

中国科学院物理研究所 SF10组供稿
北京凝聚态物理国家研究中心

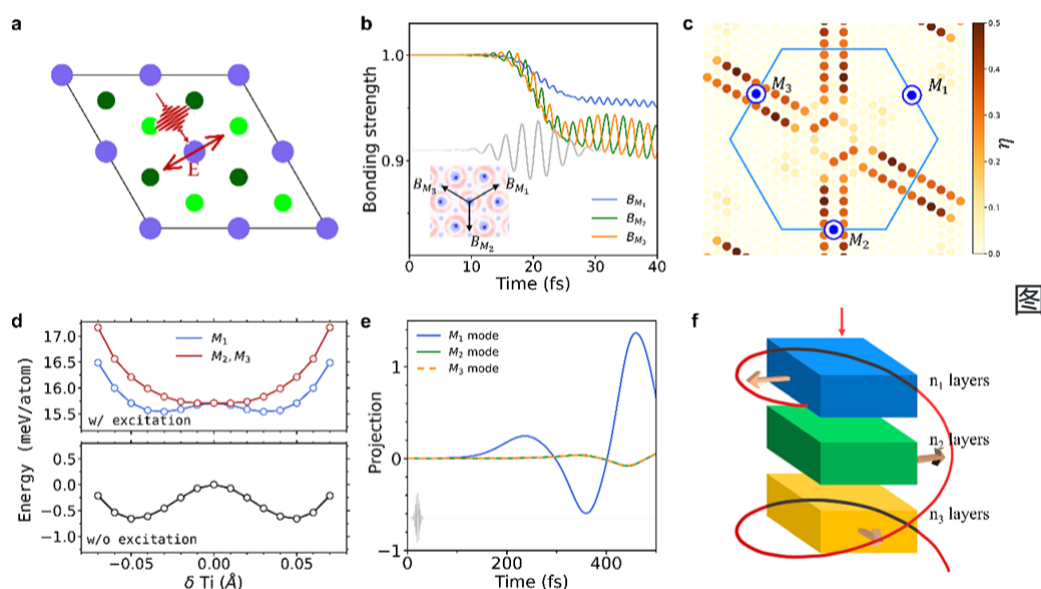
第119期

2023年11月25日

TiSe₂中的隐藏手性电荷密度波

在电荷密度波材料中，电子密度的重新调制以及伴随的晶格畸变往往会破坏材料原本的对称性，进而导致多种自由度的对称性破缺以及演生相的产生。获得广泛研究的电荷密度波材料1T-TiSe₂，在无手性晶格中表现出螺旋电子序，为人们在凝聚态中研究手性这一自然界常见的对称性破缺提供了独特的研究平台。然而，前期研究对形成手性电荷密度波的微观机制仍未有定论。

最近，中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家研究中心表面物理国家重点实验室SF10组博士生聂正蔚、陈大强在王亚嫻副研究员、孟胜研究员的指导下，利用组内开发的非绝热含时密度泛函分子动力学方法和软件（TDAP），研究了1T-TiSe₂中光诱导的亚稳态电荷密度波相变机制（图1），揭示了光与材料之间的手性传递行为。



1. (a)线偏振光诱导的瞬态(b-d)电子序响应和(e)晶格序响应，(f)圆偏振光诱导的螺旋序示意图

研究表明，晶格沿布里渊区边界M点的光学声子畸变模式构成了1T-TiSe₂的亚稳相，这三支等效的向列相叠加态构成了多被观测的能量最低模式（triple-*q* mode）。然而，线偏光可以打破三支声子的对称性，诱导出单一M点声子模式主导的single-*q*模式（图2）。进一步地，利用single-*q*模式层之间的堆垛，作者提出了手性电荷密度波的模式结构。这种结构可以利用圆偏振光激发并稳定（图3）。最后，作者强调了手性在“光-电子-晶格”自由度之间的转移和调控机制，并给出了可实验观测的判据（图4），希望启发未来的手性相变实验探索。

相关成果以“Unraveling Hidden Charge Density Wave Phases in 1T-TiSe₂”为题发表在Phys. Rev. Lett. 131, 196401 (2023)。该研究得到了科技部重点研发计划、国家自然科学基金委项目、中国科学院的资助。

文章链接：<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.131.196401>

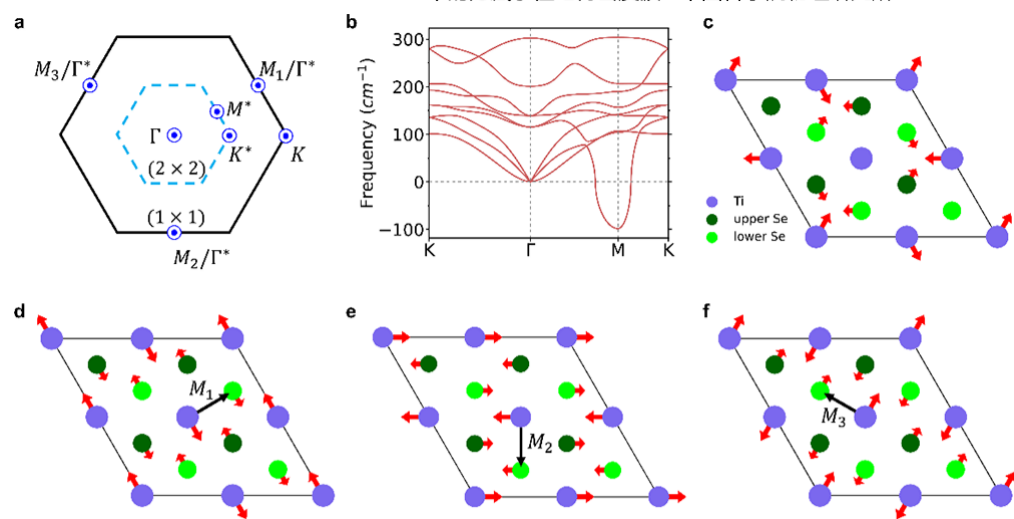
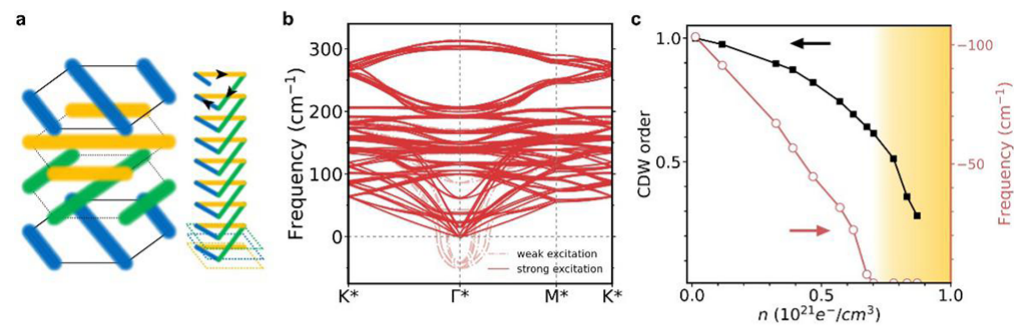
图2. 1T-TiSe₂(a)第一布里渊区高对称点, (b)声子谱及(c)triple-*q*和(d-f)single-*q*模式

图3. (a)手性模型的(b)激发态热力学稳定性及(c)激发态电荷密度波序/稳定性分析

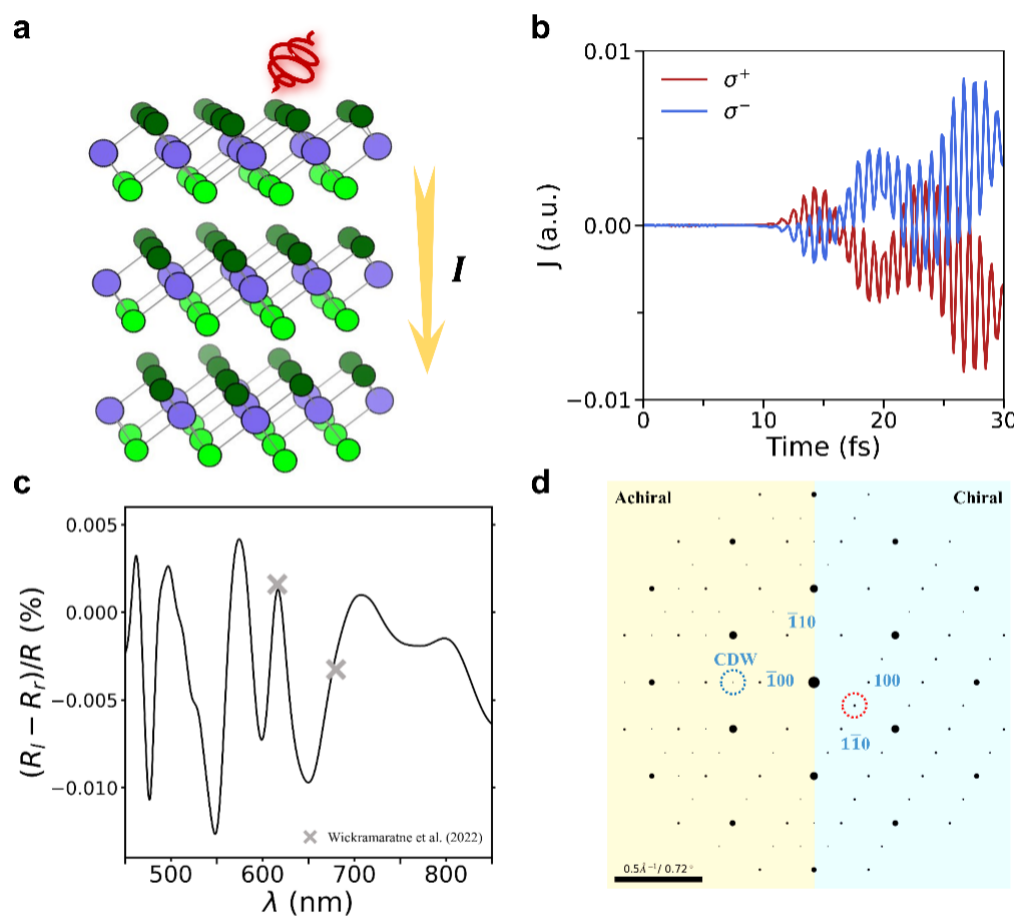


图4. 手性模型的(a-b)圆偏光电流(c)圆二色谱及(d)电子衍射图样模拟

[PhysRevLett.131.196401.pdf](#)

电子所刊 公开课 微信 联系我们 友情链接 所长信箱 违纪违法举报



中国科学院
CHINESE ACADEMY OF SCIENCES