



中国科大成功实现最大规模的51比特量子纠缠态制备

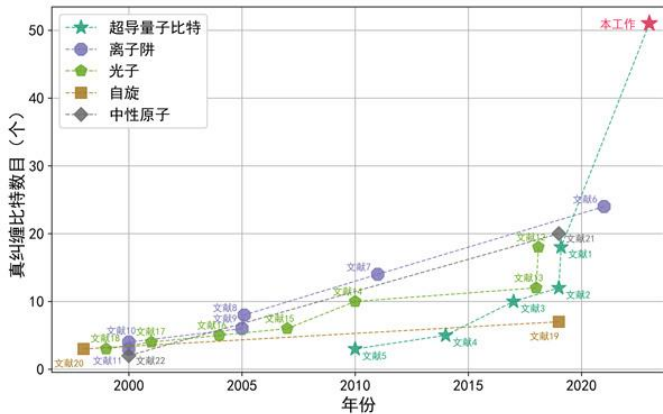


图1 量子真纠缠态比特数目的发展历史。

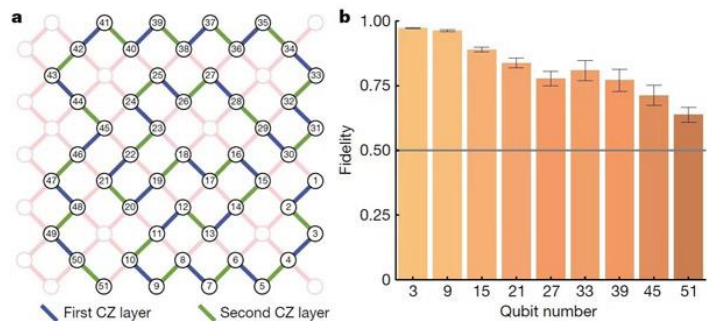


图2 利用“祖冲之二号”完成的51比特一维簇态制备的线路及量子态保真度结果。

中国科学技术大学中国科学院量子信息与量子科技创新研究院潘建伟、朱晓波、彭承志等组成的研究团队与北京大学袁晓合作，成功实现了51个超导量子比特簇态制备和验证，刷新了所有量子系统中真纠缠比特数目的世界纪录，并首次实现了基于测量的变分量子算法的演示。该工作将各个量子系统中真纠缠比特数目的纪录由原先的24个大幅突破至51个，充分展示了超导量子计算体系优异的可扩展性，对于多体量子纠缠研究、大规模量子算法实现以及基于测量的量子计算具有重要意义。相关研究成果于7月12日在线发表在国际学术期刊《自然》杂志上。

量子纠缠是量子力学中最神秘也是最基础的性质之一，同时也是量子信息处理的核心资源，是量子计算加速效应的根本来源之一。多年以来，实现大规模的多量子比特纠缠一直是各国科学家奋力追求的目标。自1998年人们首次利用核磁共振系统实现3比特GHZ态的制备开始，真多体纠缠态的制备成为包括光子、离子阱、NV色心、中性原子及超导量子比特等各种物理系统规模化扩展的重要表征手段。其中，超导量子比特具有规模化拓展的优势，在近年来发展迅速。我国科学家在超导量子比特多体纠缠制备方面取得了一系列重要成果，自2017年起先后完成了10比特、12比特、18比特的真纠缠态制备，不断刷新超导量子计算领域的纠缠比特数目纪录。

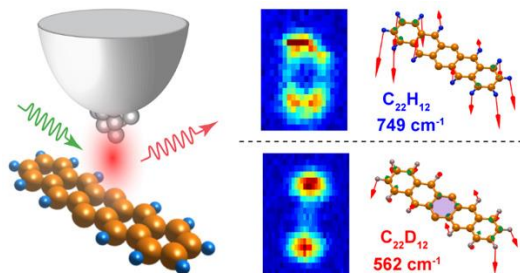
然而，更大规模的真纠缠态制备要求高连通性的量子系统、高保真的多比特量子门操作、以及高效准确的量子态保真度表征手段。高连通性保证了大规模量子态生成的可能性，避免了因缺陷和连通性不足限制量子态规模；通过高保真量子门才能够将量子比特连接起来形成高保真的多体量子纠缠态；而高效的量子态表征是克服随比特数指数级增长的量子态规模复杂度、进行量子态保真度准确估计的重要保证。这些要求对量子系统的性能、操控能力以及验证手段提出了很高的要求，使此前真纠缠比特的规模停留在约20个量子比特的水平。

研究团队在前期构建的“祖冲之二号”超导量子计算原型机的基础上，进一步将并行多比特量子门的保真度提高到99.05%、读取精度提高到95.09%，并结合研究团队所提出的大规模量子态保真度验证判定方案，成功实现了51比特簇态制备和验证。最终51比特一维簇态保真度达到 0.637 ± 0.030 ，超过0.5纠缠判定阈值13个标准差。这一结果将各个量子系统中真纠缠比特数目的纪录由原先的24个大幅突破至51个，充分展示了超导量子计算体系优异的可扩展性。在此基础上，研究团队通过结合基于测量的变分量子本征求解器，开展了对于小规模的非平凡平面码的本征能量的求解，首次实现了基于测量的变分量子算法，为基于测量的量子计算方案走向实用奠定了基础。



研究进展

中国科大在单化学键精度上 揭示了分子内同位素效应



中国科学技术大学单分子团队王兵教授和谭世倬特任教授等利用具有埃米级空间分辨的扫描探针联用技术，在化学键分辨的精度下测量并确定了同位素效应导致分子内各振动模式频率的移动和空间分布特征。这一研究成果于近期发表于《美国化学会志》（J. Am. Chem. Soc. 2023, 145, 13839–13845）。

拉曼光谱在探测分子中化学键振动“指纹”特征有着非常高的灵敏度，是一种常用的具有化学分辨能力的检测技术。分子同位素取代和标记广泛应用于分子的结构识别、化学反应路径和反应动力学过程的研究。但是，多原子分子中复杂的相互作用导致分子化学键振动表现为非谐振行为。同时，传统的拉曼谱学是基于宏量分子的平均测量，对其谱学特征对应的的振动态定量分析带来了极大的困难。该研究团队近期发展了扫描隧道显微镜（STM）、原子力显微镜（AFM）和针尖增强拉曼（TERS）的联用技术，将单分子多内禀参量的测量精度推到了单化学键的极限水平（Science 2021, 371, 818-822），为研究单个分子内部的振动模式的同位素效应的局域测量和定量分析提供了契机。

本项研究中，通过在Ag(110)表面利用针尖操纵技术，制备出单个并五苯分子（ $C_{22}H_{14}$ ）的脱氢衍生物（ $C_{22}H_{12}$ ）及其全氘取代物（ $C_{22}D_{12}$ ）。利用埃米级空间分辨的STM-TERS技术，对 $C_{22}H_{12}$ 和 $C_{22}D_{12}$ 两种分子内对应局域振动模式空间分布的探测，从而实现对不同振动模式的归属及同位素效应的定量分析。TERS成像清楚地展示了单个分子内振动模式的空间分布也会因同位素取代而发生细微的变化。结合理论计算氢和氘原子的同位素效应引起的各种振动模式的势能空间分布，发现了同位素取代不仅会改变分子内本征振动模式的频率，同时引起各种振动模式在实空间分布情况的变化。这项研究工作表明TERS不但可以作为一种具有化学键精度的无损的、高灵敏度的同位素检测和识别方法，同时测量得到的局域振动态的高精度实验数据也为理论分析提供了可靠基准。

中国科大研制白铁矿型 电解水制氢电催化剂

近日，受到在自然界酸性环境中能够稳定存在的白铁矿石的启发，中国科学技术大学高敏锐教授课题组研制了一种用于质子交换膜（PEM）电解池阴极析氢反应的白铁矿型催化剂，其可在 1 A cm^{-2} 的电流密度和 60°C 条件下稳定运行410 h以上。相关成果以“Efficient acidic hydrogen evolution in proton exchange membrane electrolyzers over a sulfur-doped marcasite-type electrocatalyst”为题发表在在国际著名学术期刊《科学·进展》（Science Advances 2023, 9, eadh2885）上。

由可再生电力驱动电解水制备绿氢为实现双碳目标提供了一条极具发展前景的途径。自1789年以来，碱液电解水制氢作为一种成熟的工业制氢技术已经取得了很大的进步，但其低电流密度（高欧姆阻抗）、低能效和低操作压限制了其应用场景。相比之下，依赖于质子传输的PEM电解水制氢技术可以有效克服碱性环境中的问题。然而，PEM电解池的强酸性的工作环境（ $\text{pH}\approx 2$ ）需要使用贵金属催化剂才能保证其长服役性能。设计高活性和高稳定性的非贵金属催化剂将有效降低PEM电解池运行成本。

鉴于此，研究人员利用硫掺杂诱导相结构转变策略，成功的将黄铁矿型二硒化钴（ CoSe_2 ）转化为耐酸的白铁矿型 CoSe_2 。其在酸性条件下展现出优异的析氢性能： 10 mA cm^{-2} 的电流密度仅需67 mV过电压，并稳定运行1000小时。进一步，将该催化剂用作PEM电解池的阴极，其在 1 A cm^{-2} 时仅需要1.79 V的槽压，并稳定运行410小时以上。

研究人员发现催化剂的析氢本征活性随着功函数或者零电荷电势的增大而增加。为了理解其内在机制，研究人员利用红外光谱进行原位测试，发现S掺杂的白铁矿型 CoSe_2 催化剂在施加电位下，其“gap- H_2O ”分子的比例超过黄铁矿型催化剂，这是由于其零电荷电势更接近析氢热力学平衡电位，导致界面电场弱，从而对双电层中的氢键网络的扰动较弱，增强了双电层中氢键网络的连通性，促进了氢在双电层中的传输。

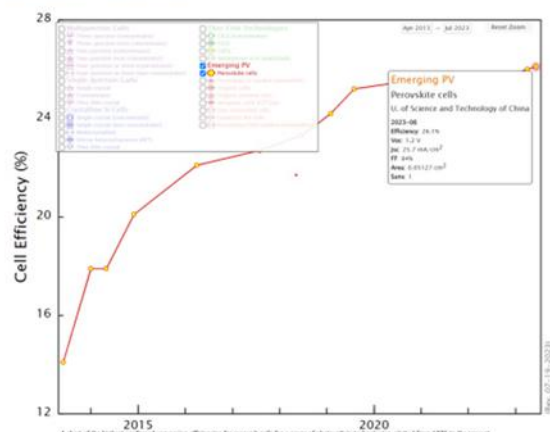
在该工作中，研究人员通过S掺杂策略，成功地实现了黄铁矿型 CoSe_2 向耐酸白铁矿型结构的转变，并展现出优异的析氢活性和稳定性。此外，将该催化剂在实际的PEM电解池中表现优异，展现出广阔的潜在应用前景。研究表明，硫掺杂的催化剂具有更优的稳定性是因为 Co-Se(S) 键更强的共价性。此外，硫元素还能有效调控催化剂的电子结构，增加界面氢键网络的连通性，提升双电层中的氢传输，从而更有利于氢吸附并增强催化性能。



研究进展

中国科大光伏研究成果 创造新的认证世界纪录

Best Research-Cell Efficiencies



日前，中国科学技术大学徐集贤教授团队在钙钛矿太阳能电池方面获得重要进展，创造了钙钛矿电池稳态效率的认证世界纪录26.1%，被美国可再生能源国家实验室NREL的《Best Research-Cell Efficiency Chart》收录，发布于7月18日。NREL Chart具有近50年的历史，是最悠久的光伏世界纪录排行榜，其权威性和荣誉为国际光伏学术界和工业领域所公认，代表了光伏领域的最前沿技术动态。本次收录代表着中国科大在光伏技术研发方面的新突破。

◆中心4位教授获2023年“科学探索奖”

7月17日，第五届“科学探索奖”获奖名单揭晓，我中心4位教授获奖。彭新华教授荣获“数学物理学”奖项；曾杰教授荣获“化学新材料”奖项；石发展教授、张强教授荣获“前沿交叉”奖项。

“科学探索奖”于2018年由腾讯基金会发起人马化腾携手杨振宁、潘建伟、施一公、饶毅等知名科学家共同发起设立。作为一项由新基石科学基金会出资、科学家主导的公益奖项，“科学探索奖”秉承“面向未来、奖励潜力、鼓励探索”的宗旨，鼓励青年科技工作者心无旁骛地探索科学“无人区”。奖项面向基础科学和前沿技术的十个领域，每年遴选不超过50位获奖人，每位获奖人将在5年内获得腾讯基金会总计300万元人民币奖金，并可自由支配奖金的使用。



国家研究中心简讯

◆国际化学动力学会议(ICCK)成功召开

第12届国际化学动力学会议（12th International Conference on Chemical Kinetics, ICCK）于2023年6月26日至6月29日在安徽合肥隆重召开。这是该系列会议首次在亚洲地区举办，由中国科学技术大学主办。本届会议吸引了来自美国、法国、英国、德国、比利时、匈牙利和中国等国家的学者和研究生，共同探讨化学动力学领域的最新进展。



本届会议主题为“Smart Modeling: Big Data and Automated Kinetics”，突出了智能建模、大数据以及自动化动力学在化学动力学研究中的重要作用。化学动力学作为一门典型的交叉学科，涵盖了气相、液相、非均相系统等多个领域，与星际、大气、燃烧、凝聚态和表面等真实环境的复杂反应过程密切相关。因此，此次会议聚焦于研究创新方法和前沿问题，吸引了来自不同基础和应用研究领域的学者齐聚合肥，共同探讨化学动力学领域的挑战和机遇。会议实际注册人数223人，其中线下注册人数183人。参加会议的中国学者包括研究生共172人，外国学者51人，主要来自美国、德国、法国、意大利、比利时等国家。

会议共收到153篇论文投稿，其中77篇被安排为口头报告，76篇则以墙报形式展示。五位大会邀请报告人分别来自美国麻省理工学院的William Green教授、中科院大连化物所的张东辉院士、美国桑迪亚国家实验室的Judit Zádor研究员、复旦大学的徐昕教授和英国伦敦大学学院的Marc-Olivier Coppens教授。对于大会邀请报告，组织者采取了网络直播的形式，进一步拓展了会议的影响力。

此次会议为国际化学动力学研究领域学者们提供了一个深入交流的平台，探讨了实验和理论方面的新方法，同时关注了燃烧、大气、星际、催化等实际应用领域内的新问题。作为ICCK系列会议首次在中国举办的里程碑事件，此次会议的成功举办不仅有助于向国内学者介绍国际化学动力学领域的新挑战、新方法，还将中国的前沿研究进展推向全球，扩大了国内相关研究单位的国际影响力，对于促进化学动力学学科的发展起到了积极的推动作用。