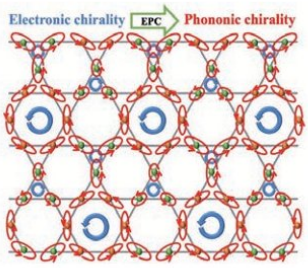
中国科大揭示二维笼目晶格中的电子手性可导致声子手性

本报讯 中国科大合肥微尺度物质科学国家研究中心张振宇教授、崔萍研究员课题组与牛谦教授等合作，在量子材料中手性声子的理论研究方面取得重要进展，发现二维笼目晶格中以回路电流序形式所体现的电子手性可导致矢量型电声耦合，并进一步诱导出手性声子。这一新颖机制有别于手性声子必须源于手性结构或磁性的传统理解，分别对应于空间反演破缺或时间反演破缺，相关成果于9月17日发表在《物理评论快报》上。

研究团队发现，即便在不具备原子结构手性且无磁性的笼目晶格中，源于回路电流序的电子手性也可通过矢量型电声耦合作用诱导出手性声子，而非传统的标量形式（如图所示）。该研究的核心结论通过层状化合物AV_3Sb_5(A=Cs,Rb,K）中的两种典型回路电流序得以展示：一种为以纯虚数电荷键序描述的受限手性通量相，另一种为以复数电荷键序描述的广义手性通量相。背后的微观物理机制可归因于回路电流序所产生的分子贝利曲率，并通过电声耦合表现为非局域、破坏声子时间反演对称性的有效磁场，类似于传统的安培定律，进而将电子系统中手性“遗传”给声子。该发现为解释本身不具备手性结构的量子材料中的手性起源提供了新见解，并为理解手性电荷密度波、手性超导等多种手性电子集体现象奠定了重要基础。

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 中国科学院量子信息与量子科技创新研究院 科研部）



笼目晶格中以回路电流序形式存在的电子手性，通过矢量型电声耦合作用“遗传”给原子振动，从而产生声子手性。

中国科大开发出新型固态钠电氯化物正极材料

本报讯 中国科大姚宏斌教授课题组与焦淑红教授课题组合作，开发出一种应用于全固态钠电池的高可变形性和低成本的新型钠电氯化物正极材料$NaFeCl_4$，有效解决了传统氧化物正极在循环过程中面临的接触失效问题，并揭示了$NaFeCl_4$在充放电过程中的相变过程以及结构可逆性。相关成果于9月18日发表在《美国化学会杂志》上。

研究人员发现，Fe−Cl键在所有过渡金属−氯双原子分子中具有最低的键解离能（335.5 kJ mol^{-1}），这意味着选择Fe作为氧化还原活性元素更有可能构筑高可变形性正极。在此基础上，研究人员成功合成了$NaFeCl_4$，并发现冷压成型的$NaFeCl_4$杨氏模量仅为1.33GPa，并具有极高的致密度（99.3%，375 MP），有利于固态电池复合正极内部良好的固固接触。

研究人员通过X射线衍射（XRD）和X射线光电子能谱（XPS）等测试，深入探究了$NaFeCl_4$正极在循环过程中的结构可逆性以及其独特的两阶段相变原理，并揭示了$NaFeCl_4$嵌入钠离子之后产生的三种主要结构，包括Suzuki结构的Na_4FeCl_8（Fm3m），正交尖晶石结构的$Na_{1.98}Fe_{1.19}Cl_4$（Imma），和立方尖晶石结构的Na_2FeCl_4（Fd3m）。除此之外，通过原子力显微镜（AFM）和聚焦离子束（FIB）加工的扫描电子显微镜（SEM）测试表明，$NaFeCl_4$复合正极在不同荷电状态下的模量均处于2−3GPa之间，使得复合正极内部在循环过程中始终保持无晶界、裂纹和孔隙的致密形貌。

得益于$NaFeCl_4$的可变形性和结构可逆性，基于其组装的全固态钠电池在500次循环后仍能维持84.4%的容量保持率。令人欣喜的是，尽管成本仅为常用钠离子电池正极$NaNi_{1/3}Fe_{1/3}Mn_{1/3}O_2$的5.2%和$Na_3V_2(PO_4)_3$的3.7%，$NaFeCl_4$仍能提供具有竞争力的能量密度（405 Wh kg^{-1}），这表明该新型钠电氯化物正极不仅为解决全固态复合正极的接触失效问题提供了全新的材料策略，还在未来大规模低成本储能方面具有巨大的应用潜力。

化学与材料科学学院应用化学系博士研究生王子为、罗锦达和清华大学化学工程系黄中垣博士为共同第一作者，中国科大姚宏斌教授、焦淑红教授、殷逸臣博士为共同通讯作者。

（化学与材料科学学院 科研部）

中国科大在一维极化子超晶格精密探测研究中取得重要进展

本报讯 中国科大单分子科学团队利用基于扫描探针的“多合一”综合物性表征技术，结合在位表面合成技术，在n型掺杂的单条聚合物中实现了一种准粒子——极化子的超晶格结构，并揭示了其高度耦合的晶格畸变、多带电荷密度波与振动模式退简并特性。相关成果于9月24日发表在《自然·纳米技术》上。

研究团队利用表面精准合成技术，在具有较小功函数的银单晶Ag（111）和Ag（100）衬底表面制备了乙炔基桥连并五苯聚合物（EBPP），并与制备在具有较高功函数Au（111）衬底上的EBPP样品做了细致比较。分析表明，由于Ag（111）和Ag（100）向EBPP聚合物转移电子，使得EBPP为n型掺杂且具有不同掺杂浓度。在电声耦合作用下，导致极化子凝聚形成具有不同超周期的一维极化子超晶格，即Ag（111）表面的三倍周期的3a−EBPP和Ag（100）表面的五倍周期的5a−EBPP。与此相比较，生长在Au（111）表面的EBPP聚合物由于可忽略的掺杂浓度，不会形成类似的超晶格结构。

利用集成扫描隧道显微镜/谱（STM/STS）、原子力显微镜（AFM）和针尖增强拉曼光谱（TERS）的“三合一”综合表征技术，以及第一性原理密度泛函理论（DFT）计算，研究在单化学键水平实现了单条聚合物中极化子超晶格空间分辨的、高度耦合的结构、电子态和振动态的同步关联探测。通过AFM解析到的周期性晶格畸变所伴随的具有强耦合特征的电子态周期性调制与振动态退简并模式，研究揭示了不同超晶格中相互作用的极化子引起的多带电荷密度波属性。对比几乎没有电荷转移的Au（111）表面获得的单倍周期聚合物结果，团队确认了电子掺杂增强的电声耦合引起的皮尔斯（Peierls）畸变对极化子超晶格的形成所起到的关键作用。

进一步，团队结合实验所获得的高精度轨道能态与DFT计算结果，刻画出了极化子能带结构。费米面处的能隙特征表明体系存在极化子相互作用的关联效应，纠正了之前理论预测的极化子超晶格具有金属能带的错误认识。对比计算与实验获得的极化子态密度，此次研究表明GGA+U方法可在一定精度范围内描述极化子超晶格中的极化子波函数。超晶格中桥连乙炔基的拉曼位移频率与峰宽（半峰全宽，FWHM）显示出与极化子波函数空间分布的高度关联性。其中，拉曼位移频率与乙炔基键长总体趋势相反，揭示了电子极化子超晶格中皮尔斯畸变引起的键长调制，拉曼峰宽信息揭示了化学键依赖的电声耦合强度的空间调制。但是，目前的理论框架对于处理复杂的极化子相互作用还有很大的困难，计算结果与高精度的实验结果还存在较大的偏差。

该项研究通过探针显微术与光谱技术的融合，实现了准一维超晶格极化子波函数的实空间直接成像，为理解极化子超晶格的相互作用微观行为提供了重要见解，对于理解有机半导体中的极化子电荷传输机制也具有重要意义。该成果所取得的高精度实验参数方面的进展，将为进一步发展针对极化子超晶格的理论模型提供更精确的实验基准，有助于更先进的极化子微观理论模型发展。

中国科大博士研究生吴莹莹和李斌副教授为论文的共同第一作者。中国科大王兵教授、合肥国家实验室马传许研究员为论文共同通讯作者。

（合肥微尺度物质科学国家研究中心 精准智能化学全国重点实验室 新基石实验室 科研部）

中国科大利用高维纠缠实现高效量子随机通信

本报讯 中国科大郭光灿院士团队柳必恒研究组与瑞典隆德大学Armin Tavakoli博士、瑞士日内瓦大学Jef Pauwels博士合作，提出一种基于“随机存取码”的随机通信框架，并在高维量子光学平台上实现高成功率的随机通信，同时给出一种具有噪声鲁棒的高维纠缠认证方案。相关成果于9月17日发表在《物理评论快报》上。

如何在不依赖复杂纠缠测量和多光子辅助的前提下，实现可扩展的高维量子通信，成为当前亟待解决的核心科学问题。针对高维纠缠测量的难题，研究团队基于随机存取码构建了一种随机通信协议。在共享n维纠缠的基础上，发送端仅通过高维移位操作与相位门（X、Z）对单光子编码两位信息x_1x_2，接收端则无需执行纠缠测量，而是根据通信需求分别对两粒子实施Z⊗Z或X⊗X的单粒子测量。该方案理论上能够以确定性成功率S=1解码x_1或x_2。进一步，研究团队提出基于成功率 $s \le \frac{1}{2}\left(1+\sqrt{\frac{d}{n}}\right)$ 对共享纠缠的维度（Schmidt数）进行认证，该方法具备良好的噪声鲁棒性。

在实验实现方面，研究团队采用路径和偏振自由度混合编码构建八维子空间，显著提高了高维移位操作和构建高维测量的效率，展示出优越的可扩展性。基于共享的八维纠缠，通过全出口高维测量实现对发送方编码信息的随机解码，实验测得成功率S=0.9729±0.0001，超过了七维纠缠所能达到的理论成功率上界0.9677，从而认证了所共享的纠缠态维度不低于八维。

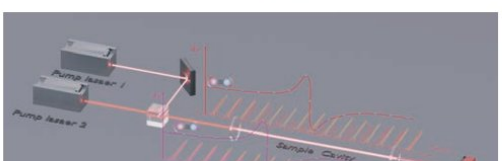
该研究成功规避了高维系统中复杂的纠缠测量操作，凸显了高维量子通信的显著优势。这一突破不仅消除了长期制约高维量子实验发展的技术瓶颈，还提供了一条可扩展、高噪声鲁棒的高维纠缠认证方法。同时，实验采用的“路径+偏振”混合自编码方案具有良好的可扩展性以及与城际光纤的兼容性，为未来高维量子通信的实用化和长距离分发奠定了技术基础。

中国科大张超博士（现为丹麦技术大学博士后）、博士研究生苗家乐为论文共同第一作者。中国科大特任教授胡晓敏、日内瓦大学Jef Pauwels博士、隆德大学Armin Tavakoli博士以及中国科大柳必恒研究员为论文通讯作者。

（量子网络安徽省重点实验室 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）

中国科大基于频率测量法实现超高精度分子线强度比

本报讯 中国科大分子精密光谱研究团队联合英国伦敦大学学院与德国计量局（PTB）在分子精密光谱与量子计量领域取得突破性进展。相关成果于9月17日发表在《科学进展》上。该工作通过发展完全基于频率测量的光谱技术，将分子线强度比的测量不确定度降至0.003%，并首次实现基于光学方案、可直接溯源至玻尔兹曼常数的原级测温，统计不确定度低至0.5mK，较之前文献报道同类工作的精度提升10倍以上，为量子化学、精密测量及多学科交叉研究开辟了新范式。



双波长腔模色散光谱装置示意图

研究团队开发的“双波长腔模色散光谱技术（DW−CMDS）”成功消除了测量中的共模误差，使分子跃迁强度比的测量精度达到十万分之一水平，较此前国际最高水平（0.1%）提升近两个数量级。这一技术突破直接推动了光学测温技术的革新：基于分子光谱的热力学温度测定可直接溯源至基本物理常数，无需依赖传统温标传递，在燃烧诊断、同位素分析等计量场景中展现出巨大应用潜力。

CO分子作为迄今研究最为透彻的简单分子之一，成为检验量子化学理论的理想对象。该研究对迄今最高精度的量子化学从头算理论进行了直接检验——实验数据和之前理论计算结果存在高达0.2%的系统性偏差，而与修正后的理论计算结果间的偏差可降低到0.02%水平，但仍然明显大于实验误差。这种“近乎完美却又暗藏差异”的结果，带来了对分子偶极矩面电子关联效应的新认识，实验结果将成为标志性benchmark，指引量子化学理论和计算模型的进一步优化。

此项工作的核心价值在于其高度的学科交叉性：既是检验理论的“试金石”，通过实验数据验证最高精度量子化学理论预测的可靠性；也是精密光谱技术的“里程碑”，为分子物理参数测量树立新基准；更是计量学领域的“新工具”，可广泛应用于能源、环境等领域的高精度测量。

研究团队表示，该技术有望进一步拓展至更复杂分子体系及极端物理条件下的测量，实现高精度的温度计量、气体与同位素分析等，助力解决量子化学、天体物理、地质化学等领域的关键科学问题。

中国科大研究生李进科、合肥国家实验室王进博士为该论文共同第一作者，中国科大胡水明教授、谈艳研究员，伦敦大学学院Jonathan Tennyson教授为论文共同通讯作者。

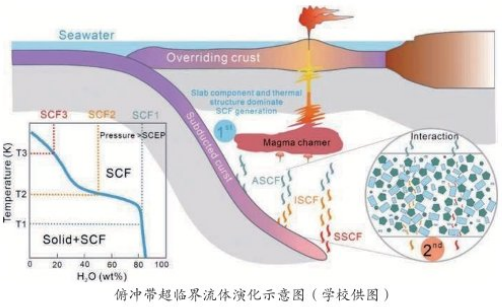
（合肥微尺度物质科学国家研究中心 科研部）

科学家在天然样品中发现富水超临界流体证据

中国科大黄方教授研究团队联合西北大学董云鹏教授通过分析研究，在天然样品中识别出富水超临界流体的明确信号。据介绍，这一以秦岭造山带松树沟地幔橄榄岩为研究对象，分别通过主微量地球化学和钡同位素分析，而发现富水超临界流体证据。

该成果近日发表在地球化学国际知名期刊《地球与行星科学通讯》上。

超临界流体是水与硅酸盐熔体在高温高压下完全互溶形成的一种特殊流体，被认为是地球内部物质循环与能量交换的关键载体。



俯冲带超临界流体演化示意图（学校供图）

超临界流体的成分连续变化，受到周围共生岩石的缓冲控制，随温度升高从富水端元逐渐过渡到富硅酸盐端元。然而，富水超临界流体形成于很难直接窥探的高压高温地幔中，其水的主体部分也难以在地质历史中保存下来。因此，富水超临界流体的性质以及在这些关键科学问题中扮演的角色尚未充分了解。

秦岭松树沟地幔橄榄岩是新鲜且无蚀变的，其中的易融组份含量显著低于全球亏损地幔橄榄岩。同时，极度亏损中稀土和重稀土元素的成分特征，暗示其来自难熔的地幔楔。这种极度熔体提取导致松树沟橄榄岩的背景微量元素非常“干净”，是研究板片衍生交代介质性质的理想对象。

此次工作中，中国科大段皓晨博士等研究人员观察到橄榄岩中流体活动性和不活动性元素均显著富集，揭示松树沟橄榄岩经历过富水超临界流体的交代作用。

（转自中国新闻网 2025年9月18日 记者 吴兰）