孔径分别为2.8nm，4.9nm和11.2nm的三种Ag@Cu核壳催化剂。

CO₂电还原测试结果表明，相比于Cu外壳平均孔径为2.8nm和11.2nm的Ag@Cu催化剂，Cu外壳平均孔径为4.9nm的Ag@Cu核壳催化剂在所有的恒电流测试条件下都表现出最优的催化活性和C₂₊产物选择性。其中C₂₊产物法拉第效率最高可达73.7%，C₂₊/C₁产物的选择性比值达5.1倍。基于有限元理论模拟分析表明，相比于孔径为2.8 nm和11.2nm的Cu壳层，孔径为4.9 nm的Cu壳层对*CO中间表现出最强的限域效应。这种限域效应可有效提高局部*CO中间体浓度，促进C-C偶联生成C₂₊产物。



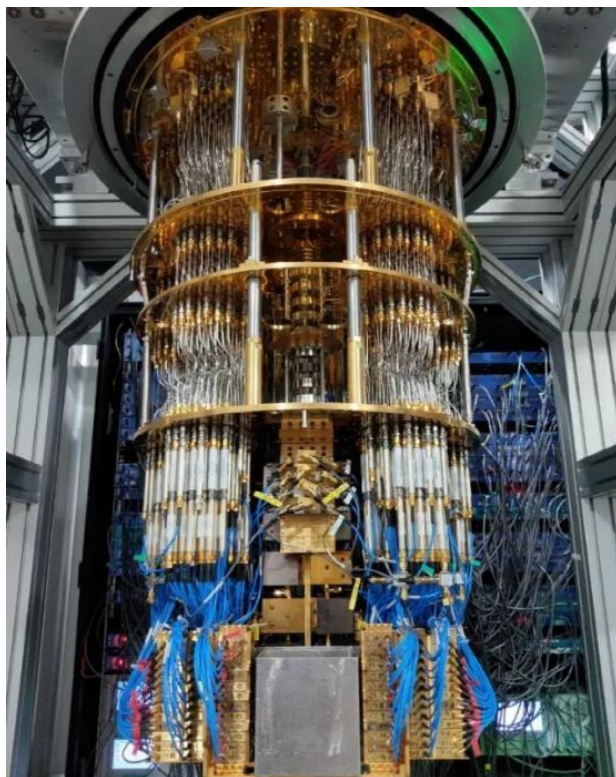
中心成果入选2021年度中国科学十大进展

2022年2月28日，科技部高技术研究发展中心（基础研究管理中心）发布2021年度中国科学十大进展。我中心牵头的“可编程二维 62 比特超导处理器‘祖冲之号’的量子行走”入选。

可编程二维 62 比特超导处理器“祖冲之号”的量子行走

量子行走是经典随机行走的量子力学模拟，是实现量子模拟、量子搜索算法乃至通用量子计算的工具。中国科大潘建伟院士团队通过研发兼容平面工艺的三维引线技术，实现了量子比特结构从一维向二维的拓展，设计并制作了一个由 62 个比特组成的 8×8 的二维结构超导量子比特阵列，构建了“祖冲之号”量子计算原型机，并通过该装置演示高保真的单粒子和双粒子连续时间量子行走。利用量子处理器的高可编程性，实现了量子比特激发粒子行走路径的精确调控，在固态量子芯片实现了马赫-曾德尔干涉仪。该工作是世界范围内公开发表的首个比特数超过60的超导量子计算领域的成果，验证了对含噪声中等规模量子比特系统的高精度量子调控能力，为研制“祖冲之二号”、实现“量子计算优越性”奠定了基础。

“中国科学十大进展”由科学技术部高技术研究发展中心（基础研究管理中心）牵头举办，旨在宣传我国重大基础研究科学进展，激励广大科技工作者的科学热情和奉献精神，开展基础研究科学普及，促进公众理解、关心和支持基础研究，在全社会营造良好的科学氛围。



图注：祖冲之号