

## 中国科大实现综合性能国际最优的单光子源 为可扩展光量子信息技术奠定基础

**本报讯** 中国科大潘建伟、陆朝阳等在国际上首次实现基于半导体量子点的高效率和高全同性的单光子源，综合性能达到国际最优，为实现基于固态体系的大规模光子纠缠和量子信息技术奠定了科学基础。国际权威学术期刊《物理评论快报》日前以“编辑推荐”的形式发表了这一研究成果，并在美国物理学会的 Physics 网站专门撰文介绍。

量子点是通过分子束外延方法制备的半导体量子器件，又被称为“人造原子”，原理上可以为量子信息技术提供理想的单光子源。为了能够真正用于可扩展、实用化的量子信息技术，单光子器件必须同时满足三个核心性能指标：单光子性、高全同性和高提取效率。尽管从 2000 年开始，国际上许

多研究机构（包括加州大学、斯坦福大学、剑桥大学等）对量子点光学调控进行了长期和大量的探索，然而这三个核心指标一直无法得到同时满足，因而成为固态量子光学领域 15 年来悬而未决的重大挑战。

2013 年，潘建伟、陆朝阳等首创量子点脉冲共振激发，实现了当时国际上全同性最好的单光子源。但是由于量子点平面腔结构的限制，之前的实验中荧光收集效率较低。为了大幅提高荧光提取效率，研究人员通过高精度分子束外延生长和纳米刻蚀工艺结合，获得了低温下与量子点单光子频率共振的高品质因子光学谐振腔。因此，实验产生的单光子源提取效率达到 66%，单光子性优于 99.1%，全同性优于 98.6%，在国际上首次同时解决了单光子源

的三个关键问题，成为目前国际上综合性能最优秀的单光子源。

实验实现的量子点单光子源亮度比国际上最好的基于参量下转换的触发式单光子提高了 10 倍，同时具有接近完美的全同性，而且所需激光泵浦功耗降低 1 千万倍（纳瓦量级），这样的量子点单光子源可在将来应用于大规模光子纠缠，进一步推动多光子纠缠与干涉度量学的发展。审稿人评价这个研究成果为“实验杰作”（tour-de-force），“在领域中有重要影响力”。《自然》杂志在最近一期的“研究亮点”栏目中以“可实用化的单光子源”为题做了专门报道。

（量子信息与量子科技前沿创新中心 合肥微尺度物质科学国家实验室 科研部）

## 中国科大团队首次发现货物分类存储策略的“碗形曲线”

**本报讯** 中国科大管理学院余玉刚教授及其课题组对仓储系统的分类存储策略模型进行了重建与优化，发现了系统存取货物所需时间与分类数量之间在一般情景下的“碗形曲线”关系，首次从理论上揭示了无论货物仓储数量多少，货物分类个数控制在 3-5 类总能实现仓储效率的最优化，解决了近 40 年理论与实践不一致之谜。该成果的主要结论发表在管理学顶级期刊《Production and Operations Management》上，管理学院郭晓龙博士与荷兰的 Rene de Koster 教授为本文的共同作者。

在过去近 40 年中，仓储管理领域存在一个普适性结论：在分类存储策略中，区域分类数量越多仓储系统存取效率越高。此结论由三位 INFORMS Fellow 于 1976 年在管理学顶级刊物 Management Science 上提出，并被高校教材作为专业理论使用。然而，此理论结论并未被现实企业所采用，反而 3 至 5 类的分类存储策略应用广泛。这一理论与实践不一致的现象成为近 40 年的理论未解之谜。

余玉刚课题组首次在理论上得到了“碗形曲线”结果，说明了货物分成 3 至 5 类能够为系统提供最高的工作效率，这与现实中企业的做法高度一致，为上述困扰学界近 40 年的谜题给出了理论解释。“碗形曲线”揭示管理者可以根据成本等其它需求在“碗底”自由选择分类数，不会对仓储系统的效率带来显著影响。

该研究前后持续了 7 年之久，修正了沿用近 40 年的仓储管理理论的不足，为传统仓储理论及教科书修订提供了重要参考。（管理学院 科研部）

## 中国科大发现大气水团簇中硫酸铵形成机理及与 PM2.5 颗粒成核生长的潜在关联

**本报讯** 近日，我校曾晓成教授和美国化学学会前主席 Joseph Francisco 院士研究组，通过第一性原理分子动力学模拟研究发现了硫酸氢铵在大气中一种全新的形成机制。成果作为通讯文章发表在《美国化学会志》上，并被美国化学学会《化学与工程新闻》2 月 8 日选为热点文章报道。

2015 年入冬以来，中国北方严重雾霾天数增多，导致对人体健康的危害加剧。雾霾颗粒的组成成分非常复杂，其中 PM2.5（空气中直径小于等于 2.5 微米的颗粒物）对人体和环境有着严重影响，从而受到广泛的关注。而铵盐（比如硫酸铵和硝酸铵）是 PM2.5 雾霾颗粒的重要组成成分，并有观点认为其对 PM2.5 雾霾颗粒的成核起着至关重要的作用。然而由于分子水平上铵盐形成机理以及微观 PM2.5 成核机理还不完全清楚，氨气对雾霾颗粒形成

的影响没有受到广泛关注（news.qq.com/a/20150301/022140.htm）。因此，研究铵盐形成的微观机理对理解大气中雾霾颗粒的形成机理进而为减轻严重雾霾天气提供科学指导有着非常现实而紧迫的意义。

对于铵的硫酸盐在大气中的形成，传统研究观点认为，三氧化硫（SO<sub>3</sub>）先与水反应形成硫酸，再进一步与氨气（NH<sub>3</sub>）反应产生铵的硫酸盐。然而在最新研究中，曾晓成和 Francisco 小组利用第一性原理分子动力学模拟研究首次发现，氨气可直接参与到三氧化硫与水的反应中。他们在模拟中直接观测到氨气分子和三氧化硫分子在水团簇中自发反应形成硫酸氢铵（NH<sub>4</sub>HSO<sub>4</sub>）的过程。在反应过程中，氨气和三氧化硫与水团簇形成一种特殊的环状结构。该环状结构的形成极大地促进了水分子中氢原子向氨气分子的转移，从而

形成铵根离子。而同时氢氧根则很快与三氧化硫分子结合形成硫酸氢根。通过进一步反应该度搜索，确认了反应路径，他们发现三分子水团簇中第三个水分子的存在有助于环状结构的形成，而该环状结构能将反应能垒降至几近为零，从而大大增加了硫酸氢铵在大气水团簇中的形成速度。曾晓成和 Francisco 小组在纳米水滴表面也观测到了同样的反应机理。

这种新型近零势能反应机理的发现表明，氨气可以直接参与并加速大气中铵盐的形成，从而对大气中雾霾颗粒的形成也起到至关重要的作用。该理论研究提出的新型环状结构导致的氢原子转移机制，有望为研究大气云层中的化学反应和雾霾颗粒的成核机理提供理论模型和指导。

（化学与材料科学学院 能源材料化学协同创新中心 科研部）

## 我校软科学成果入选国家《软科学要报》

**本报讯** 近日，由我校公共事务学院主持的国家软科学项目《协同创新中的知识产权参与、共享和利益分配机制研究》课题组，完成了《以互联网思维促进协同创新的发展》的研究报告。该报告成功入选《软科学要报》2016 年第 2 期。研究报告由彭小宝副研究员、研究生任端阳、高晓培同学共同完成。

该报告通过分析互联网情景下的创新特点和多元参与式知识产权形成方式，认为知识合作模式以及随后的知识产权形成方式发生了巨大变化，多方参与、协同创新的知识产权成果呈现出新的复杂形式，建议通过知识资源流通和评价后共享方式，内化多方合作成本，加速知识产权所有权、使用权、收益和分配权改革，从而促进协同创新能力的提高。

该报告分析了企业、高校、科研院所以及政府等社会组织在协同创新中的作用，以及合作中介及专业化知识产权运营组织的重要性，建议在明确知识产权权利属性和确权原则的基础上，积极推进参与各方的知识产权共享模式，加速知识产权产业化进程，打造以知识创造和应用为依托、以知识产权运营为核心的产业化新模式。这些政策建议对于我国知识产权战略的实施和知识产权产业化的发展有较强的参考意义。

《软科学要报》是国家科技部办公厅调研室、中国科学技术发展战略研究院编写的权威内参，由科技部报送中共中央政策研究室、中央办公厅调研室、全国人大常委会办公厅、全国政协办公厅、国务院研究室、国家科教领导小组办公室等部门。其刊发的研究成果反映了当今中国软科学研究的新成果及新动向，有着重要的决策参考价值。

（公共事务学院 科研部）

## 中国科大通过碳原子的协同“四重奏”在石墨烯分子条带中实现自旋量子通道转换

**本报讯** 近日，合肥微尺度物质科学国家实验室国际功能材料量子设计中心崔萍博士与曾长淦教授研究组理论与实验互动性合作，在石墨烯分子条带自旋电子学研究方面取得重要新进展，证明在锯齿型石墨烯分子条带间引入碳四元环，可以有效地打破边缘自旋量子通道的简并度，并以 100% 的可靠率翻转边缘态的自旋取向，以电荷掺杂的形式选择与控制所需要的单一自旋通道，从而多方位地展示了未来自旋电子学中不可或缺的自旋开关功能，同时实验上也制备出碳四元环连接的石墨烯分子条带。该研究成果于 1 月 14 日在线发表在国际权威物理学杂志《物理评论快报》上。

石墨烯材料的自旋极化态在自旋电子学的基础与应用研究中受到广泛关注。

以往的研究集中在锯齿型石墨烯纳米条带的两个边缘自旋态，及其通过电场、磁场、结构裁剪和掺杂等方法对边缘自旋态的有效调控。最近，崔萍博士与曾长淦教授的合作团队构思了一种新的拓扑结构来控制石墨烯纳米条带体系自旋传播通道的空间分布，从而从概念上实现自旋开关这一基本单元。首先，曾长淦教授研究组在实验上观察到在石墨烯分子条带之间可能通过碳四元环连接。然后，崔萍博士与合作者利用基于量子力学的第一性原理计算证明在最窄的石墨烯分子条带的合适位置引入碳四

元环，可以先将石墨烯分子条带两个边缘的自旋通道有效地捆绑，再通过碳四元环翻转两个输出自旋通道的自旋取向，实现自旋转换功能。进一步研究表明，这种碳四元环结构导致两个自旋通道退简并，使得通过电荷掺杂来激活或抑制某一自旋通道成为可能，从而实现自旋开关功能。最后，实验上通过 Au (110) 表面准一维重构的辅助，在并五苯分子的脱氢环化反应中制备合成了这种理想的碳四元环连接的石墨烯分子条带。该工作为自旋电子学的发展提供了一个基本逻辑单元，有望有广阔的应用前景。（合肥微尺度物质科学国家实验室国际功能材料量子设计中心 量子信息与量子科技前沿创新中心 科研部）

## 气体水合物和冰相研究取得重要进展

**本报讯** 近日，我校化学与材料科学学院曾晓成教授研究组与大连理工大学赵纪军教授研究组合作，通过理论研究预言了一种新的气体水合物和冰相，成果发表在 2 月 12 日《科学进展》上。

气体水合物是在一定的温度、压力条件下由水和气体分子结合生成的类冰的、具有笼形结构的内嵌气体分子结晶化合物。目前，人们在海底和冻土层发现了巨大的天然气水合物储量。据保守估计，自然界中天然气水合物中贮存的天然气总量约为其它化石燃料储量总和的两倍，是一种具有良好前景的后续清

洁能源。因此，对气体水合物的研究在能源和环境领域有着非常现实而紧迫的意义。

两个研究组通过计算模拟发现，水分子可以形成一种新的具有立方结构的晶体，将其命名为 III 型气体水合物。与已知的 I 型、II 型和 H 型气体水合物相比，这种新型气体水合物具有较小的密度且含有较大的空腔，可以容纳较大的气体分子，如正十二面烷分子。理论计算表明，内嵌正十二面烷分子的 III 型气体水合物的结构是热力学稳定的，而不含气体分子

的空心 III 型气体水合物在一定的负压区间内也可以保持结构稳定。

纵观已知冰相的发现简史：冰 II 冰 III 相是在 1900 年德国发现的，冰 IV-VII 相是在 1912-1937 年间美国发现的，冰 VIII 相是在 1966-1968 年间加拿大发现的，冰 X 相是在 1984 年德国发现的，XI 相是在 1984 年日本发现的，冰 XII-XV 相是在 1998-2009 年间英国发现的，最近的冰 XVI 相是 2014 年由德国科学家领导的团队发现的。如果在未来的实验中制备出空心 III 型气体水合物，那么它将有可能成为一种新的冰相结构并作为冰 XVII 相的候选，从而有可能填补中国在发现新冰相史中的空白。

（化学与材料科学学院 科研部）