新成果为定向设计量子材料提供全新思路

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/38961.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！

新成果为定向设计量子材料提供全新思路。近日，宁波东方理工大学理学部物理学院讲席教授魏苏淮团队联合合作者，首次建立了金刚石色心零声子线波长的化学设计规则，并据此预测出一种具有本征通信波段发光的新型色心单光子源。

这一成果为定向设计量子材料提供了全新思路。日前，相关论文发表于国际顶级期刊《美国化学会志》。

据介绍，量子网络依赖单光子传输信息。若单光子源能直接工作在通信波段，就能天然兼容现有光纤基础设施，大幅降低传输损耗。然而，自然界中理想的单光子源——金刚石色心，其零声子线大多位于可见光或近红外区域。实验上虽可通过量子频率转换技术迁就通信需求，但系统复杂、效率损失等问题也随之而来。因此，直接设计通信波段的新型色心单光子源，成为该领域亟待突破的关键科学问题。

研究中，魏苏淮团队将目光锁定在金刚石中一类具有反演对称性的空位-杂质-空位（V-I-V）色心体系上。这类色心天然抑制谱线漂移，具备窄线宽、高相干性的先天优势，是理想单光子发射器的候选者。

研究团队结合第一性原理计算与群论分析，揭示了这类色心发光波长的调控机制。

其一，杂质原子的原子尺寸与轨道能级，共同决定了成键态与反键态之间的能级差，即零声子线的波长。

其二，对于满占据d轨道的较重元素，杂化和应变效应会增大能级分裂，产生更短波长发光。而对于缺少d轨道的较轻元素，则更容易实现长波长发光。

这一规则将色心发光波长与杂质原子的微观属性直接关联起来，实现了从经验筛选到定向设计的根本转变。通信波段新信使现身基于上述设计规则，研究团队确定了一个极具潜力的通信波段色心单光子源——负三价V-Mg-V色心（MgV3-）。

计算显示，该色心的零声子线位于1448纳米，完美覆盖通信波段。更令人振奋的是，它具有极弱的电子-声子耦合，其Huang-Rhys因子仅为0.0607，对应Debye-Waller因子高达94.1%。这意味着其绝大部分发光都集中在零声子线通道，具备优异的光学相干性和高质量单光子发射潜力。

这项研究首次将杂质原子的原子尺寸、轨道能级与色心光学跃迁波长直接关联起来，为通信波段

发光色心的定向设计，提供了明确的理论依据。第一作者邱晨表示。这一成果不仅揭示了金刚石色心零声子线的微观起源，其建立的理论方法和设计思路还可推广至其他宽禁带材料与固态缺陷体系，为新型量子发光材料的发现和优化提供了普适方法，有望加速固态量子器件走向实用化的进程。（来源：中国科学报 陈彬）

相关论文信息：https://doi.org/10.1021/jacs.6c02983

作者：魏苏淮等 来源：《美国化学会志》

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转发