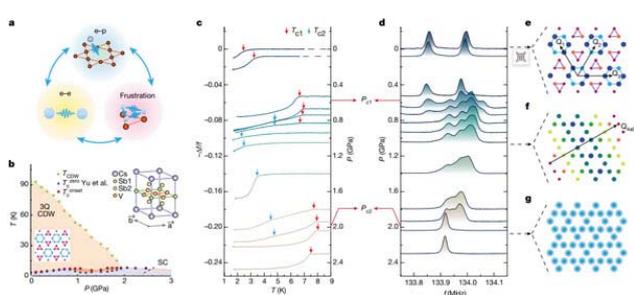
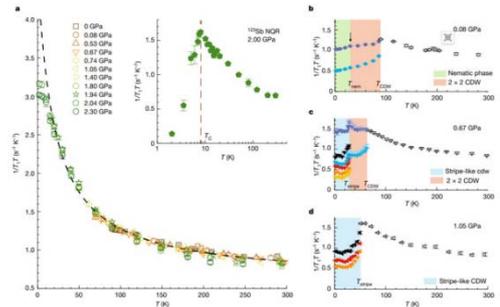




中国科大在笼目超导体的竞争电子序研究中取得重要发现



图注：笼目超导体CsV₃Sb₅中电荷密度波态与超导态在静水压下演化的实验证据以及物理演示图



图注：笼目超导体CsV₃Sb₅中电荷涨落以及非常规超导配对的实验证据

近日，中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家研究中心、物理学院、中科院强耦合量子材料物理重点实验室陈仙辉院士团队吴涛教授等人利用高压下的核磁共振技术，在笼目超导体CsV₃Sb₅中观察到一种由压力诱导的电荷有序态，并发现该电荷有序态与超导态之间存在强烈的相互竞争。这一发现不但为理解笼目超导体中复杂的演生物理现象提供了重要的实验依据，也为进一步在笼目超导体中探索新奇超导态提供了新的方向。相关研究成果以“Emergent charge order in pressurized kagome superconductor CsV₃Sb₅”为题在《Nature》杂志上发表。

二维笼目结构由于其特殊的几何结构，具有非常丰富的能带结构特征，包括平带（flat band）、狄拉克点（Dirac points）以及范霍夫奇点（van Hove singularities）。早期理论预测在范霍夫奇点掺杂附近，二维笼目体系可呈现出新奇的超导电性和丰富的电荷有序态，但长期以来缺乏合适的材料体系来实现相关的竞争电子态。近年来，笼目超导体CsV₃Sb₅的发现为该方向的探索提供了新的研究体系。陈仙辉院士团队在前期研究中成功揭示了该体系中的三重调制（triple-Q）的电荷密度波态（Phys. Rev. X 11, 031026 (2021)）以及新奇的电子行列相（Nature 604, 59–64 (2022)），并通过压力实验观察到电荷密度波与超导电性在压力下的反常竞争关系（Nat. Commun. 12, 3645 (2021); Phys. Rev. Lett. 128, 077001(2022)）。

在上述研究基础上，陈仙辉院士团队吴涛教授等人进一步利用核磁共振谱学技术对压力下笼目超导体CsV₃Sb₅中电荷密度波态和超导态的演化进行了系统的研究。实验结果表明：当静水压下高于临界压力P_{c1}≈0.58GPa时，体系出现了一种新的电荷密度波态，与此同时超导电性被剧烈地压制。经过核磁共振谱学分析，研究团队发现该电荷密度波态具有单向的条纹状电荷调制，类似于之前在高温铜氧化物超导体中发现的一种竞争电子序-电荷条纹序。当进一步增加压力至临界压力P_{c2}≈ 2.0GPa时，新的电荷密度波态被完全压制，超导转变温度也同时提升至最高值，这些结果表明超导与新的电荷密度波态存在强烈的竞争。

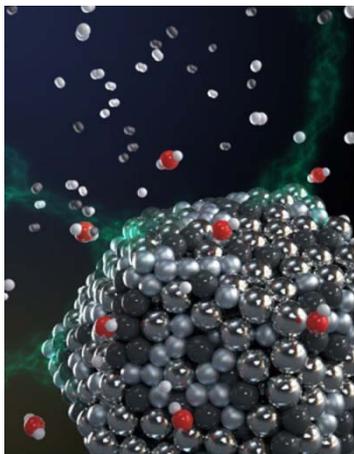
研究团队还通过测量原子核的自旋-晶格弛豫率发现当新的电荷密度波在压力下被完全抑制后，体系在低温下呈现出强烈的电荷涨落，表明笼目超导体具有显著的电子关联效应，这可能是来源于笼目晶格中电子-电子之间非局域的相互作用。此外，在压力下的超导态与常压下的超导态具有显著不同的自旋-晶格弛豫率随温度的演化行为。传统超导体通常会在超导转变温度之下表现出一个特征的Hebel-Slichter相干峰，而这一特征在之前笼目超导体常压下的核磁共振研究中已被观察到，表明常压下的超导态是一种传统超导态。然而，中科大研究团队在压力下的核磁共振研究表明，压力下的超导态并没有表现出类似的Hebel-Slichter相干峰行为，这表明笼目超导体CsV₃Sb₅在压力下的超导态可能是一种非常规的超导态。

上述实验发现揭示了笼目超导体中新奇的电子关联效应以及丰富的演生现象，将为理解超导态与竞争电子态之间复杂的相互机制提供一个新的契机，并且也为在笼目超导体中探索新奇超导态提供了一个新的方向，这将有助于推动了该领域理论与实验的进一步研究。



研究进展

中国科大研制出“无序胜有序”合金玻璃燃料电池催化剂



镍-钼-铌合金玻璃催化机理艺术图
(科技传播系黄雯团队设计)

近日，中国科学技术大学高敏锐教授课题组与南京理工大学兰司教授课题组合作，设计并研制了一种用于碱性膜燃料电池阳极氢氧化反应的镍-钼-铌三元合金玻璃催化剂，实现了比肩铂的催化活性和稳定性。相关成果以“Nickel-molybdenum-niobium metallic glass for efficient hydrogen oxidation in hydroxide exchange membrane fuel cells”为题发表在国际著名学术期刊《自然·催化》（Nature Catalysis 2022, 5, 993-1005）上。论文发表后，美国橡树岭国家实验室Alexey Serov博士以“Nickel catalysts for affordable fuel cells”为题在《自然·催化》的“News & views”专栏对其进行详细评述。

在“双碳”背景下，氢燃料电池由于比能量高、零排放等优点，将在未来能源结构中扮演重要角色。质子交换膜燃料电池对铂族催化剂的依赖导致器件成本过高。相比之下，碱性膜燃料电池允许使用非贵金属催化剂、廉价的双极板和隔膜，具有显著的市场优势。然而，碱性膜燃料电池阳极氢气氧化反应（HOR）反应动力学迟缓；同时，非贵金属催化剂在运行条件下结构易变性强。因此，基于非贵金属设计高活性、高抗氧化性的HOR催化剂是碱性膜燃料电池实用化面临的巨大挑战。

鉴于此，研究人员提出了一种新型多元合金玻璃策略，利用熔融纺丝法成功研制了镍-钼-铌三元合金玻璃催化剂。最优化的 $\text{Ni}_{52}\text{Mo}_{13}\text{Nb}_{35}$ 合金玻璃展现了与铂比肩的催化活性；同时，其在氧化电位高达 $0.8 \text{ V}_{\text{RHE}}$ 时仍保持结构稳定，展现了优异的抗氧化特性。另外，与铂族催化剂极易受CO吸附而“中毒休克”相比，该合金玻璃催化剂在含有2% CO杂质气体的氢气燃料中依然表现出很高的HOR催化活性。

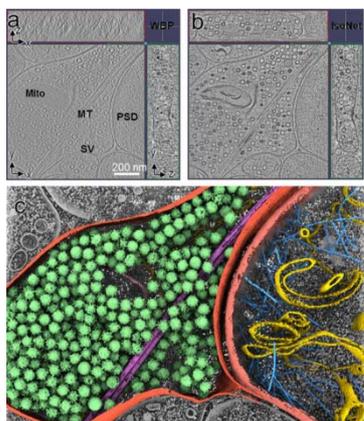
研究人员对 $\text{Ni}_{52}\text{Mo}_{13}\text{Nb}_{35}$ 合金玻璃施加 $0.8 \text{ V}_{\text{RHE}}$ 的高氧化电位，发现其在室温和 45°C 下均能稳定工作。元素分析表明，在超过17小时的反应后， $\text{Ni}_{52}\text{Mo}_{13}\text{Nb}_{35}$ 金属玻璃没有明显的Ni、Mo和Nb元素电化学析出。与之相比，结晶态的 $\text{Ni}_{52}\text{Mo}_{13}\text{Nb}_{35}$ 合金仅在5小时后其Mo元素损失比就高达11%。原位拉曼光谱研究表明，相比于晶态催化剂，合金玻璃即使在 $1.6 \text{ V}_{\text{RHE}}$ 高氧化电位下表面仍没有氧化物物种生成。研究人员推测，熔融纺丝法的快速冷却过程赋予合金玻璃表面优异的化学均一性，抑制可作为“伽伐尼原电池”的晶体缺陷生成，从而阻止催化剂局域电腐蚀的发生。

利用机械球磨，研究人员将 $\text{Ni}_{52}\text{Mo}_{13}\text{Nb}_{35}$ 合金玻璃条带制作成粉末并测试其膜电极组装性能。在氢-氧测试条件下，优化后的燃料电池在 0.65 V 电压下能产生 338 mAcm^{-2} 的电流密度，其峰值功率密度达到 390 mWcm^{-2} 。即使在氢-空条件下， $\text{Ni}_{52}\text{Mo}_{13}\text{Nb}_{35}$ 合金玻璃驱动的燃料电池也表现优异：在 0.65 V 时能够提供 201 mAcm^{-2} 的电流密度，其最大功率密度达到 253 mWcm^{-2} 。以上膜电极组装性能代表了当前非贵金属催化剂驱动的碱性膜氢燃料电池能达到的最佳值。

该论文在第一轮审稿中即受到四位独立审稿人的一致好评：“It is a solid and thorough research work”、“...a huge impact in the field of clean energies,...such a catalyst is very promising for the development of fuel cells...”、“The article is certainly suitable for publication”。

研究进展

冷冻电镜原位成像技术算法取得重要突破



图注：利用IsoNet算法对神经突触cryoET三维重构数据进行处理前、后的效果，以及对IsoNet算法处理后神经突触中超微结构基于真实电子密度的三维可视化渲染

中国科学技术大学、中国科学院深圳先进技术研究院特聘教授毕国强团队，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，相关研究成果以“Isotropic reconstruction for electron tomography with deep learning”为题发表在《Nature communications》。

研究人员搭建了一套迭代优化的自监督深度学习人工神经网络算法，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断层三维重构数据进行缺失信息补全和降噪处理。

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算法将能够实现对细胞中每个蛋白分子的高分辨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。

Fano直线线形的首次实验观测

朱林繁教授课题组和同济大学李文斌教授课题组合作，利用英国的Diamond同步辐射光源，基于薄膜平面腔体系首次在实验上证实了新的Fano线形—直线线形的存在，并揭示了其背后机理：连续通道和分立通道的干涉项完全抵消了原子共振分立态的强度，从而抹除了共振散射信号，实现原子“隐身”。这项研究为X射线谱学探测边前弱结构如四极跃迁提供了新思路。相关成果11月16日以“First Observation of New Flat Line Fano Profile via an X-ray Planar Cavity”为题发表于《Physical Review Letters》上。

Fano公式因其普适性而成为现代物理学最重要的公式之一，它描述了分立态和连续态干涉而产生的复杂线形，并由法诺因子 q 调控。在一般认知中， q 因子是实数，根据 q 的取值，Fano谱线分为对称和非对称峰形。近些年来，在耗散问题研究中揭示出 q 可以取复数。随后理论上预言， q 因子取纯虚数时Fano线形存在直线情形。但是，想要观测到该线形需要在虚部空间大范围调控 q 值，由于缺乏有效的实验手段，直线Fano线形一直没有得到实验证实。

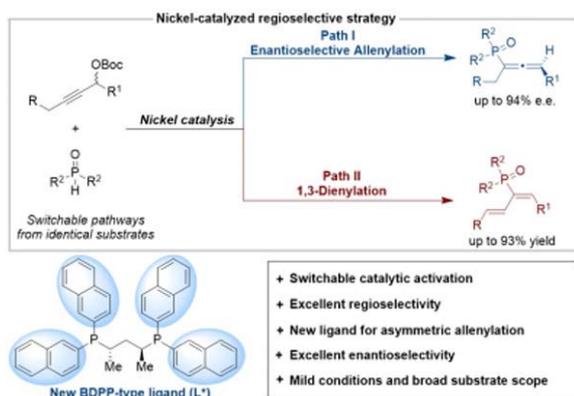
朱林繁教授课题组利用X射线薄膜平面腔，选用W原子 $2p \rightarrow 5d$ 跃迁作为分立通道，与腔本身反射的连续通道发生Fano干涉。调节X射线的掠入射角度至一阶模，并改变薄膜腔的顶层Pt厚度，实现了纯虚数 q 因子的大范围调控。实验中，在顶层Pt厚度1nm时， q 因子取 $-i$ ，此时干涉交叉项精确抵消共振分立项，从而抹除了原子共振跃迁散射信号，在反射方向上只能探测到随能量不变的连续谱，并理论模拟重现了实验观测。通过薄膜平面腔“隐身”特定原子内壳层跃迁，为实验上探测吸收边前弱结构提供了新思路。

审稿人对该工作给予了高度评价：“抑制强跃迁能揭示光谱中的弱特征，对X射线芯壳层谱学十分重要，这项工作会引起广泛的兴趣。”“这些观测结果可为进一步的基础研究创造了条件...”“...发现并确认了包括平坦直线在内的各种线型，这确实是以前实验没实现的，因此这项工作是很重要的。”X射线量子光学是朱林繁教授课题组新开展的研究方向，结合腔效应与硬X-ray波段的内壳层跃迁，这一工作是该课题组实现原子内壳层寿命调控(Phys. Rev. Research 3, 033063(2021))后的另一重要进展。



研究进展

中国科大在手性联烯催化合成领域 取得新进展



图注：镍催化多样性合成叔磷氧化物

联烯化合物由于其独特的结构特征，在合成化学、药物化学和材料科学等领域有着非常广泛的应用，同时作为重要的结构单元广泛用于各类生物活性分子的高效构建。发展高效高选择性的合成方法构建新型手性联烯化合物一直是不对称合成领域的研究热点之一。近日，中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家研究中心郭昌教授研究团队利用镍催化不对称炔丙基取代反应多样性地合成了一系列手性联烯化合物，相关成果分别以“Nickel-catalyzed switchable 1,3-dienylation and enantioselective allenylation of phosphine oxides”和“Nickel-catalyzed asymmetric propargylation for the synthesis of axially chiral 1,3-disubstituted allenes”为题发表在《Nature Communications》和《Journal of the American Chemical Society》上。

该研究团队发展了配体调控实现相同底物的两种不同区域选择性合成策略，实现了外消旋炔丙基碳酸酯的多样性磷酰基化反应，高效合成了一系列叔磷氧化物。作者通过开发新型BDPP配体，实现了镍催化的手性含磷三取代联烯化合物的高对映选择性合成。

此外，该研究团队通过设计开发一系列磺酰肼试剂，应用于镍催化的不对称炔丙基取代/Myers重排串联反应，高立体选择性地实现了1,3-二取代联烯化合物的不对称合成。作者利用该合成方法学实现了methyl (S)-8-hydroxy-5,6-octadienoate, (S)-laballic acid, (S)-phlomi acid和(S)- $\Delta^9,10$ -pentacosadiene等含手性联烯骨架天然产物的全合成。

中国科大在新一代神威超级计算机上 首次实现250万原子超大规模复杂金属 异质结体系的电子结构计算模拟



当地时间11月15日下午，中国科大入围国际戈登·贝尔奖提名的超算应用成果“2.5 Million-Atom Ab Initio Electronic-Structure Simulation of Complex Metallic Heterostructures with DGDFT”，参加了在美国得克萨斯州达拉斯市召开的全球超级计算大会（SC22）的线上答辩，报告了中国科大在新一代神威超级计算机上采用低标度高精度第一性原理计算软件DGDFT首次实现250万原子复杂金属异质结（锂钠金属合金）的超大规模材料模拟，这是中国科大第二次作为第一完成单位入围戈登·贝尔奖提名。戈登·贝尔奖是国际上高性能计算应用领域的最高学术奖项，被誉为“超算领域的诺贝尔奖”，由ACM（美国计算机学会）每年评选和颁发，奖励在高性能计算应用领域具有突出成就的工作，具有巨大的国际影响力。此项成果由合肥微尺度物质科学国家研究中心杨金龙院士课题组胡伟团队与计算机科学与技术学院安虹教授课题组联合攻关，在崂山实验室（原青岛海洋科学与技术试点国家实验室）、中国科学院计算技术研究所、北京大学、中国科学院软件研究所、齐鲁工业大学，以及国家并行计算机工程技术研究中心相关研究人员的紧密配合下完成。

DGDFT的模拟的尺度比目前最先进的高标度DFT-FE软件（采用23 K GPUs模拟11K原子）增加了175倍，模拟原子尺度远超同类软件（比如，目前最流行的VASP只能模拟1K个原子），在保证化学精度的前提下可以模拟250万的金属体系；与此同时，DGDFT具有极快的计算速度，求解时间比DFT-FE快了2054倍。未来，随着超级计算机算力达到10E级，DGDFT软件的高可扩展性可以将模拟的体系进一步提升，可以把第一性原理材料模拟进一步扩展到宏观尺度(>1000nm)，从而实现对真实材料和器件的模拟，为第一性原理材料模拟软硬件一体化的工业应用铺平道路。