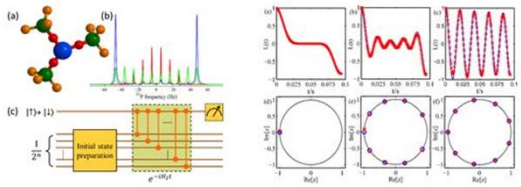
合肥微尺度物质科学国家实验室（筹）
HEFEI NATIONAL LABORATORY FOR PHYSICAL SCIENCES AT THE MICROSCALE
简报
2015年第3期（总第114期）
合肥微尺度物质科学国家实验室（筹）办公室 0551-63600458 hfnloff2@ustc.edu.cn

## 研究进展

### 在量子模拟领域取得重要进展



中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室杜江峰教授团队的彭新华教授等和香港中文大学刘仁保教授的理论研究组合作，在多体系统的量子模拟方面取得重要进展，在国际上首次成功实现了探测虚磁场中李-杨零点的实验。该研究成果作为“编辑推荐（Editors’ Suggestion）”论文发表在近日出版的国际权威物理学期刊《物理评论快报》上( Phys. Rev. Lett. 114, 010601 (2015))，同时被美国物理协会（APS）的“Physics”栏目以“Viewpoint”形式做了专题介绍。

该合作研究团队在核磁共振量子模拟机上成功模拟了9自旋的Ising铁磁模型，首次在实验上直接观测到该系统的李-杨零点，并通过这些零点研究了系统的自由能和相变现象。该实验对于研究隐藏在物理参数复数域内的物理现象提供了一种新的思路和实验实现的可能性。

### 揭示致病菌在表面运动、适应、发展的机制

近日，合肥微尺度物质科学国家实验室金帆教授课题组在绿脓杆菌表面运动和适应性方面取得新的重要突破：他们发现在软表面爬行的绿脓杆菌可利用其菌毛在表面上高速弹射，弹射运动对表面的高速剪切可使表面的有效粘度极大的降低，从而减小细菌在表面爬行时的能量耗散。这种独特的适应机制可以极大的帮助细菌在软表面上的分散和传播，这项发现对于理解绿脓杆菌对器官组织（通常为软表面）造成感染的初始机制具有重大意义。该成果近期以“Bacteria slingshot more on soft surfaces”为题发表于国际重要学术期刊Nature Communications。

金帆课题组主要专注于绿脓杆菌在表面运动、适应、发展的机制研究。近些年，课题组与其在美国加州大学洛杉矶分校的合作者在该领域连续做出了重大突破并在国际上产生广泛影响，其成果已经相继发表在国际顶级期刊上，其中包括：发现了绿脓杆菌在表面上“行走”的运动机制（Science，330，197，2010），发现了绿脓杆菌在表面上“弹射”的运动机制（PNAS，108，12617，2011），发现了绿脓杆菌在表面上对运动轨迹跟随的机制（Nature，497，388，2013）。

### 软凝聚态物理研究取得重要进展：揭示硬球胶体玻璃的本质

中科院软物质化学重点实验室、合肥微尺度物质科学国家实验室和物理系的徐宁教授课题组延续之前对胶体玻璃化转变和Jamming转变关联性的系列研究[Nature 459, 230 (2009)；Soft Matter 9, 2475 (2013)]，揭示了硬球胶体玻璃的本质：与以往我们对固体的认识不同，硬球胶体玻璃是不能承载可严格定义的横向成分声子的固体。该研究成果发表于1月23日的《物理评论快报》[Phys. Rev. Lett. 114, 035502 (2015)]。

该课题组通过计算具有纯排斥相互作用的软球胶体玻璃的动力学结构因子，获得了声音传播的色散关系和衰减因子，进而获得了声子的波长和平均自由程信息。由于结构无序，声子受到强烈散射，当声子的波长与其平均自由程相当的时候，即达到Ioffe-Regel极限的时候，声子的定义将出现问题。高于Ioffe-Regel极限频率的本征振动模式由于波长大于平均自由程而缺乏粒子性将不能被严格定义为声子。该课题组前期的工作表明，软球胶体体系在温度恒定的条件下，随着密度的增大先后经历玻璃化转变和类Jamming转变；在零温极限下即演化成上述的硬球胶体的玻璃化转变和Jamming转变。在这项工作中，他们发现当密度高于类Jamming转变密度时，软球胶体玻璃的横向和纵向Ioffe-Regel极限频率都大于零，因此该密度范围内的胶体玻璃（被称为Glass TL）同时具备可严格定义的横向和纵向成分的声子，属于我们预期的正常的固体。然而，横向和纵向Ioffe-Regel极限频率分别在类Jamming转变和玻璃化转变处降为零，因此，处于两个转变之间的软球胶体玻璃（被称为Glass L）只能承载有效的纵向成分的声子，在零温极限下该区域恰好对应的是硬球玻璃存在的区域。

由于本征振动模式是决定固体系列特性的基础，横向成分的振动不能被严格定义为声子应该是决定以上所述硬球胶体玻璃奇异性的根源。该课题组继而计算了硬球胶体玻璃的弹性模量，发现剪切模量和体积模量之比随着密度的增大而减小，在Jamming转变处降为零。这种密度依赖性与Jamming转变之上的软球胶体玻璃截然相反，而这应该是硬球胶体玻璃特殊本质的体现。

固体中横向成分的振动都不能被严格定义为声子是个令人惊奇的发现，但同时也暗示了用硬球胶体体系来理解原子分子体系的玻璃化转变可能存在着问题。审稿人评价说：“这是一个新的、非常重要的结果。它将导致我们对Jamming和玻璃化转变更加深刻的认识，因此是该领域的一项重要进展”、“该工作新奇、有趣而且激励了在这个方向的进一步研究”。

### “钻石钥匙”开启单分子磁共振研究之门--首次在室温大气环境下探测到单个蛋白质分子磁共振谱

中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室（筹）杜江峰教授领衔的研究团队将量子技术应用于单个蛋白分子研究，在室温大气条件下获得了世界上首张单蛋白质分子的磁共振谱。该成果3月6日发表在《科学》上[Science 347, 1135 (2015)]。同期《科学》“展望”栏目专文报道评价“此工作是通往活体细胞中单蛋白质分子实时成像的里程碑”。

该研究不仅将磁共振技术的研究对象从数十亿个分子推进到单个分子，并且“室温大气”这一宽松的实验环境为该技术未来在生命科学等领域的广泛应用提供了必要条件，使得高分辨率的纳米磁共振成像及诊断成为可能。

该技术有望帮助人们从单分子的更深层次来探索生命和物质科学的机理，对于物理、生物、化学、材料等多个学科领域具有深远的意义。

磁共振技术能够准确、快速和无破坏地获取物质的组成和结构信息，已被广泛应用于基础研究和医学等各大领域。然而当前通用的磁共振谱仪受制于探测方式，其研究对象通常为数十亿个分子，成像分辨率仅为毫米量级，无法观测到单个分子的独特信息。此前的研究显示，基于钻石的新型磁共振技术则能将研究对象推进到单分子，成像分辨率提升至纳米级。但实现这一目标面临诸多挑战，主要是单分子信号太弱难以探测。杜江峰研究团队利用钻石中的氮-空位点缺陷作为量子探针（以下简称“钻石探针”），选取了细胞分裂中的一种重要蛋白为探测对象。首先将蛋白从细胞中分离并将标记物（氮氧自由基）固定在蛋白的特定位置，然后将此蛋白分子放置到钻石表面，此时标记物距离“钻石探针”约10纳米，会产生仅相当于地磁场十六分之一的极微弱的磁信号。“钻石探针”具有感知极弱磁信号的能力，在激光和微波操控下，它形成一个量子传感器，将单分子信号转化为光学信号而加以检测。经过两年多的努力，最终他们成功地在室温大气条件下首次获取了单个蛋白质分子的磁共振谱，并通过对比不同磁场下的多组磁共振谱的特征，获取了此蛋白质分子的动力学性质。

《科学》杂志将该工作选为当期亮点并配以专文报道，盛赞其“实现了一个崇高的目标”，“能够有效克服以往测蛋白分子结构时需要提纯和长成单晶的困难，并且能够实现对单蛋白分子在细胞内的原位检测……，是通往活体细胞中单蛋白质分子实时成像的里程碑”。

此前，杜江峰组已成功探测到金刚石体内两个$^{13}$C原子核自旋，并通过刻画其相互作用强度以原子尺度分辨率解析出了这两个同位素原子的空间取向，向单核自旋磁共振谱学和成像迈出了重要一步 [Nature Physics 10, 21 (2014)]。另外，杜江峰教授通过与德美研究组合作，检测到(5nm)3有机样品中质子信号，取得纳米尺度核磁共振技术的突破性进展[Science 339, 561 (2013)]。同期的《科学》“展望”栏目专文评论为 “基于钻石的纳米磁探针，将磁共振成像的可探测体积到单个蛋白质分子水平”。


合肥微尺度物质科学国家实验室简报