

超材料前沿研究一周精选

2025 年 4 月 14 日-2025 年 4 月 19 日

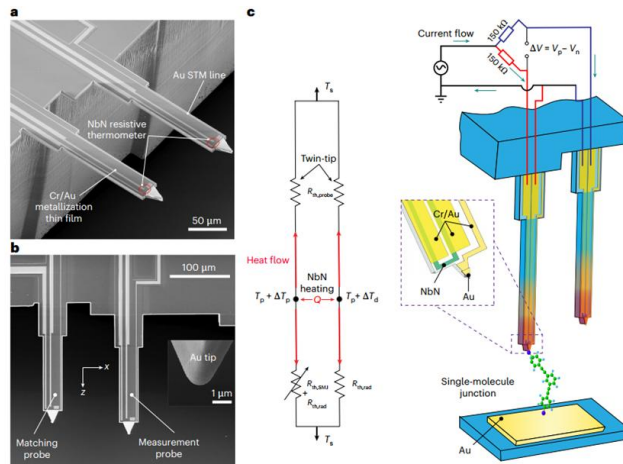
索引:

- 1、单分子结中的声子干涉
- 2、超窄带几何相位共振超表面
- 3、高极性锆钙钛矿氧化物中的巨电卡效应
- 4、SrTiO₃ 中极化密度波的观测
- 5、纤锌矿异质结构中的邻近铁电效应
- 6、利用分子束全息光刻技术直接对复杂三维表面和自对准超晶格进行纳米图案化

1、单分子结中的声子干涉

近年来,波的干涉现象不仅在光学、电学中得到广泛研究,而且在热传导领域也逐渐受到重视。热振动,即声子在材料中的传播,由于具备波动性质,本应展现出相干传输等量子特性,但在实际实验中,由于声子的超短相干长度和传输模式的复杂性,使得室温下的声子干涉效应长期处于未能直接观测的状态。传统的热传导实验方法往往依赖于低温条件或对大尺寸纳米结构的测量,难以捕捉单分子尺度下的微弱热流变化。因此,深入理解单分子体系内的热传输机理,对于设计高效散热、热管理和热电器件等应用具有重要意义。此外,随着先进的热测量技术的发展,基于扫描热显微技术等新型仪器逐渐突破了过去检测极限,使得捕捉单分子热传导中的干涉现象成为可能。正是在这一背景下,学界对如何在环境温度下实现并精确定量单分子热传导及其量子干涉现象展开了长足探索,其成果也为实现分子尺度上的热控提供了新思路和技术基础。

美国科罗拉多大学博尔德分校 Longji Cui 成功实现了室温下单分子结点中声子干涉效应的直接观测。该研究利用定制化的双尖端扫描热显微探针,该探针采用 NbN 薄膜热敏元件设计,具备极高的热灵敏度和机械稳定性,从而能够精确测量单分子级别的热传导功率。研究团队选取了两种结构差异显著的寡苯乙炔分子异构体——para-OPE3 和 meta-OPE3,实验结果显示,meta-OPE3 由于存在破坏性干涉效应,其热导率明显低于 para-OPE3;这种现象与以往关于电荷传输中量子干涉效应的报道一脉相承,但在热传导领域首次得到了实验证实。为进一步揭示背后的物理机制,该团队结合量子力学级分子动力学模拟,并采用了量子力学推导的力场(QM-FF)方法,对单分子接触体系中的声子密度和频率分布进行了定量分析,充分证明了在室温条件下,分子结构中的弯曲构型与压缩动态效应能够诱发明显的声子干涉。此项成果不仅为相干热传输的量子物理基础提供了实验证据,也为未来发展单分子级热控器件、分子热整流器等应用奠定了坚实基础。相关内容发表于《Nature Materials》上。(张琰炯)

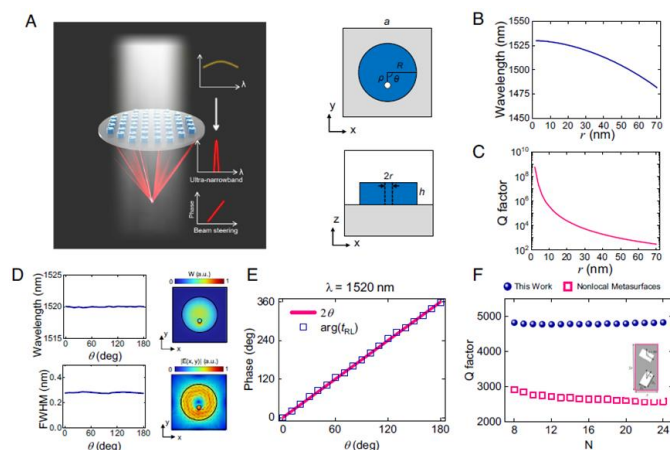


文章链接: <https://doi.org/10.1038/s41563-025-02195-w>

2、超窄带几何相位共振超表面

众所周知，物理系统沿闭合轨迹进行绝热变换时会获得几何相位。这一发现推动了凝聚态物理、量子力学、粒子物理甚至宇宙学的重大进展。几何相位是纳米光子学中波前整形方法的基础，并引发了超表面研究的爆炸式增长。近年来，下一代信息技术对光学信息操作的容量和保密性提出了更高的要求。因此，多维复用成为进一步提高超器件性能的理想方法。该策略在极化、自旋和轨道角动量等多个维度的探索中取得了巨大成功。然而，它在最关键的维度，即工作波长，面临着严峻的挑战。挑战源于一般几何相位的局域视角。在相位梯度超表面中，光场被严格限制在每个超原子内，因此带来了宽带波前变形。窄带操作主要依赖于相邻相互作用，代价是波前的空间操控。尽管非局域超器件不断取得突破，其性能在很大程度上依赖于每个超原子的微调。例如，实验证明，数值孔径（NA）为0.2的非局域超透镜的质量因子（Q）仅为89。这样的Q值适用于增强现实（AR）显示等应用，但严重限制了非局域超表面在主动、非线性和量子应用中的巨大潜力，因为这些应用需要强的光-物质相互作用。到目前为止，同时产生具有像素级变化和超窄带宽的几何相仍然是一项看似不可能完成的任务。

近日，哈尔滨工业大学的宋青海教授和肖淑敏教授、鹏城国家实验室余少华院士、澳大利亚国立大学 Yuri Kivshar 院士团队合作，提出并演示了在谐振超表面中生成超窄带和空间可变几何相位的方法。研究人员发现，一系列受扰动的米氏谐振器能够同时保持其全局对称性和局部变换。局部变换提供像素级几何相位，而全局对称性则产生超窄工作带宽。通过引入额外的扰动来单独定义非谐振波长下的相位，可以将该几何相位很好地固定到谐振模式。因此，研究人员通过实验实现了像素化的相位梯度超表面和超透镜，它们具有破纪录的Q值和高保密性。该方法和演示结果有望开启多路复用超表面和信息加密的范例。相关工作发表在《PNAS》上。（刘帅）

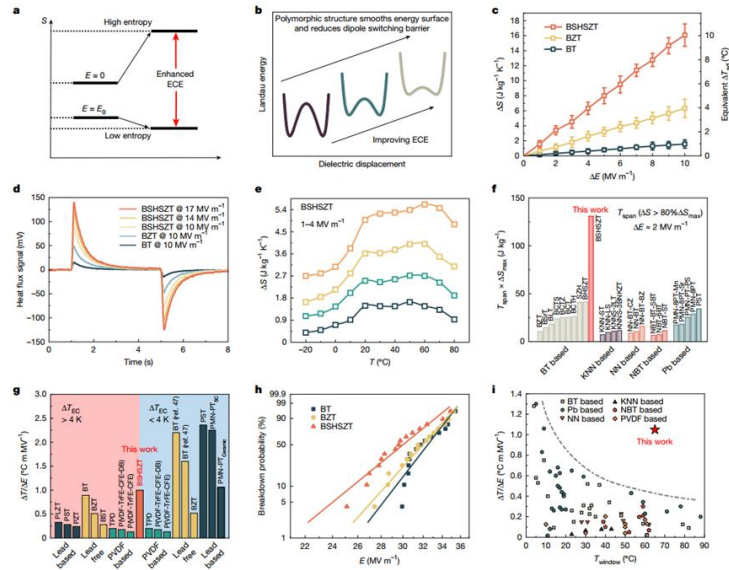


文章链接: <https://pnas.org/doi/10.1073/pnas.2420830122>

3、高极性熵钙钛矿氧化物中的巨电卡效应

近年来, 固态制冷作为一种绿色环保的新兴技术备受瞩目, 其核心在于利用电卡效应 (Electrocaloric Effect, ECE) 实现热能与电能的高效转换, 而钙钛矿铁电材料因其优异的介电响应、高热导率及工艺成熟, 在此领域中占据了重要地位。ECE 原理来源于极化熵的改变, 即在外加电场作用下, 微观极性单元 (如极域、纳米区域、极性团簇及其界面) 在多种取向排列之间发生重新分布, 从而释放或吸收大量热量。传统的有序极性结构虽然稳定, 但在热动力学上往往存在较高能垒, 限制了极化反转的灵活性, 进而影响了 ECE 的性能。为克服这一局限, 近年来学者们提出了一种新思路: 通过多元素替换构建高极性熵材料 (High-Polar-Entropy, HPE), 以在原有钙钛矿结构中引入丰富的局部化学混乱, 既打破了铁电有序排列, 又创造了大量纳米尺度极性团簇和多相共存的局面, 从而显著提升了材料的极化熵和电致热响应。与此同时, ECE 技术的发展也引起了材料科学界对于低电场大 ECE 及其长寿命、高温稳定性等关键指标的高度关注, 这为实现固态制冷器件在便携、局部及可穿戴冷却应用中的广泛应用提供了理论和实践基础。

上海交通大学钱小石教授、澳大利亚伍伦贡大学张树君教授成功设计并制备出一种全新的无铅钙钛矿基铁电陶瓷—— $(\text{Ba}_{0.8}\text{Sr}_{0.2})(\text{Hf}_{0.025}\text{Sn}_{0.025}\text{Zr}_{0.025}\text{Ti}_{0.925})\text{O}_3$ (简称 BSHSZT)。这一材料通过对 A 位与 B 位的精细多元素替换, 有效地打破了传统铁电陶瓷中极性域的长程有序性, 使得极性团簇由原有的数百纳米级别分解为仅 1~5 个晶胞大小的超细颗粒, 并在其内部形成多种共存的局部结构 (包括四方、斜方、菱形及立方等相), 从而大幅提升了体系的极化熵。实验结果显示, 在 10 MV m^{-1} 的电场作用下, BSHSZT 所实现的电致热熵变化高达 $15.0\text{ J kg}^{-1}\text{ K}^{-1}$, 相当于产生约 10 K 的绝热温度变化, 这一效果比未经过元素替换处理的纯 BaTiO_3 提升了 10 倍以上, 同时其 ECE 响应在宽温区间 (超过 60°C) 内均表现出优异的稳定性。此外, 该材料在多层陶瓷电容器 (MLCC) 结构中同样展现出卓越的低电压驱动能力和长期循环稳定性 (1 MHz 循环后性能衰减不足 3%), 充分证明了其在固态电致热制冷器件中的应用潜力。相关内容发表在《Nature》上 (张琰炯)。

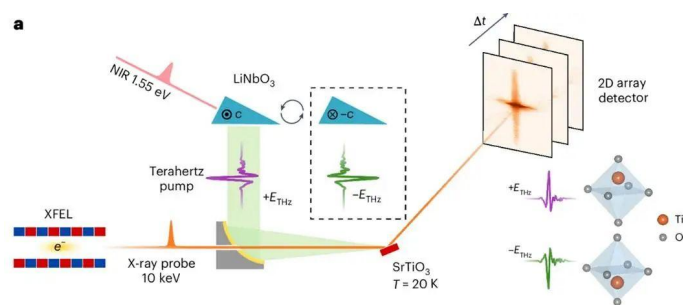


文章链接: <https://doi.org/10.1038/s41586-025-08768-8>

4、SrTiO3 中极化密度波的观测

钛酸锶 (SrTiO₃) 是一种先兆型铁电材料，在冷却过程中表现出介电常数增加和极化模式软化等特征。然而，低温下的量子涨落阻止了长程极化序的形成，使其成为一种典型的量子顺电材料。尽管如此，SrTiO₃ 在低温下表现出铁电极化的介观涨落，并形成极化纳米区域，这对材料的性能有显著影响。SrTiO₃ 在低温下非常接近铁电不稳定性，并已被证明与零波矢处光学极化模式的软化有关。通过应变、钙掺杂、氧同位素掺杂，以及近期报道的超快太赫兹和中红外脉冲激发振动模式等手段，都可以诱导出 SrTiO₃ 的铁电相。然而，一些关于磁化率和中子散射的测量结果引人关注：有限波矢处的极化声学模式会强烈影响低温下的量子顺电区。这些可能表明 SrTiO₃ 中存在另一种与均匀铁电态不同的结构不稳定性，其在纳米尺度上表现出强烈的晶格波动，可能预示着一一种新的空间调制极化相。然而，上述实验无法直接测量 SrTiO₃ 的介观极性特征，只能通过模型间接推断。

近日，美国 SLAC 国家加速器实验室的 Mariano Trigo 首席科学家团队通过飞秒硬 X 射线散射和太赫兹相干控制结合的方法，直接探测了 SrTiO₃ 中纳米尺度上的极性动力学。该工作改变太赫兹场极性，发现了横声 (TA) 和横光 (TO) 声子模式在特定波矢处表现出强烈耦合，这种耦合是导致 TA 模式低温软化的原因。研究者指出，这种耦合可能源于挠曲电效应，即应变梯度与极化的耦合。这种效应在波矢较大的区域尤为显著，进一步支持了极化密度波的存在，极化密度波塑造了 SrTiO₃ 的量子临界行为，并可能促进非常规超导性等新奇物性。该研究展示了通过时间分辨测量和有限波矢探测，可以揭示复杂材料中新奇的纳米尺度不稳定性，为理解和控制复杂材料的新相提供了新的思路。相关内容发表于《Nature Physics》上。（侯玥盈）

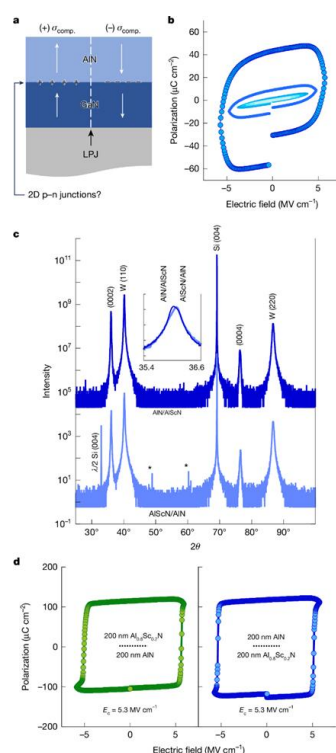


文章链接: <https://doi.org/10.1038/s41567-025-02874-0>

5、纤锌矿异质结构中的邻近铁电效应

邻近铁电性是一种界面关联现象，指非铁电极性材料在相邻铁电材料的耦合作用下，通过电场驱动实现极化反转。本文报道了纤锌矿铁电异质结构中的邻近铁电性。在本研究中，非铁电层为氮化铝 (AlN) 和氧化锌 (ZnO)，而铁电层由 $\text{Al}_{1-x}\text{B}_x\text{N}$ 、 $\text{Al}_{1-x}\text{Sc}_x\text{N}$ 和 $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ 构成。层状结构包含氮化物-氮化物、氧化物-氧化物及氮化物-氧化物堆叠体系，并设计了两层（非对称）与三层（对称）构型。通过多模态表征手段（包括极化滞回曲线、各向异性化学蚀刻、二次谐波产生、压电力显微镜、机电测试，以及扫描透射电子显微镜的实空间原子级极化取向成像），研究团队验证了两类材料层的铁电翻转行为，提出一种物理翻转模型：反极化核首先在铁电层内形成，并向内部非铁电界面传播。畴壁前缘产生的弹性场与电场会跨越邻近界面，从而降低非铁电层的翻转势垒，使得畴结构能够完整传播而不引发击穿。密度泛函理论对多晶型能量、翻转势垒及畴壁能量的计算结果支持该模型。邻近铁电性实现了纤锌矿材料的极化反转，避免了元素替代伴随的化学/结构无序性，为基于界面工程的铁电性研究开辟了新的科学问题与技术机遇。

近期，美国宾夕法尼亚州立大学 Jon-Paul Maria 研究团队揭示了一种新的界面现象，首次揭示了纤锌矿异质结构中的邻近铁电效应。研究团队提出：邻近铁电性源于铁电层中畴壁前缘局域动态接近铁电/非铁电界面时产生的弹性场与电场。当这些场抵达内部界面时，它们可协同调控多晶型体的相对稳定性，并将矫顽场强度降至击穿阈值以下——其作用机制类似于取代阳离子引发的局域改性效应，从而触发极化翻转。相关研究成果以“Proximity ferroelectricity in wurtzite heterostructures”为题发表在《Nature》上。（郑佳慧）



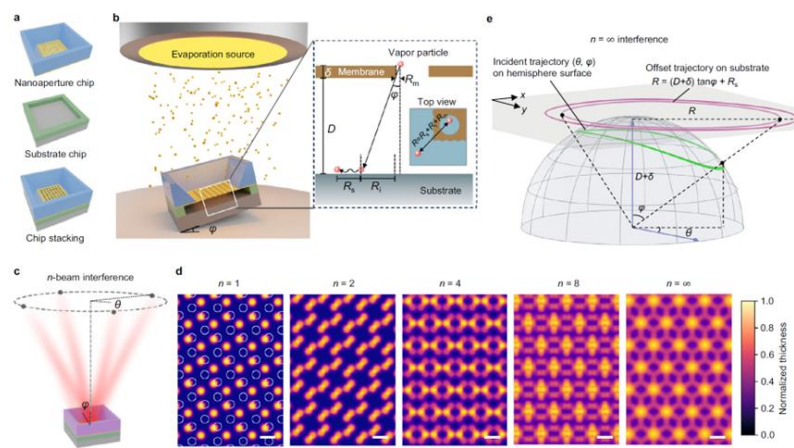
文章链接: [10.1038/s41586-024-08295-y](https://doi.org/10.1038/s41586-024-08295-y)

6、利用分子束全息光刻技术直接对复杂三维表面和自对准超晶格进行纳米图案化

材料纳米技术的发展很大程度上受到纳米图案化技术进步的推动，纳米图案化技术催生了用于电子、光学、生物工程和传感应用的复杂三维纳米结构的制造。现有的纳米图案化技术大多依赖于抗蚀剂或模具模板，通过一系列材料沉积/蚀刻和溶剂处理将图案转移到底层材料上。除了工艺复杂性之外，一个核心问题是有机残留物以及材料与工艺中涉及的各种溶剂的相容性。为此，人们探索了直接材料写入方法，包括纳米模板光刻(NSL)、阳极氧化铝(AAO)模板、纳米转印和带电气溶胶喷射。虽然NSL可以实现高横向分辨率，对于诸如点阵等简单图案，临界尺寸(CD)可低至50纳米以下，但它难以处理复杂图案，例如互补或负色调点阵。此外，在写入多种材料图案时，套刻精度依赖于不同纳米模板的微机械对准，这通常会导致横向分辨率不匹配。AAO模板技术与NSL基本具有相同的局限性。另一方面，纳米转移打印和带电气溶胶喷射技术对加工条件要求较高，因此只能在相对有限的材料选择下进行操作。

近日，苏黎世联邦理工学院的Chih-Jen Shih教授，探索了一种基于分子束莫尔干涉的概念，用于直接对由任何可蒸发材料（例如金属、氧化物和有机半导体）制成的复杂三维表面进行图案化。作者提出的方法称为分子束全息光刻(MBHL)，它依赖于对穿过叠加在基底上的纳米孔径的材料通量的角度投影进行精确控制，模拟干涉光刻中相干激光束的干涉。结合计算光刻(CL)算法，已演示了多种材料图案的自对准叠加，从而产生二元至五元超晶格，其临界尺寸和叠加精度分别约为50纳米和2纳米。该工艺有望大幅拓展材料组合的边界，从而实现在任意基底上高通量制造平移对称复杂超结构，从而实现新兴的纳米成像、传感、催化和

光电器件。相关工作发表在《Nature Communications》上。（刘帅）



文章链接: <https://doi.org/10.1038/s41467-025-58651-3>

（来源：两江科技评论）