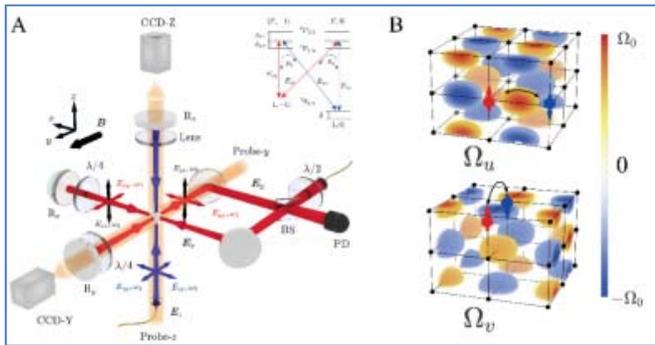
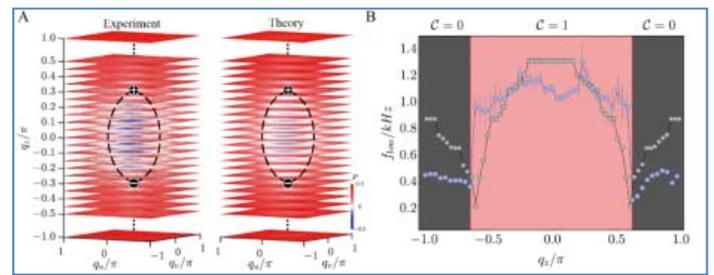




## 外尔物理量子模拟取得重要进展： 中国科大在超冷原子体系实现理想外尔半金属态



图一：A，三维自旋轨道耦合装置示意图。B，实验构造的三维拉曼势结构，导致原子在格点之间的自旋翻转隧穿。



图二：A，通过虚拟断层成像法重构三维自旋纹理，找到两个外尔点的位置。B，通过量子淬火动力学对外尔点位置的标定。

中国科学技术大学潘建伟、陈帅等与北京大学刘雄军等合作，在超冷原子模拟拓扑量子材料方面取得了重要进展。研究团队在国际上首次利用超冷原子体系实现了三维自旋轨道耦合，并构造出有且仅有一对外尔点的理想外尔半金属能带结构。该研究成果于4月16日以研究长文 (Research Article) 的形式发表在国际学术期刊《科学》杂志上 [Science 372, 271-276 (2021)]。由于该工作开启了超越传统凝聚态物理的外尔型拓扑物理的量子模拟，《科学》杂志在同期的视点栏目 (Perspective) 专门配发了题为“The Weyl side of ultracold matter”的评论文章。

在超冷原子自旋轨道耦合的研究方面，中国科大通过和北大合作一直处于研究前沿。2016年，实验团队就和北大理论组合作实现了二维自旋轨道耦合拓扑量子气 [Science (2016)]。近期，北大的理论团队在原二维系统的基础上提出了三维自旋轨道耦合和理想外尔半金属的新型拉曼光晶格方案 [Science Bulletin (2020)]。实现三维自旋轨道耦合和理想外尔半金属能带，实验上面临两个技术难题，一是怎样把二维形式的拉曼耦合拓展到三维结构；二是怎样利用传统的二维成像进行三维动量空间的探测。为此，联合研究团队设计了巧妙的光路，通过将光晶格“旋转” $45^\circ$ ，并将相位锁定，准确构造出理论方案中三维结构的拉曼势，合成三维自旋轨道耦合 (图一)，同时通过调节实验参数合成了有且仅有两个外尔点的能带结构。在探测方面，研究团队借鉴了北大组和香港科技大学G.-B.Jo组合作提出的虚拟断层成像法 [Nat. Phys. (2019)]，并应用到当前的三维光晶格体系。利用体系的对称性，通过调节拉曼失谐等效得到z方向不同动量平面上的自旋纹理，再重构出三维动量空间的自旋纹理，找到外尔点；随后利用量子淬火动力学提取出该平面能带的拓扑特征，进而确定外尔点的位置。两种方法互相佐证，印证了理想外尔半金属能带的实现。

《科学》杂志的审稿人对这一工作给予高度评价，认为这项工作“为冷原子体系研究外尔物理中的新奇现象打开了新的方向” (...a very interesting work which opens a new direction of investigating exotic phenomena associated with the Weyl physics for ultracold atoms)、“作为三维自旋轨道耦合在冷原子体系的首次实现，是领域中的重要进展，并为冷原子研究提供了新的工具” (...this is the first time that 3D spin-orbit coupling was ever achieved in a cold atom experiment. This, in itself represents a significant progress and an important addition to the cold atom toolbox.)、“对理想外尔点的实现是非常有价值的结果，为固体系统提供了起到互补作用的研究方向” (Realizing ideal Weyl cones in cold atom systems is thus an extremely valuable objective and will provide an angle of attack that is complementary to solid-state systems.)。



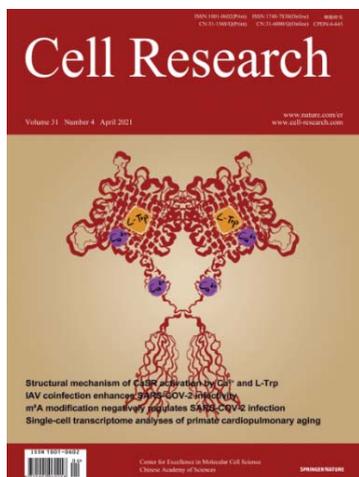
## 研究进展

### 中国科大在C家族GPCR钙敏感受体CaSR的激活机制研究中取得重要进展

近日，中国科学技术大学田长麟教授团队联合清华大学刘磊教授团队在CaSR的结构与功能机制研究方面取得重要进展，相关成果以研究长文形式发表在《Cell Research》杂志，并入选该杂志四月封面文章。

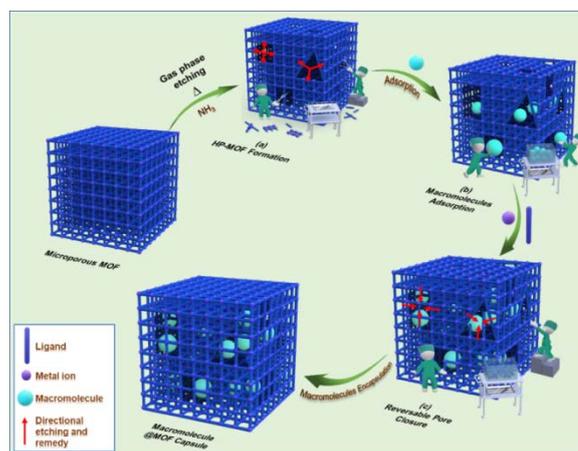
该研究在国际上首次报道了人源全长钙敏感受体CaSR蛋白在四种不同条件下的冷冻电镜三维结构：不添加任何激动剂的“apo”-CaSR的inactive状态电镜结构；同时结合L-Trp和Ca<sup>2+</sup>两种配体的active-CaSR结构；单独结合L-Trp的CaSR结构；单独结合Ca<sup>2+</sup>的CaSR结构。通过结构分析首次阐明了全长CaSR受体的完整激活机制：首先，L-Trp紧密结合在CaSR的VFT配体结合口袋中，诱导VFT从开放状态变成关闭状态；然后高浓度钙离子结合到受体上，使二体CaSR胞外的VFT结构域围绕二体对称轴开始发生扭转；该扭转通过刚性的CRD结构域传递到TMD，使TMD单体互相靠近形成TMD二聚体；最终形成CaSR激活态构象，为下游的G蛋白结合以及信号传递提供基础。

由于CaSR是重要的药物靶标，目前靶向CaSR的药物有三种：小分子药物evocalcet和cinacalcet，多肽药物Etelcalcetide。这三种药物都是钙拟剂，是CaSR的变构激活剂，然而他们对CaSR的变构调节机制目前还不是很清楚。本研究首次展示了全长CaSR蛋白的高分辨三维结构，特别是之前从未报道过的TMD结构。该结构信息使得后续以CaSR-TMD为靶点的别构调节药物设计和开发变得更加高效和准确。



2021年Cell Research 杂志第四期封面  
(黄雯、陈磊、柏江竹设计制作)

### 中国科大在多级孔金属有机骨架研究中取得进展



Schematic illustration of the concept of molecular surgery on microporous metal-organic framework

金属有机骨架(MOF)因其高的比表面积和结构的可调控性在诸如吸附、分离、气体存储，催化剂载体等方面展现出重要的应用场景。微孔MOF由于有限的孔道尺寸，客体分子在其中的扩散运动受到严重限制。在已经报道的八万多种MOF中，介孔MOF的比例还不到1%，同时多数介孔MOF的稳定性严重不足。分级孔MOFs(HP-MOFs)同时含有微孔和介孔，且两者协同作用，既具有高比表面积和活性位点又有利于快速的传质过程，特别对大分子的吸附、分离、催化性能有重要影响。制备可变孔尺寸HP-MOFs的策略可分为缺陷控制晶体生长和合成后孔扩展。这些策略制备的分级孔MOF由随机缺陷产生的介孔，具有较宽的尺寸分布，无法精准控制所产生介孔的大小、体积、形状等。

近日，中国科学技术大学的刘波教授课题组提出了氨气气相蚀刻的方法，在羧酸配位的微孔MOF(HKUST-1, [Cu<sub>3</sub>BTC<sub>2</sub>], BTC = 1,3,5-苯三羧酸)中生成介孔，制备分级孔MOF。相关研究成果以“Molecular Surgery at Microporous MOF for Mesopore Generation and Renovation”为题发表在《德国应用化学》杂志上。

利用MOF的各向异性，受益于气相刻蚀剂在微孔中的均匀性，实现微孔MOF中介孔性质的精准调控。基于气相刻蚀的分子尺度外科手术式的策略为我们提供一个强大的工具来定制和调控多级孔MOF材料的性能，在大分子/纳米颗粒的吸附/分离，胶囊化等领域具有重要应用前景。



## 研究进展

### 中国科大实现设备无关量子随机性扩展实验

近日，中国科学技术大学教授潘建伟及其同事张强、南方科技大学范靖云等，与英国约克大学Roger Colbeck和清华大学马雄峰分别合作，采用不同的理论方法，在国际上首次实现了设备无关的量子随机性扩展，为设备无关量子随机数的实用化发展奠定了坚实基础。相关的研究成果近日分别发表于《自然·物理学》[Nat. Physics 17,448 (2021)]和《物理评论快报》[Phys. Rev. Lett. 126, 050503 (2021)]上。

设备无关的量子随机数产生的本质在于，无漏洞贝尔不等式的违背证明了固有的量子相干性是随机性的来源。即使在极端条件下，设备本身不可信或受到第三方控制，乃至窃听器拥有强大的量子计算机，该方案产生的随机比特仍然具有目前最高等级的安全性，任何基于量子或经典物理的策略都无法对结果进行预测。

潘建伟团队和合作者于2018年首次实验实现了设备无关的量子随机数产生，文章发表在《自然》(Nature)杂志[Nature 562, 548 (2018)]。但是在此实验方案中，随机数产生过程中消耗的随机性远远大于产出。随机数产生的不可持续性阻碍了其在实际应用中的推广。针对这一问题，潘建伟团队及其合作者们设计并实现了设备无关的量子随机性扩展。他们与约克大学Roger Colbeck教授合作，在基于熵累积理论的实验中，约在19.2小时内实现了 $2.57 \times 10^8$ 比特的随机性净增加。英国Bristol大学的Paul Skrzypczyk博士在《自然·物理学》的News & Views栏目撰文评价该工作“毫无疑问提供了最高质量的随机数，是量子技术快速发展的一个里程碑”

(undoubtedly among the highest-quality randomness ever produced. Moreover, they constitute a milestone in the development of quantum technologies)。同时，与清华大学马雄峰教授团队合作，在基于量子概率估计方法的实验中，约在13.1小时内实现了 $1.08 \times 10^8$ 比特的随机性净增加。该工作被《物理评论快报》审稿人给予高度认可，评论为“量子随机数产生/随机扩展领域中的开创性工作”(I believe it will be considered a seminal work in the field of quantum random number generation/randomness expansion)。两项研究成果分别使用不同的理论方案各自独立完成，为未来设备无关量子随机数的商业化与实用化奠定基础。



## 国家研究中心简讯

### ◆2020年度安徽省科学技术奖励大会召开，中心杜江峰院士获重大科技成就奖、3项成果获省自然科学一等奖

2021年4月12日，安徽省召开2020年度全省科学技术奖励大会暨加快科技创新攻坚力量体系建设推进会，会议公布了2020年度科学技术奖获奖项目/人员名单。微尺度国家研究中心杜江峰院士获安徽省重大科技成就奖，中心作为第一完成单位的成果共获安徽省自然科学一等奖3项（全省共9项）。

中心获2020年度安徽省自然科学一等奖的成果包括：陈乾旺教授团队的“纳米功能材料新制备方法探索及其应用研究”，吴东教授团队的“超快激光微纳加工新机制、技术及应用的基础研究”以及单革教授团队的“新非编码RNA的发现、功能及相关调控”。

安徽省科学技术奖是表彰为安徽省科学技术进步、经济社会发展作出突出贡献的科技人员和组织，对激励广大科技工作者持续科技创新、全面开启新阶段现代化美好安徽建设新征程起着巨大的推进作用。

### ◆中国科大博士生荣获2020年度先进材料世界论坛专项奖

近日，从先进材料世界论坛（POLY-CHAR, April 12-14, 2021, Venice, Italy）传来喜讯，合肥微尺度物质科学国家研究中心徐春叶教授的博士生曾志强凭借其优异的研究成果和口头汇报获得了与会专家的青睐，从来自于二十多个不同国家的学生和年轻研究者中脱颖而出，荣获2020年度POLY-CHAR“Prize for Best Presentation from Students and Young Scientists”。

曾志强同学在POLY-CHAR 2020 [Venice]大会上做了题为“新型席夫碱体系在电致变色领域的探索”的英文口头汇报。内容主要为首次将新型的席夫碱类结构引入到电致变色材料及器件中，为节能型“智能窗”的多功能化拓展提供了新的思路。

此奖项旨在表彰对高分子科学基础研究以及应用研究领域有杰出贡献的优秀青年人才，鼓励广大年轻科研工作者投身于高分子材料的研究中，推动该领域的蓬勃发展。