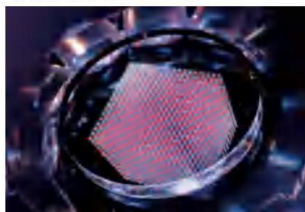


中国“天元”量子模拟器率先取得量子计算第二阶段重大进展

本报讯 近日，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。相关研究成果于7月10日在线发表在国际学术期刊《自然》杂志上。



“天元”量子模拟器示意图。红色和蓝色的小球分别代表自旋相反的原子，它们在三维空间交错排列，形成了反铁磁晶体。原子被光晶格囚禁在玻璃真空腔中。制图：陈磊

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。

量子计算为求解若干经典计算机难以胜任的计算难题提供了全新的方案。国际学术界为量子计算的发展设定了三个阶段：一是对特定问题的计算能力超越经典超级计算机，实现“量子计算优越性”。随着美国谷歌公司“悬铃木”以及中国科大“九章”系列、“祖冲之号”系列量子计算原型机的实现，这一阶段的目标已达到；二是实现专用量子模拟器以解决诸如费米子哈伯德模型这一类重要科学问题，这是当前的主要研究目标；三是在量子纠错的辅助下实现通用容错量子计算机。值得指出的是，理论研究表明，即使采用通用量子计算机也难以准确求解费米子哈伯德模型。因此，构建可以求解该模型的量子模拟器，不仅是理解高温超导机理的有效途径，也是量子计算研究的重大突破。

对于整个设想中的费米子哈伯德模型低温相图，理论上仅能够明确无掺杂（即每个格点填充一个电子，又称半满）条件下系统的低温状态是反铁磁态。然而由于系统的复杂性，不仅反铁磁态从未得以实验验证，而且掺杂条件下的系统状态已经无法通过经典超级计算机进行准确数值模拟。因此，构建量子模拟器验证包括掺杂条件下的反铁磁相变，是实现能够求解费米子哈伯德模型的专用量子模拟器的第一步，也是获得该模型低温相图的重要基础。

光晶格中的超冷原子具有系统纯净，原子间相互作用强度、隧穿速率和掺杂浓度可精确调控等诸多优势，是最有希望构建量子模拟器以求解费米子哈伯德模型的体系之一。为了验证反铁磁相变，超冷原子量子模拟器必须满足两个关键条件：首先，需要建立空间强度分布均匀的光晶格系统，确保费米子哈伯德模型的参数在大尺度上保持一致；其次，系统



潘建伟（中）与陈宇翱（左）、姚星灿（右）在实验室讨论问题。

温度必须显著低于奈尔温度（即反铁磁相变温度），这样反铁磁相才可能出现。然而，以往实验中光晶格强度的非均匀性和费米原子制冷存在的困难，使得上述两个关键条件一直无法得到满足。因此，反铁磁相变一直无法实现。

为了解决这些难题，研究团队在前期实现盒型光势阱中的均匀费米超冷的基础上，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。进一步，研究团队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定证据——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。

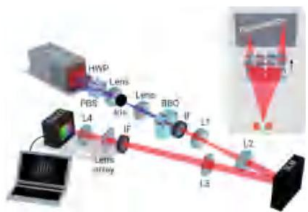
该工作推进了对费米子哈伯德模型的理解，为进一步求解该模型、获取其低温相图奠定了基础，也首次展现了量子模拟在解决经典计算机无法胜任的重要科学问题上的巨大优势。《自然》杂志审稿人对该工作给予了高度评价，称该工作“有望成为现代科技的里程碑和重大突破”，“标志着该领域向前迈出了重要的一步”“是实验的本作，是期待已久的成就”。

（物理学院 合肥微尺度物质科学国家研究中心 中国科学院量子信息与量子科技创新研究院 科研部）

中国科大成功观测到双光子空间波函数动力学演化

本报讯 中国科大郭光灿院士团队在量子测量与传感研究中取得重要进展。该团队李传铮、许金时、刘墨地等人首次提出并实验实现了量子克拉克-哈特曼波前传感器。相关研究成果于7月16日发表在《物理评论快报》上。

经典光学中，克拉克-哈特曼波前传感是一种广泛使用的相位测量方法，它使用微透镜阵列，将光场在局部空间的传播方向转换为聚焦光斑的位移，从而测量得到光场相位梯度的分布，并重构出相位。其空间分辨率由透镜尺寸决定。研究团队受此启发，提出并实现了量子克拉克-哈特曼波前传感器，观测到位置纠缠光子对空间波函数的动力学演化。双光子射入透镜阵列后，在其后焦面探测双光子的联合空间概率分布。



量子波前传感原理示意图（小图）和实验装置图。

通过对单个微透镜孔径内所有点的条件概率分布求和并应用梯度算法可以重构出相位，结合强度分布即可得到双光子空间波函数。

数。研究团队测量了自发参量下转换产生的光子对在自由空间不同演化时间的空间波函数，观测到双光子在自由空间传播过程中振幅关联逐渐变弱，而相位关联逐渐变强的过程。研究组还测量了双光子在动量空间使用空间光调制器加载双曲抛物面相位后的波函数。该方法作为量子自适应光学这一全新领域的关键技术，在未来可应用于量子通信、天文观测和多光子相互作用检验中。

中国科学院量子信息重点实验室博士研究生郑逸、特任副研究员刘墨地为论文共同第一作者。

（中国科学院量子信息重点实验室 中国科学院量子信息和量子科技创新研究院 物理学院 科研部）

中国科大在极弱磁场量子精密测量领域取得进展

本报讯 中国科大中国科学院微纳磁共振重点实验室彭新华教授、江斌副教授团队在极弱磁场量子精密测量领域取得进展，发现了混合原子自旋之间的法诺共振干涉效应，提出了全新的磁噪声抑制技术，成功降低磁噪声干扰至少2个数量级。相关研究成果于近日发表在《物理评论快报》上。

研究团队发展了基于法诺共振干涉相消的磁噪声抑制方法，并在气态氮和钾原子混合体

系中进行了实验验证。在该体系中，被激光极化的钾原子作为气态氮原子核自旋的极化读出手段，通过自旋交换耦合实现氮原子核自旋的极化。其中的核心思想是，钾原子和氮原子间的自旋交换耦合还导致它们各自感受到来自另一自旋原子的等效磁场，其中钾原子感受到的氮原子等效磁场和外界磁噪声发生相消干涉时就实现了磁噪声抑制。

该项工作指出，在磁探测灵敏度受磁噪声

（如磁屏蔽材料产生的约翰逊噪声等）限制的情形下，利用该磁噪声自补偿效应有望将磁噪声探测灵敏度提升1个量级，在更广频率范围内达到 $0.1\text{ pT}/\text{Hz}^{1/2}$ 水平。这项技术将用于基础物理研究中的暗物质探测、奇异自旋相互作用的探测等领域，具有重要的科学意义和应用前景。

中国科学院微纳磁共振重点实验室博士研究生秦毓舒、邵联涵为该文共同第一作者，彭新华教授、江斌副教授为该文通讯作者。

（中国科学院微纳磁共振重点实验室 物理学院 中国科学院量子信息和量子科技创新研究院 科研部）

中国科大在分子与金属表面碰撞的非绝热动力学方面取得进展

本报讯 中国科大蒋彬教授课题组在分子与金属表面碰撞的非绝热动力学模拟方面取得重要进展。相关研究成果于7月19日发表在《物理评论快报》上。

准确描述涉及电子转移的分子在金属表面的非绝热动力学是理论界长期面临的挑战。为了解决这一问题，研究团队提出了“约束密度泛函理论+嵌入原子神经网络+独立电子跳跃”的模拟策略，并将该策略用于CO分子从Au(111)表面散射过程中的能量转移动力学模拟。研究人员首先用约束密度泛函理论计算了

众多构型的CO分子在金属表面的电子转移透热态，并用嵌入原子神经网络拟合相应的全维势能面，最后用独立电子面跳跃方法模拟分子散射过程中的能量转移过程。研究结果显示，独立电子面跳跃模拟得到的高振动态CO($v=17$)分子散射后的振动态态分布与实验很接近，低振动态CO($v=2$)散射后的振动态分布概率、平均动能以及散射角分布也都模拟重现。

值得一提的是，模拟结果还揭示了不同初始振动态下不同的能量传递通道，对于理

解分子-表面体系的能量传递过程有着重要的意义。此外，这套模拟策略有望用于研究一些复杂过程的能量转移动力学，比如光/电化学和等离子体催化过程。

中国科大化学物理系博士孟刚为该论文的第一作者，University of Warwick的Reinhard J. Maurer教授与中国科大蒋彬教授为共同通讯作者，西湖大学的蔡文杰教授合作参与了研究。

（化学与材料科学学院 精准智能化学重点实验室 科研部）

立体化学不可控的问题。该反应适用于多种底物，并且具有出色的官能团兼容性。此外，该催化体系还能实现烯烃的氧化烷基化，在药物分子和天然产物的合成与修饰中展现出应用潜力。

该研究为烯烃官能化反应的立体选择性控制提供了新模式，同时为烷代药物等手性功能分子的合成开辟了新途径。

（精准智能化学重点实验室 化学与材料科学学院 科研部）

中国科大在烷基偶联领域取得进展

本报讯 中国科大精准智能化学重点实验室、化学与材料科学学院傅尧教授、陆燕副教授等在烷基偶联领域取得进展。相关研究成果于7月10日发表在《自然·合成》上。

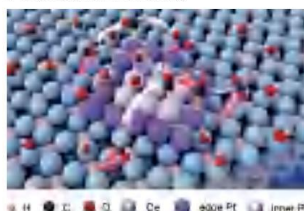
研究团队深入研究了烷基金属中间体结构和反应规律性，成功建立了一种利用C-H $\cdots\pi$ 非共价相互作用（一种化学弱相

互作用）来控制反应选择性的新模式。在该过程中，苯乙炔底物的 π 电子体系与催化剂中的氢原子之间形成C-H $\cdots\pi$ 相互作用，从而精确控制了反应的立体化学选择性。这使得钯催化的烯烃氢烷基化反应能够顺利进行，精准构建了芳基邻位手性烷基碳中心，解决了无杂原子烯烃氢烷基化反应

中国科大在原位同步辐射揭示金属载体相互作用机制研究中取得进展

本报讯 中国科大国家同步辐射实验室、精准智能化学重点实验室在金属载体相互作用机制的原位同步辐射研究中取得新进展。相关研究成果于近日发表在《德国应用化学》上。

研究团队理性构筑了一种外延生长于CeO₂表面的小尺寸原子层Pt催化剂（Pt₁Al₃/CeO₂），并利用发展的同步辐射原位X射线吸收光谱技术，证实了Pt原子层金属与CeO₂载体之间存在较强的金属-载体间电荷迁移相互作用（EMSI）。同时，阐明了催化剂中所构建的最大化的Pt-O-Ce活性位点，通过EMSI改变活性位点的表面吸附选择性和单元结构稳定性，有效地提升了电催化MOR的活性和稳定性。此外，研究团队根据活性位点与其相邻氧原子点之间的距离，创新性地将Pt原子层分为边缘和内部Pt-O-Ce活性位点。结合同步辐射原位红外光谱技术进行实时监测和理论计算，深入研究了内部和边缘Pt-O-Ce活性位点分别诱导产生CO₂和非CO₂路径。



Pt₁Al₃/CeO₂催化MOR的完整机理示意图。

进一步地，研究团队综合多种同步辐射原位谱学结果，详实地解析了催化过程的完整反应机理。在充分认识反应机理的基础上，团队进一步明确定义了更具普适性的设计理念，即通过实现非CO₂路径选择性的最大化来克服Pt基催化剂在MOR过程中普遍存在的易中毒问题，并发展了一种旨在最大限度提高非CO₂路径选择性的新型催化剂设计策略。

论文的通讯作者是姚涛教授、丁韬研究员，共同第一作者是博士研究生许爱荣、刘统和刘彬。

（精准智能化学重点实验室 国家同步辐射实验室 科研部）