
科学家实现人造原子的轨道杂化

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/31957.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

科学家实现人造原子的轨道杂化。北京时间2025年2月27日凌晨，北京大学物理学院量子材料科学中心孙庆丰课题组与北京师范大学物理与天文学院何林课题组紧密合作，首次在人造原子中实现了轨道杂化。

相关研究成果以Orbital hybridization in graphene-based artificial atoms为题发表在Nature期刊上[1]。

量子点由于受限效应而形成不同轨道的束缚态，这与真实原子的轨道十分相似。因此，量子点也被称作人造原子，被研究人员用来模拟真实原子的特征。

近年来，孙庆丰课题组和何林课题组合作，在受限石墨烯体系取得了一系列重要成果：在双层石墨烯量子点中，通过施加磁场诱导贝里相位连续变化和实现谷自由度的调控[Phys. Rev. Lett. 124, 166801 (2020), Phys. Rev. Lett. 128, 206805 (2022)][2,3]。在单层石墨烯中，通过应力引起的赝磁场和真磁场共同作用实现受限谷态调控[Phys. Rev. Lett. 129, 076802(2022)][4]。通过旋转非对称受限势引起不同角动量态间的散射，并结合贝里相位，实现谷间散射波前位错的单、双调控[Nat. Commun. 15, 3546 (2024)][5]。在单层石墨烯量子点中发现了原子塌缩态和回音壁态的共存[Nat. Commun. 13, 1597 (2022)][6]；更进一步，通过耦合两个量子点，提出和实现原子塌缩态、分子塌缩态、到回音壁态的相互演化[Phys. Rev. Lett. 130, 076202 (2023)][7]；以及连续调控两个量子点间的距离，从而系统地给出分子态特性[Nat. Commun. 15, 8786 (2024)][8]。另外，在单个量子点中通过引入势垒也实现了分子态[ACS Nano 19, 1352 (2025)][9]。

自然界中的物质由原子组成。在原子结合构成物质时，有两个至关重要的过程：一是原子内发生轨道杂化，二是原子间化学键形成。目前，人造原子（即量子点）已经很好地模拟出真实原子间的化学键形成。包括孙庆丰课题组和何林课题组在内，研究人员通过量子点之间的耦合，已经在各种体系的量子点中实现了成键态、反键态等真实键态的对应。然而，原子构成物质的另一个关键过程——轨道杂化却未曾被人造原子模拟出来。

针对这一空白，孙庆丰课题组发展了人造原子中轨道杂化的理论，提出人造原子的各向异性势可以让其能量相近的不同轨道受限态之间发生杂化。他们具体地指出，如果在石墨烯量子点中将圆形势场变形为椭圆形势场，轨道量子数 $m=0$ 的s轨道和轨道量子数 $m=2$ 的d轨道之间将会发生杂化，重新组合成两个新的杂化态。

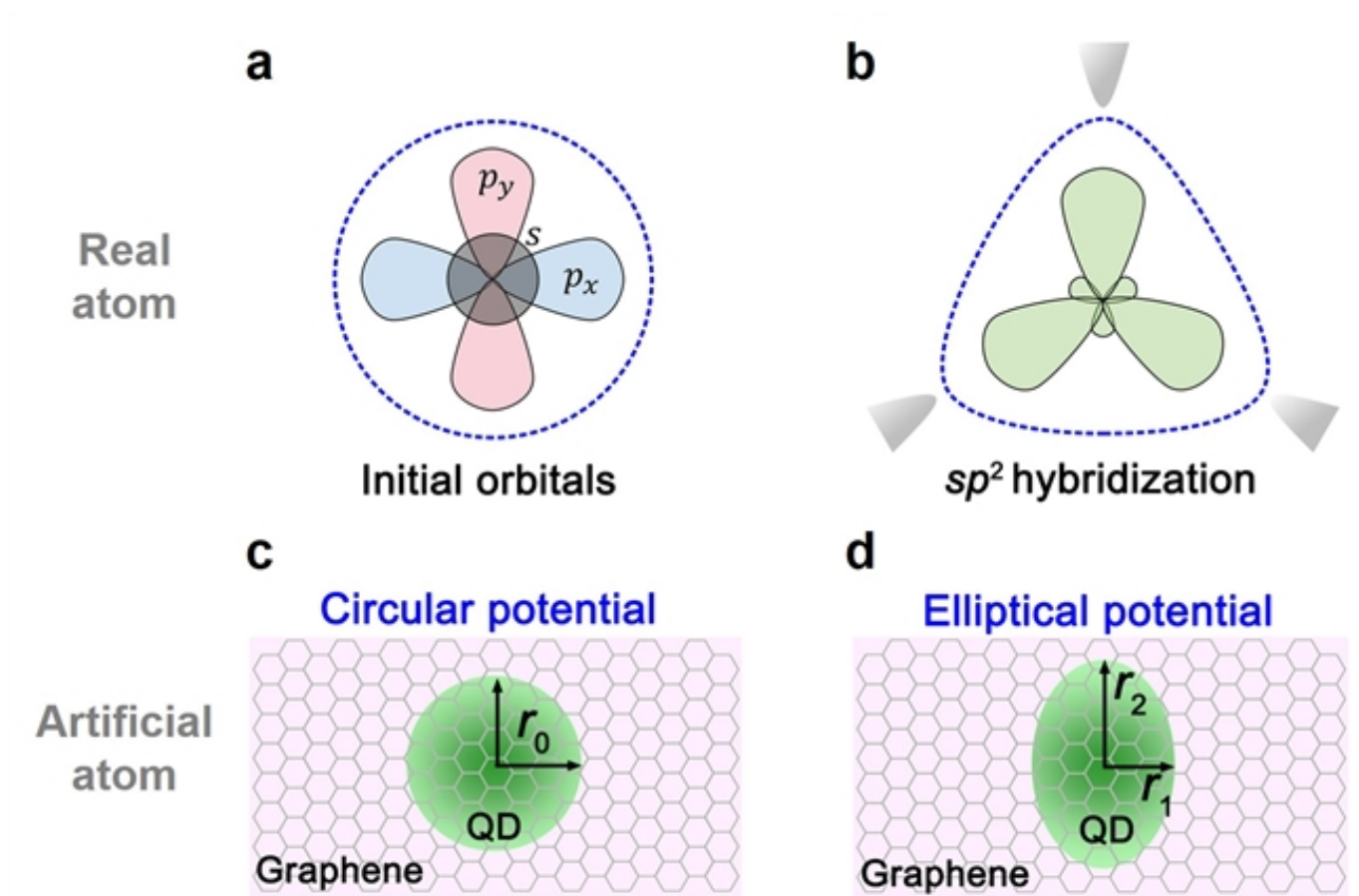


图1：上半部分：真实原子中的（a）未杂化的轨道和（b） sp^2 轨道杂化示意图。下半部分：人造原子中的（c）圆形势场和（d）椭圆形势场示意图。

孙庆丰课题组从解析推导和数值计算两方面得到了杂化态的形状（ θ 形和倒 θ 形）。何林课题组在实验上对各种椭圆形量子点中的受限态进行探测，直接观测到轨道杂化特征。实验和理论相互印证，共同证实了椭圆形石墨烯量子点中确实发生了轨道杂化。这种杂化是原子塌缩态和回音壁态之间的重组，杂化后的态同时包含原子塌缩态和回音壁态的成分。尽管原子塌缩现象是量子电动力学中预测的重要现象，而回音壁效应是声学中的效应，二者被认为有完全不同的物理机理，但是这一工作揭示了两者之间的深刻联系。此外，随着量子点的形变逐渐增强，杂化强度逐渐提高，于是两个杂化态的能量逐渐劈开。这点从实验测量和理论计算方面都得到了证实。

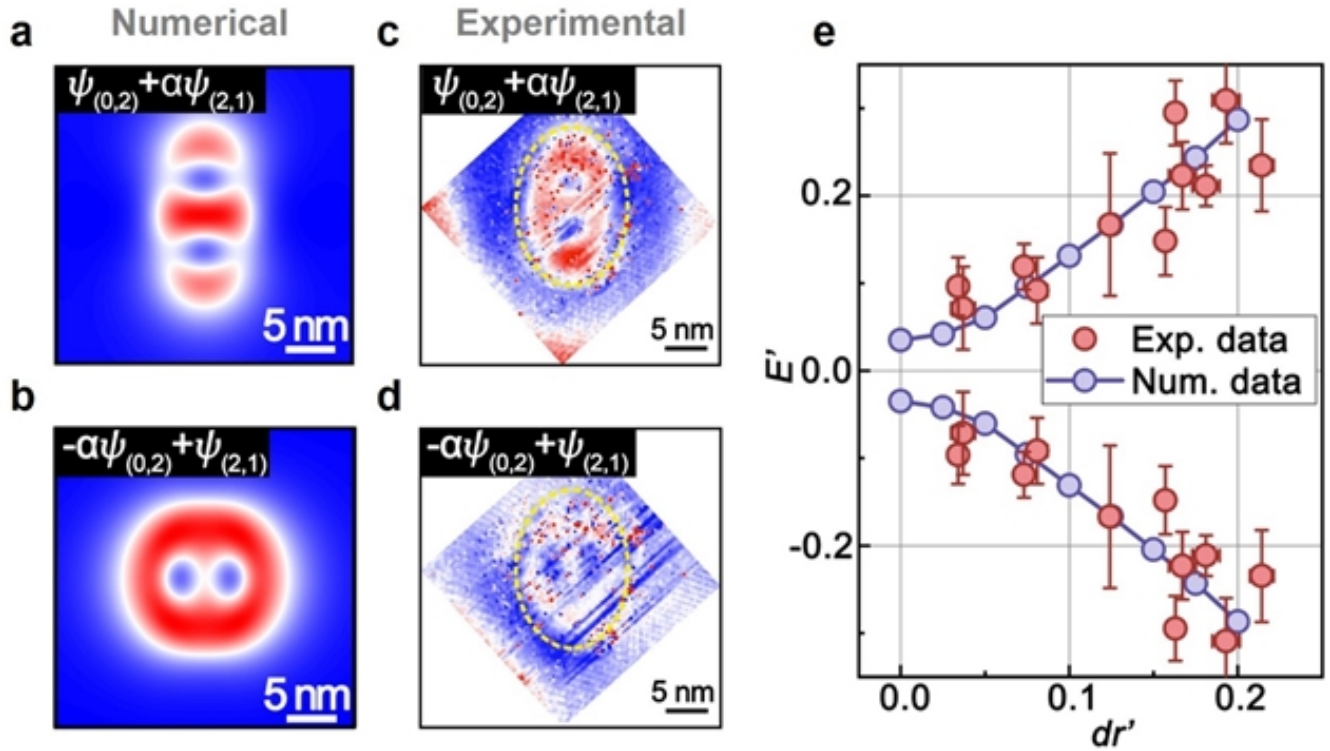


图2：(a,b) 数值计算的杂化态（ θ 形和倒 θ 形）。(c,d) 实验观测到的杂化态。(e) 杂化态随量子点形变增强而发生能量劈裂。

北京大学物理学院量子材料科学中心2020级博士研究生毛岳、北京师范大学博士研究生任慧莹和周啸峰为文章的共同第一作者。北京大学孙庆丰教授、北京师范大学何林教授和北京师范大学博士后任雅宁为文章的共同通讯作者。该工作的合作者还有北京大学博雅博士后庄钰晨、北京师范大学研究生盛浩和肖云浩。该工作得到了国家重点研发计划、国家自然科学基金、中国博士后科学基金会以及北京师范大学的经费支持。

相关论文信息：

- [1]<https://doi.org/10.1038/s41586-025-08620-z>
- [2]<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.124.166801>
- [3]<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.128.206805>
- [4]<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.129.076802>
- [5]<https://doi.org/10.1038/s41467-024-47756-w>
- [6]<https://doi.org/10.1038/s41467-022-29251-2>
- [7]<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.130.076202>
- [8]<https://doi.org/10.1038/s41467-024-52992-1>

[9]<https://doi.org/10.1021/acsnano.4c13885>

作者：孙庆丰等 来源：《自然》

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发