

动而不聚原子级分散催化剂突破活性和稳定性矛盾

本报讯 10月26日,中国科大曾杰课题组与合作者在《自然》杂志发表文章。该工作报道了一种“纳米岛”限域的原子级分散催化剂,突破了传统催化剂活性和稳定性的矛盾。

在多相催化中,原子级分散的金属催化剂因具有独特的几何和电子特性、最高的原子利用效率和均匀的活性位点,而备受关注。然而,如何获取“动而不聚”的金属活性位点,从而打破催化剂活性和稳定性的对立矛盾,一直是催化领域悬而未解的难题之一。

鉴于此,研究人员设计出一

种“纳米岛”型催化剂,即活性金属原子被隔离在“岛”上,可在各自的“岛”内移动但跨“岛”迁移受阻,进而实现原子的动态限域稳定。

为实现这一目标,首先需要选取恰当的材料分别用作“纳米岛”和载体。研究人员在设计的模型催化剂中选取和金属作用强的氧化物作为“岛”(例如氧化铈),作用弱的氧化物作为支撑“岛”的载体(例如氧化硅)。

其次,为高效地分隔金属原子,“岛”需要有足够高的密度和足够小的尺寸。研究人员开发出一种液相静电吸附的合成方法,

首先将高密度的铈原子附着在氧化硅表面,随后使其自下而上受控团聚为仅2纳米的孤立“岛”。

最后,研究人员再次借助液相静电吸附法,并巧妙利用零电点原理,使氧化铈岛和氧化硅载体表面分别带上相反电荷。由于异性电荷相互吸引的作用,负电性的铂前驱体只会被选择性地吸附在带正电的氧化铈“纳米岛”上,而不会在带负电的氧化硅载体上,从而实现了铂原子的择位生长。由于小尺寸“纳米岛”的吸附面积有限,通过控制铂前驱体浓度,实现平均每个“岛”上不超过一个铂原子的目标。

稳定性研究表明,氧化铈“纳米岛”上的铂原子可以抵抗高达600摄氏度的空气煅烧。特别地,铂原子在高温下的氢气氛围中只会限定在“岛”内移动,不会跨“岛”团聚,实现了活性位点的“动而不聚”。经此活化后的催化剂,在催化一氧化碳氧化反应的活性提升两个数量级并兼具高稳定性。

未来,通过选择特定材料的载体、“纳米岛”和活性金属原子,有望将该“纳米岛”类型催化剂应用于不同的催化反应。

(合肥微尺度物质科学国家研究中心 化学与材料科学学院)

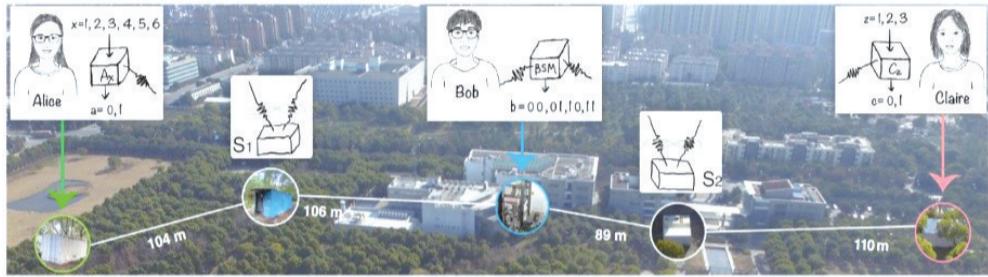
本报讯 中国科大徐集贤教授团队与王晓君教授团队、中科院苏州纳米所陈琪研究员、蔺洪振研究员团队合作,通过实验测试和理论计算的相互印证,揭示钙钛矿/高分子界面多种模式的相互作用,以及这些作用与深能级缺陷钝化的对应关系,为大幅提高器件效率以及进一步开发广谱类钝化策略提供重要参考。相关成果11月4日发表于《焦耳》。

研究团队以聚乙二烯亚胺(PEI)聚合物及其衍生物作为模型研究对象,发现了高密度胺基集团与钙钛矿表面的多模式作用机制,发现和确认了钙钛矿/PEI界面的原位质子化反应。进一步,团队发现原位质子化模式能够有效钝化钙钛矿少数载流子深能级缺陷,而离位质子化没有这种效应。同时,传统物理吸附模式/金属螯合模式的这种缺陷钝化效应较弱或者更倾向钝化多子缺陷。另外,研究团队进一步指明了官能团与构型的协同效应。以上结果说明为提高钝化适用性,除了增加官能团种类的常规思路外,单官能团的多模式钝化效应也值得探索。

博士生朱正洁、毛凯天以及微尺度物质科学国家研究中心博士后张凯为论文共同第一作者。徐集贤为通讯作者。(化学与材料科学学院 微尺度物质科学国家研究中心 碳中和研究院)

中国科大取得新进展 在钙钛矿光伏深能级缺陷研究中

中国科大首次在严格定域条件下排除实数形式的标准量子力学



本报讯 近日,中国科大潘建伟、陆朝阳、张强等与济南量子技术研究院等单位的科研人员合作,在国际上首次关闭定域性、测量独立性以及纠缠源独立性等漏洞,利用类空间隔的纠缠交换孔

量子网络对实数形式的量子力学进行了检验,以超过5.3个标准差的实验精度验证了实数无法完整地描述标准量子力学,严格确认了量子力学中复数的必要性。相关成果发表于《物理评论快报》。

本报讯 我校郭光灿院士团队的史保森、丁冬生课题组利用磁场操控技术结合钟态制备的方法实现了基于冷原子系综的光子高维轨道角动量的长时间存储,相关成果10月31日题发表于《物理评论快报》。

长距离量子通信的实现离不开量子中继,其中量子存储器是构建量子中继的核心。由于冷原子系综具有集体增强效应以及光谱一致性,可以有效地存储光子的量子态,因此作为极具潜力的量子存储器介质而备受青睐。学术界的众多工作表明,将多模存储器布局到量子网络中,能大幅度提高信道容量,因此多模量子存储器的实现对于构建高容量量子网络具有重要价值。尽管多模

量子物理是否确实需要复数的参与,一直是一个长期的基础性问题。2022年初,潘建伟团队利用可验证的、类似贝尔不等式的定量判据,率先完成了排除了实数形式描述标准量子力学

的第一个实验检验。该工作利用的是同一个超导量子芯片上的四个量子比特,距离上无法满足类空间隔的要求,因而存在定域、测量独立性、纠缠源独立性等问题。

为了更严格地检验复数的客观存在性,潘建伟团队在类空间隔纠缠交换光量子网络(如图)的基础上,利用网络中的两个独立源各自独立产生纠缠光子对,分别给远处的三个参与者进行高速随机的光子测量操作。实验过程中,参与者不受其他参与者的测量选择和结果影响,各自独立地进行本地的随机操作。

实验结果以5.3个标准差超过了实数形式的量子力学预测结果,严格验证了量子力学中复数的不可或缺。该论文的第一作者为吴典、江扬帆和顾雪梅。

(合肥微尺度物质科学国家研究中心 中科院量子信息与量子科技创新研究院)

中国科大实现多模量子态的长时间存储

量子存储领域已取得重要进展,但基于冷原子系综的长时间空间多模存储还存在许多科学问题亟待解决,其中之一是难以保证所存多模量子态在长时间存储之后仍具有较高的保真度:这是由于复杂的空间模式更容易受到周围环境干扰造成。

史保森、丁冬生领导的科研团队利用铷冷原子体系,基于光子轨道角动量自由度,开展了高维多模光子态的长时间存储研究,取得重要进展。

在本工作中,团队通过操控极化磁场压制空间模式的横向消

相干、并通过制备磁不敏感态进一步延长存储时间。团队将带有时序控制的反向泵浦光的热原子池作为窄带滤波器,实现了对单光子级信号光的滤波和探测。

该工作以两个三维轨道角动量叠加态为例开展长时间存储研究,实验发现经过400微秒的存储时间后绝对保真度远高于通过脉冲平均光子数和存储效率计算出的量子-经典界限,表明该存储器仍可以工作在量子领域。

同时,当存储时间从10微秒延长到400微秒时,存储器的读出效率由10.7%衰减到

4.7%,降低了不到60%。研究成果对高容量量子网络的构建具有重要参考意义。该成果得到了审稿人的充分肯定:“毫无疑问,此工作包含了有价值的结果,将对量子存储器的设计和实现产生深远的影响。”

中科院量子信息重点实验室的博士后叶英豪、博士生曾雷为本文的共同第一作者;丁冬生教授、史保森教授为本文的共同通讯作者。

(中科院量子信息重点实验室 中科院量子信息和量子科技创新研究院 物理学院)

冷冻电镜原位成像技术算法取得重要突破

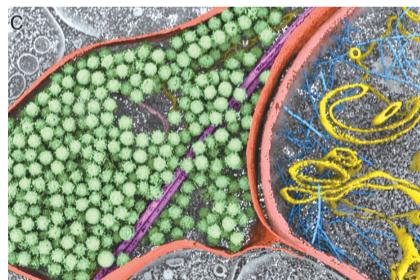
本报讯 中国科大、中国科学院深圳先进技术研究院双聘教授毕国强团队与美国加州大学洛杉矶分校周正洪教授合作,开发了一套基于深度学习的cryoET数据处理算法和软件IsoNet,有效解决了cryoET成像中的缺失锥效应和低信噪比问题,研究成果10月29日发表于《自然·通讯》。

研究人员搭建了一套迭代优化的自监督深度学习人工网络算法,并以旋转处理后的cryoET断层三维重构数据自身为训练集,实现了对cryoET断层三维重构数据的缺失锥矫正。同时,在IsoNet算法的流程中,加入降噪过程,使得同一个人工神经网络可以同时对断层三维重构数据进行缺失信息补全和降噪处理。

利用IsoNet算法对模拟缺失锥的铁蛋白与核糖体的三维结构分别进行处理,处理后的结果能够与低分辨的原子模型相媲美。同

时对真实的HIV病毒粒子、副鞭毛杆以及培养神经细胞中突触的断层三维重构数据进行处理,均得到了非常好的效果。

尤其值得关注的是,在利用IsoNet算法对神经突触这种典型包含大量蛋白、膜性细胞器与细胞骨架等复杂结构的细胞水平厚样品的断层三维重构图像进行处理后,突触中囊泡、线粒体、微管、微丝、细胞膜以及蛋白复合物的三维结构信息均得到了很好的恢复。IsoNet算法在预印本bioRxiv公布后,引起了领域内的广泛关注与深入讨论,其中一个重要点是IsoNet算法是如何实现缺失锥矫正的?一种主要推测是,人工神经网络在训练过程中,能够学习到蛋白质等生物结构在三维空间中不同角度的结构特征,并将这些信息补充到缺失锥方向,类似于单颗粒冷冻电镜三维平均。因此通过不断优化人工神经网络架构、扩大训练样本集等手段,IsoNet算



IsoNet算法处理后神经突触中超微结构
基于真实电子密度三维可视化渲染

法将能够实现对细胞中每个蛋白分子的高分辨率三维结构信息进行恢复,从而为真正实现可视化细胞原位每个蛋白分子的高分辨率三维结构与组织分布奠定了基础。正如领域内专家Dimitry Tegunov等人在推特上评价认为,IsoNet算法的思路将是cryoET技术的未来发展方向。

本论文的第一作者为我校博士生刘云涛和2018级本科生张恒,通讯作者为毕国强教授和周正洪教授。(合肥微尺度物质科学国家研究中心 生医部)

我校在流体界面上不稳定性的调控方面取得新进展

本报讯 中国科大罗喜胜教授课题组近期研究发现激波诱导的气层失稳呈现了与经典 Richtmyer-Meshkov(RM) 不稳定性不同的,揭示了构成气层的多道界面之间的耦合以及气层内的反射波系对不稳定性的影响,首次提出通过调控界面耦合强度和气层内的波系来实现对流体界面不稳定性的有效控制。相关进展已在《流体力学》杂志上发表4篇系列论文。

研究人员采用雕刻技术来约束肥皂膜产生了初始形状可控的气体界面,在激波管中实验研究了激波诱导双气层、单气层和单界面演化特征,基于稳定性分析量化了界面耦合效应,根据气体动力学量化了气层内反射波诱导的额外的流体力学不稳定性。国际学者评价“该工作的实验观影图片和示意图很好地传达了波动力学的复杂性。实验结果得到了复杂数学模型的支持和验证”。

进一步地,研究人员形成了初始扰动和厚度可控的任意气体组合的气层,开展了一系列的激波驱动多种气体组合的气层实验研究。结果表明,通过主动设计气层厚度和选择气层内外气体的种类,可以有效调控界面不稳定性,从而为ICF靶丸设计提出了有益建议,如由于稀疏波的促进失稳作用,重气层不适合靶丸设计;而由于界面耦合的抑制失稳作用,轻/中/重气层更适合靶丸设计。

国际学者评价“该工作提出的重/轻双气层有可能减弱流体力学不稳定性对ICF的影响的结论很有意义,将激发进一步对这个题目的研究和讨论”。(工程科学学院)