

唯实 拓新 求真 协力

[首页](#) | [所况介绍](#) | [科研机构](#) | [职能部门](#) | [科研成果](#) | [人才队伍](#) | [党群文化](#) | [国际合作](#) | [院地合作](#) | [研究生世界](#) | [公共资源](#) | [内部信息](#)

## 新闻中心

[头条新闻](#)[科研进展](#)[工作动态](#)[媒体视角](#)

您现在的位置：首页 &gt; 新闻中心 &gt; 科研进展

固体所在二维电荷密度波材料1T-TaS<sub>2</sub>研究方面取得新进展

发布日期：2017-10-18

作者：虞祥龙

【打印】
 【小中大】
 【关闭】

近期，固体所邹良剑研究员课题组与北京计算中心林海青、常凯研究员合作，通过对二维电荷密度波材料1T-TaS<sub>2</sub>体系中的块体材料、单层体系、高温正常相和低温电荷密度波相进行系统性的研究，发现电子关联和轨道密度波对于低温相的形成起到重要作用。相关研究结果最近发表在《物理评论B》(Physical Review B 96, 125138 (2017))上。

实验研究表明1T-TaS<sub>2</sub>具有丰富的相变过程，随着温度的降低，它会经过非公度电荷密度波、准公度电荷密度波和公度电荷密度波三次相变，而且在最后一次相变之后，体系会从金属转变为绝缘体。虽然这一材料已经被研究了30多年，但到目前为止其低温相变机制仍无统一论。

为了探索1T-TaS<sub>2</sub>的低温相变机制，固体所研究人员利用密度泛函理论和动力学平均场理论对二维电荷密度波材料1T-TaS<sub>2</sub>进行了系统研究。第一性原理结构弛豫结果显示，低温下每13个Ta原子会收缩形成一个“大卫”星团簇(图1)。通过分析费米能级附近的轨道特征，发现系统存在轨道密度波序，并且主要来源于团簇中心的Ta-5d<sub>3z<sup>2</sup>-r<sub>2</sub></sub>的贡献(图2)。结合动力学平均场理论结果，研究人员进一步确定了，在结构畸变和库仑关联共同作用下才使得低温电荷密度波绝缘相稳定，进而在实验上被观测到；同时，轨道密度波也起到了重要作用。另外，研究人员还发现，块体系统的基态是一个层间反铁磁态，单层体系的基态是一个铁磁态。这些理论研究结果对该体系的后续研究提供了重要参考，包括：轨道机制、激子物理、平带特征以及潜在的应用价值。

以上研究得到了国家自然科学基金项目的资助。

文章链接：<https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.96.125138>

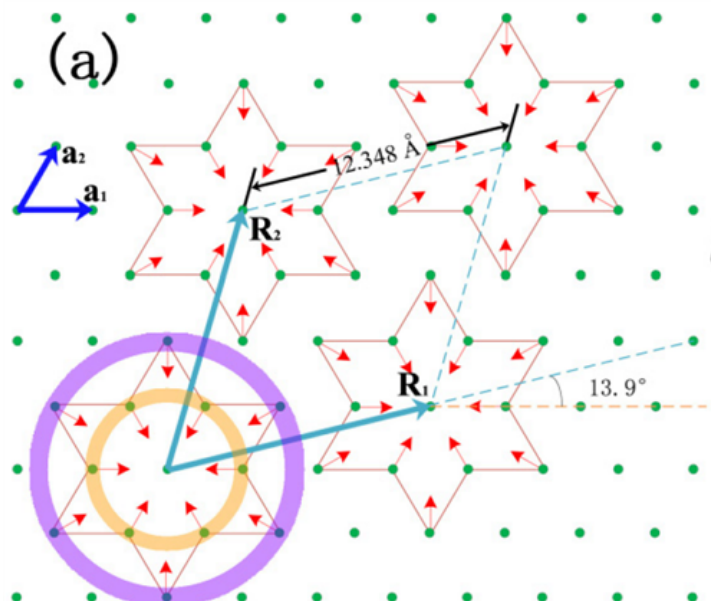


图1. 在低温相中，每13个Ta原子（绿色原点）收缩形成一个“大卫”星团簇。红色箭头标定了收缩方向。

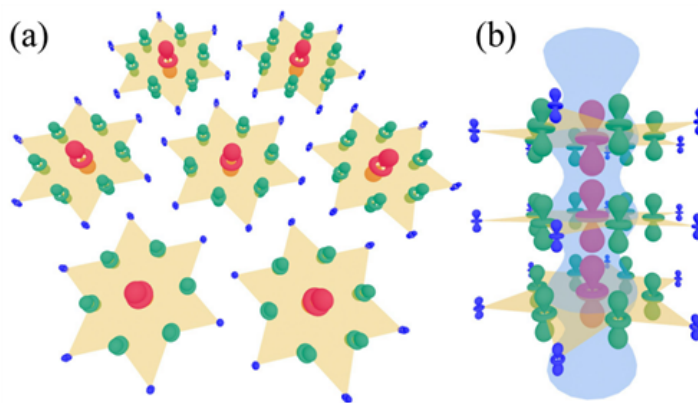


图2. (a) 面内和 (b) 层间轨道密度波序示意图，每个黄色六角星代表一个“大卫”星团簇，红绿蓝三色都对应Ta-5d<sub>3z<sup>2</sup>-r<sup>2</sup></sub>轨道。



皖ICP备050001008中国科学院固体研究所 版权所有

地址：安徽省合肥市蜀山湖路350号

邮编：230031 电话：0551-65591415 传真：0551-65591434