# 半导体所在硅上In线的光致相变机理研究中获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/22833.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！*

**半导体所在硅上In线的光致相变机理研究中**
**获进展。**

自20世纪初期，量子理论对技术发展做出了重大贡献。尽管量子理论取得了成功，但由于缺乏非平衡量子系统的框架，其应用主要限于平衡系统。超短激光脉冲和自由电子加速器X射线的产生，推动了整个非平衡超快动力学领域的发展。超快现象在物理、化学和生物等领域备受关注，例如光致相变、光诱导退磁、高能离子碰撞和分子化学反应等。非平衡超快领域的实验研究成果颇丰，已成为热点。然而，实验不能给出原子尺度的原子/分子位移，故关于激发态动力学的认知存在争议。为了探讨超快动力学现象，理论模拟至关重要。为推动超快领域的发展以及揭开超快动力学过程中的诸多谜团，中国科学院半导体研究所骆军委团队和汪林望团队合作发展了一系列含时演化的算法，并将这些算法应用于不同领域。

近期，科研人员将此算法应用到Si的(111)表面In线相变中，解决了实验上的较多争议。Si的(111)表面上吸附单个铟原子层，在室温下形成Si(111)-(4×1)-In两个平行锯齿形In链组成的量子线结构（图1b），具有金属性质。当温度降低到125 K以下，In原子重新排列成具有（8×2）重构的四重晶胞扭曲六边形（图1a），伴随周期性晶格畸变产生一维电荷密度波（CDW），并打开带隙成为凝聚态物理中的绝缘体相（窄禁带半导体）（图1c）。激光脉冲辐照可以实现硅上In线在半导体相与金属相间的超快转变。然而，激光脉冲辐照下的硅上In线在转变为半导体相变后其相干声子振荡快速衰减，未出现其他量子相变材料中普遍存在的两个相间来回振荡的现象。

为了研究硅上In线在光致相变后相干声子振荡快速衰减的微观机理。该工作利用含时密度泛函理论（rt-TDDFT）方法模拟了硅上In线(In/Si(111))在激光脉冲辐照下的动力学过程，在理论上重现了实验中（图1g）观察的半导体相转变为金属相的超快过程（图1、2）。研究发现，激光脉冲把硅中的价电子激发到In线的表面态S1和S2导带，且由于S1和S2能带来自单个In锯齿链上In dimer的成键态，光激发形成使该In dimer变长的原子力，驱动In原子朝着半导体相运动，在晶格周期下In原子的集成运动形成CDW相干声子模式，导致结构相变（图3、4）。研究表明，在转变为半导体相后，S1和S2能带切换为跨越两个锯齿In链上的原子，这种能带成分的转换导致原子驱动力的方向旋转约π/6，阻止In原子在CDW声子模式中的集体运动。该研究从局域原子驱动力进行解释，为光致相变过程提供了更简单的物理图像，为实验调控结构相变提供了直观的理论指导。上述模拟均可在PWmat软件中实现。

相关研究成果以*Origin of Immediate Damping of Coherent Oscillations in Photoinduced Charge-Density-Wave Transition*为题，发表在《物理评论快报》（*Physical Review Letters*

）上。研究工作得到国家自然科学基金国家杰出青年科学基金项目、中科院前沿科学重点研究计划和中科院战略性先导科技专项等的支持。

论文链接

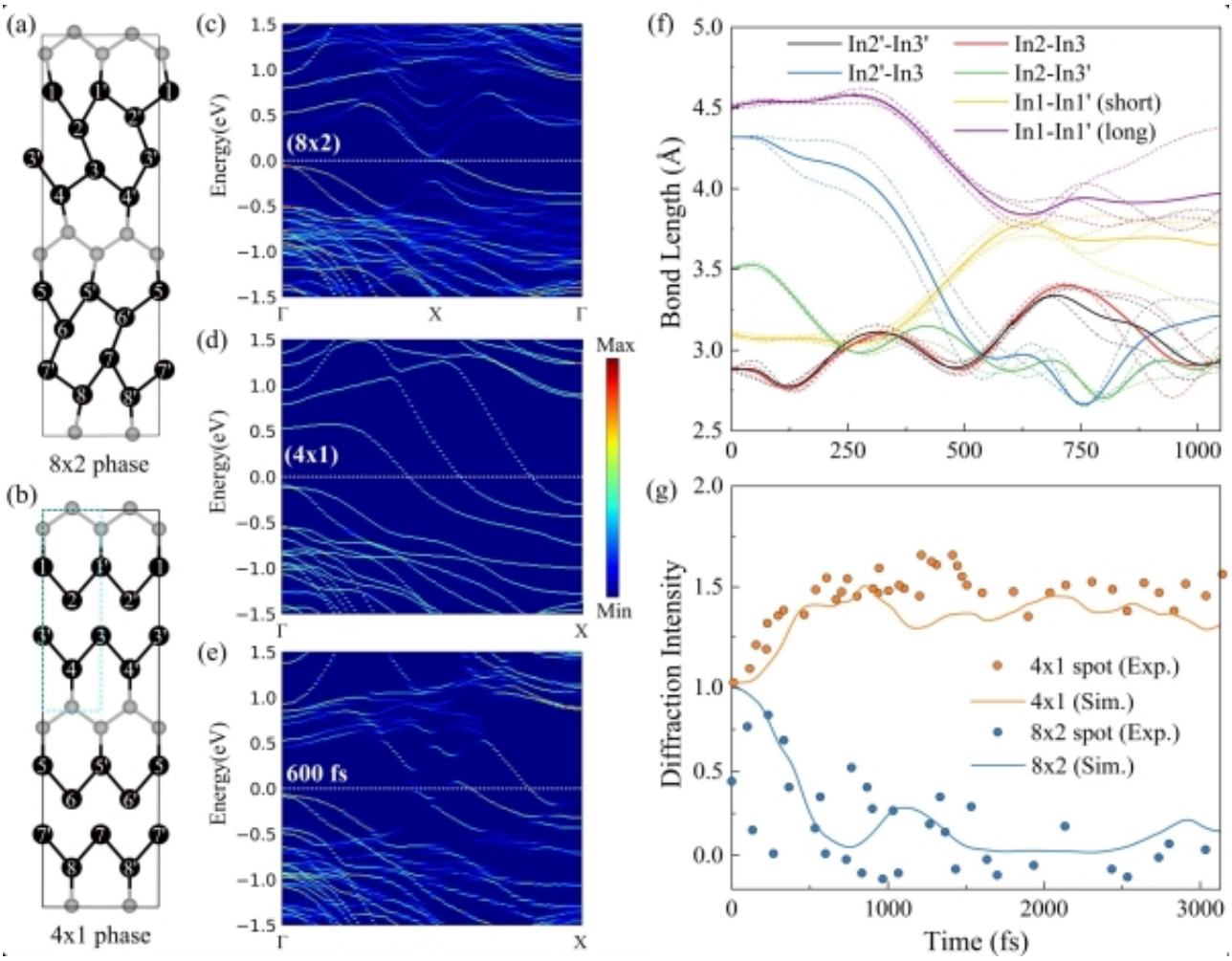



图1.光诱导半导体相（CDW）到金属相相变的动力学模拟及实验对比

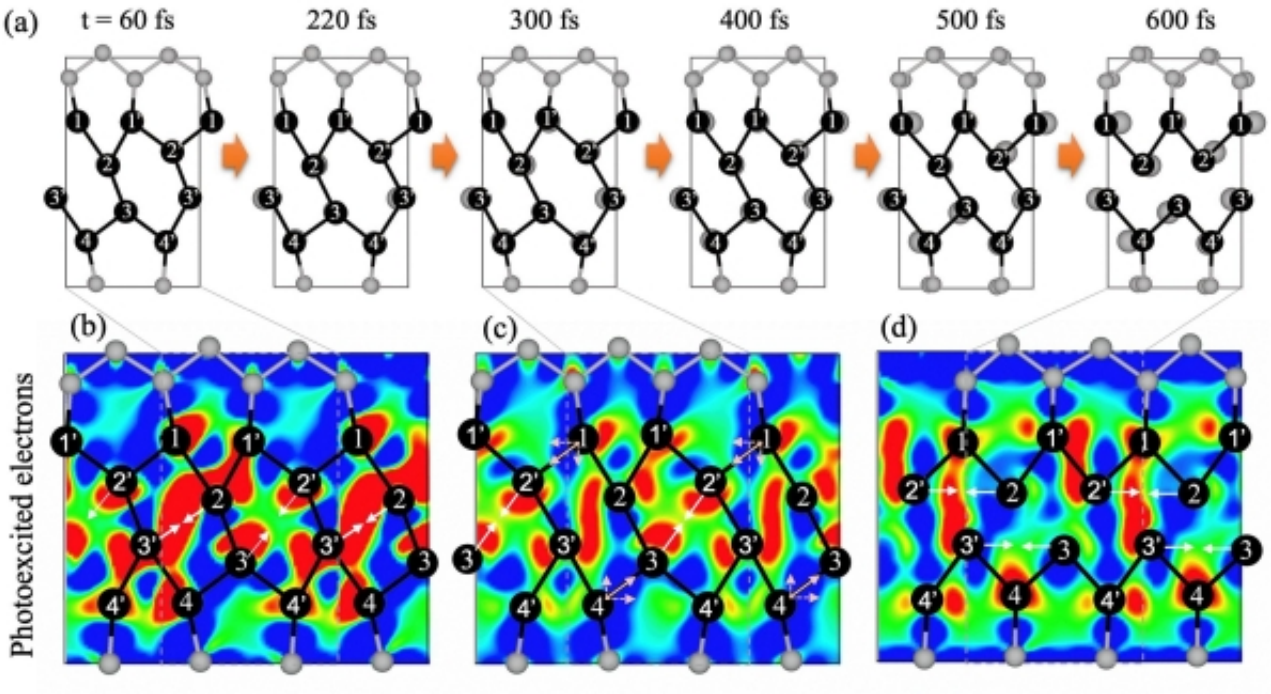



图2.原子结构、原子受力和光激发电子分布随时间的演化

研究团队单位：半导体研究所

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