



## 奚啸翔课题组在二维电荷密度波形成机理方面取得新进展

南京大学物理学院奚啸翔教授课题组与东京大学物理学家M. Saeed Bahramy合作, 对一系列过渡金属硫属化合物中电荷密度波的形成机理提出了新的理解。研究成果以"Patterns and driving forces of dimensionality-dependent charge density waves in 2H-type transition metal dichalcogenides"为题, 2020年5月15日发表于《自然-通讯》(Nature Communications 11, 2406 (2020), <https://doi.org/10.1038/s41467-020-15715-w>)。

固体材料往往在低温下发生相变, 产生全新的物理性质。电荷密度波是金属材料在低温下发生相变后的一种可能的基态, 导致原本均匀分布的电荷密度在实空间发生周期性波动, 并且伴随着晶格畸变。这种有趣的现象在低维金属材料中十分普遍。人们对一维条件下电荷密度波的形成原因已经有了比较清楚的认识。二维或准二维电荷密度波材料更为丰富, 但关于其形成机理却始终存在着不同的观点。此外, 在不少材料中电荷密度波与超导存在着微妙的关联。这些原因使电荷密度波成为凝聚态物理中备受关注的一个研究方向。

近年来, 随着二维材料的兴起, 各种二维电荷密度波材料也不断被发现。理论上, 这将带来相比三维情形更为简单的费米面, 简化对电荷密度波形成机理的探讨。然而, 人们却发现维度的降低使实验现象变得更为纷繁复杂。降维使电荷密度波在某些材料中被削弱、甚至消失, 而在另一些材料中却显著增强。取决于样品的制备和表征方法, 即使对于同一材料体系, 实验往往产生不同的结论。如何排除外在因素的干扰、阐明维度在这类相变中的本征效应, 是该领域的一个亟待解决的问题。

### 最近更新

- 刘金源教授领衔的著作《近代英国劳资冲...  
2021.01.07
- 一个单细胞取样及小RNA检测的集成式单...  
2021.01.07
- 我校128项成果获江苏省第十六届哲学社...  
2021.01.07
- 工管院分党校举办“当好新时代党支部书...  
2021.01.07
- 我校召开鼓楼校区提升规划暨苏浙运动场...  
2021.01.06
- 我校获南京市“2020年创新名城突出贡献...  
2021.01.06
- 我校召开公共卫生工作领导小组会议 部署...  
2021.01.06
- 南京大学徐永兵、阮学忠、张荣团队在光...  
2021.01.06
- 大气科学学院周晨副教授等揭示了气候反...  
2021.01.06
- 图说 | 2019-2020学年度南大本科国家奖...  
2021.01.05

### 一周热点

- 我校举行教职工迎新健身走活动
- 安邦书院举办迎新年师生座谈会
- 吕建校长为2020级新生上思政课
- 南京大学徐永兵、阮学忠、张荣团队在光...
- 校领导元旦前夕赴浦口校区慰问金陵学院...

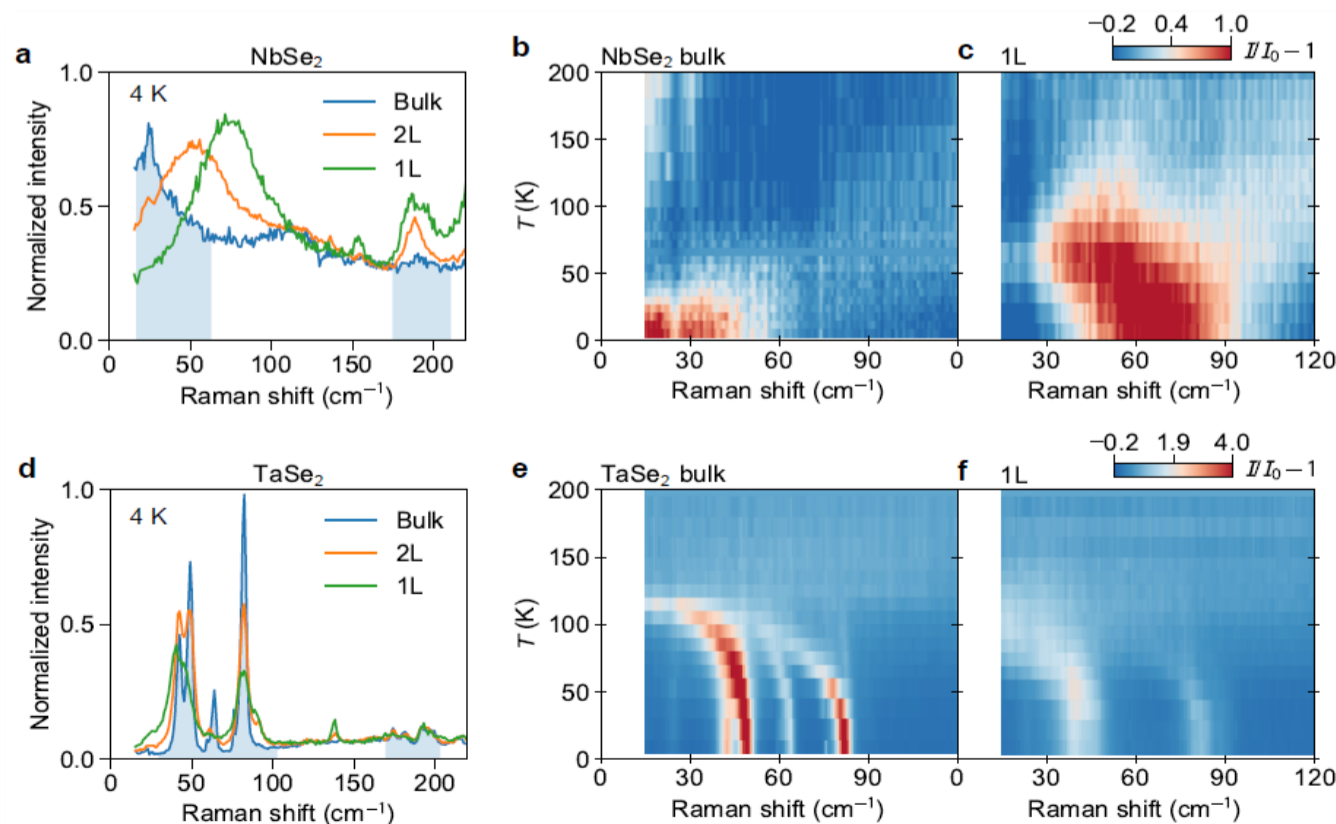


图1. (a-c) NbSe<sub>2</sub> 中电荷密度波的拉曼特征和变温拉曼二维强度图。(d-f) TaSe<sub>2</sub> 的相应数据

有鉴于此，奚啸翔教授课题组围绕一系列经典电荷密度波材料，开展了一项系统的对比式研究。实验利用机械剥离法，获得了2H构型过渡金属硫属化合物NbS<sub>2</sub>、NbSe<sub>2</sub>、TaS<sub>2</sub>和TaSe<sub>2</sub>从块体到单层的各种样品。通过在惰性气体环境中进行样品准备和封装，避免了氧化等外在因素对样品质量的影响。利用拉曼散射对电荷密度波的特征进行鉴别，并通过其温度依赖确定相变的临界温度（见图1）。这四种材料虽然晶体结构相同、电子能带结构相似，本实验发现它们的电荷密度波性质却迥然不同：NbSe<sub>2</sub>的临界温度随着样品减薄而显著增强，TaS<sub>2</sub>和TaSe<sub>2</sub>表现出相反的维度依赖，而NbS<sub>2</sub>从块体到单层始终没有发生相变（见图2a）。

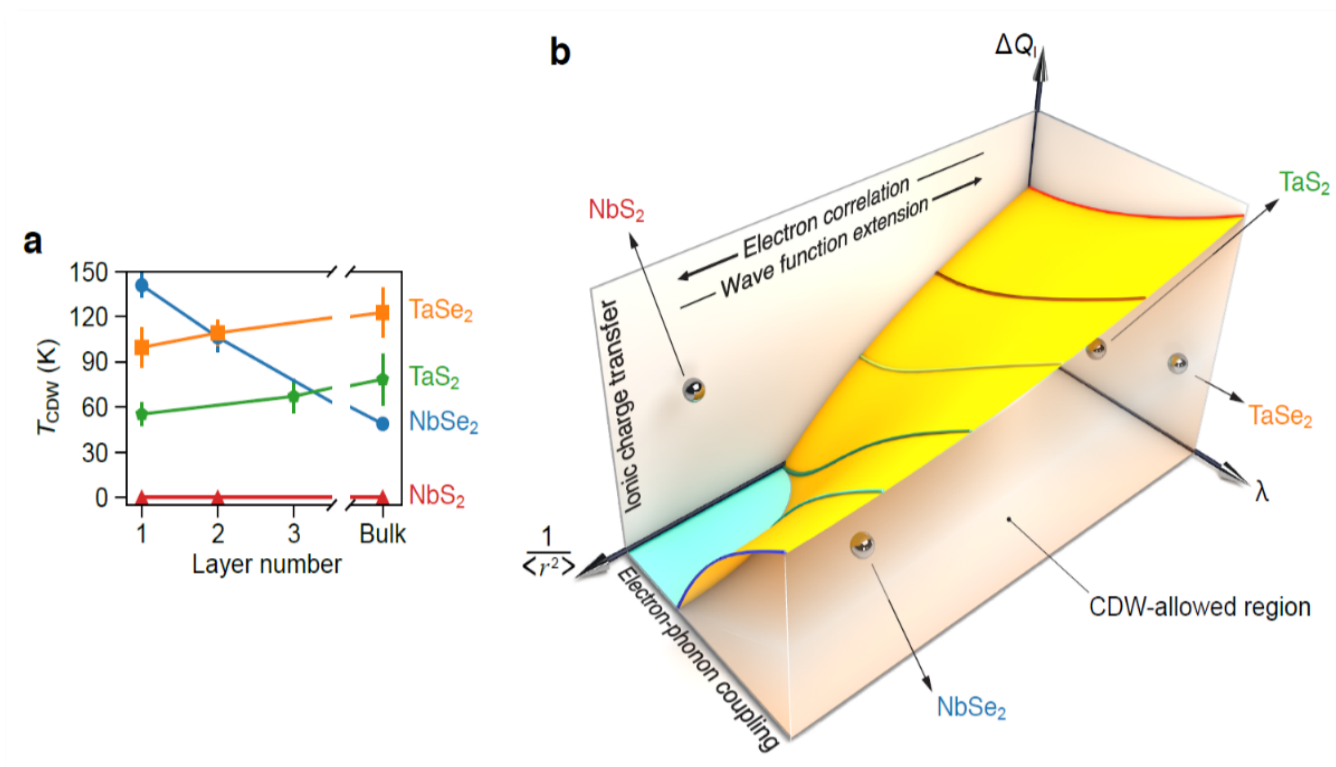


图2. (a) 2H型过渡金属硫属化合物的电荷密度波临界温度-厚度相图。(b) 二维电荷密度波形成机理示意图

奚啸翔课题组进一步与东京大学理论物理学家M. Saeed Bahramy合作，基于实验结果，并结合第一性原理计算，通过离子型电荷转移、电子关联强度和电子-声子耦合三者的相互作用，对二维电荷密度波的形成机理给出了一项可能的统一解释。结果可归纳为图2b中的示意相图。三个坐标轴代表了上述三种因素。这项研究特别指出了化学键的强弱对电荷密度波的显著影响。硫原子具有较强的电负性，导致NbS<sub>2</sub>中形成较稳定的离子键，使得晶格畸变难以发生，因此电荷密度波在这一材料中无法形成。电子波函数在实空间的延展可弱化离子键。这就使得TaS<sub>2</sub>即使也含有硫原子，电荷密度波仍然可能形成。实验中所观察到的维度依赖，可以根据这一思路进行合理解释。该工作对阐明二维电荷密度波的形成机理具有重要意义，也指明了提升这一类相变临界温度的关键因素，为推进基于该类二维材料的应用奠定了基础。

南京大学物理学院博士生林东景为论文第一作者，奚啸翔与东京大学M. Saeed Bahramy为共同通讯作者。南京大学温锦生课题组、瑞士洛桑联邦理工学院Helmuth Berger和Laszlo Forro组、北京大学贾爽组以及日本国立材料研究所Takashi Taniguchi和Kenji Watanabe组提供了高质量单晶样品。该工作得到了科技部重点研发计划、国家自然科学基金和江苏省自然科学基金的支持。

分享：



