科学家用新预测框架加速量子材料搜索

美国 Interesting Engineering 网站　2026/08/25

关键词：

来源：美国 Interesting Engineering 网站

发布时间：2026/08/25

原文链接：https://interestingengineering.com/science/quantum-materials-search-prediction-framework

大阪大学的科学家开发了一种新的预测框架，能够准确评估一种材料是否具有量子特性，而无需执行复杂且耗时的模拟。该第一性原理框架适用于不同类型的材料且不失准确性，从而极大地加速了新量子材料的探索进程。

迈向量子时代

科学与技术的进步正引领我们走向一个量子时代，科学家可以利用纠缠和叠加等特性来实现经典物理学甚至无法解释的功能。我们已经看到了这些技术在量子传感、通信甚至计算领域的应用，但对于这些技术，我们仅仅触及了皮毛。

要迎来一个全面的量子时代，我们仍需探索和发现能够展现这些量子特性并可用于此类应用的新材料。然而，寻找此类量子材料的进展一直极其缓慢。通常，这涉及评估材料是否展现量子特征并发射量子光，而这需要计算密集型的模拟。

大阪大学的研究人员运用第一性原理思维，避开了这些高强度的计算，并开发了一个新框架来识别量子材料。

研究色心

在量子技术的许多研究中，科学家会借助色心——即吸收特定波长光并呈现出鲜艳颜色的晶体缺陷。通常，晶体的中心存在一个缺陷，例如缺失的离子，该空位要么被未配对电子填充，要么协同作用以展示这些颜色模式。

这些晶体正变得相对容易制造，并可应用于各种量子领域。它们之所以重要，是因为它们能够保存量子信息，同时仍能发射单个光子。科学家一直难以验证其效率，因为这需要复杂的计算来确定有多少能量损失于晶体内部的振动，而不是以光的形式发射出去。

这些计算既复杂又密集，速度缓慢，对量子材料发现的步伐产生了更大的影响。这就是为什么研究团队决定摒弃复杂的计算，代之以一个更简单、更快速的框架。

紧凑的理论公式

为了取代以前的方法，研究人员开发了一个紧凑的理论公式，可以计算由非辐射过程引起的复杂光学损耗，并引入了一个有效的近似方法。

该近似方法仍然确保结果与常规方法一致，但消除了对大量计算的需求。为了证明他们的方法有效，研究人员使用了碳化硅，成功识别了几个有前景的自旋量子比特候选者，同时也识别出了传统方法已经发现的发射器。

"由于这种预测方法与主体材料无关，它可以用于高效评估各种半导体中的色心，"参与该研究的大阪大学研究员岩本壮介（Sosuke Iwamoto）在新闻稿中解释道。"它也适用于覆盖从紫外线到电信波长的广泛光谱范围的发射器。"

使用一个简单框架来识别明亮、高效的量子发射器，同时考虑光发射和光学损耗，有望迅速推进新量子材料的发现。

该研究成果已发表在《npj Computational Materials》期刊上。