
物理所揭示相干声子驱动的谷间散射和拉比振荡

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/24010.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！

物理所揭示相干声子驱动的谷间散射和拉比振荡

。二维过渡金属硫族化合物因能带具有多谷结构，赋予了电子谷自由度，因而成为研究多体相互作用的理想平台。作为退谷极化的主要机制，自由电子或束缚激子的谷间散射过程，对剖析激发态电子-声子相互作用和谷电子器件的设计和实现至关重要。目前，对谷间散射的理论和实验研究多基于热平衡态或准平衡态。而超短激光脉冲可驱动晶格和电子远离平衡状态，体系的超快动力学过程和基本机制尚不明确。

近期，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组博士研究生王晨宇、刘新豹、陈擎等在副研究员王亚嫻、研究员孟胜的指导下，利用自主开发的非绝热含时密度泛函分子动力学方法和软件(TDAP)，探究了单层WSe₂中相干声子诱导的激发态电子K→Q的谷间散射过程(图1)，在飞秒时间尺度揭示了非平衡态电声耦合的规律。

研究表明，晶格沿布里渊区边界M点纵波声学声子【LA(M)】的相干振荡，可诱导占据在K谷的光激发电子转移到较低能级的Q谷，散射过程时间尺度约为400fs，与实验结果相符。然而，与目前实验中观测到的电子占据数指数型衰减明显不同的是，相干声子驱动的谷间散射呈现出“阶梯式”变化的新特征。一方面，谷间散射主要发生在相干声子振幅最小而晶格振动速度最大时；另一方面，电子在K谷散射至Q谷后，观察到由Q谷至K谷的逆散射，类似于周期场驱动下的拉比振荡过程(图1、2)。这两个特征明显区别于热声子条件依从的费米黄金规则，阐明了非绝热效应的关键作用。这种非绝热电子-声子相互作用在二能级模型中得到直接印证，即当原子接近平衡位置时，非绝热耦合矩阵元达到峰值，促进谷间的电子转移，进而诱导出阶梯式的散射过程(图3)。

此外，科研人员探究了借助相干声子调制谷间散射的通用路径。LA(M)声子振幅增加利于提高电子K→Q的谷间散射速率；借助超快激光脉冲结合声子间的非线性耦合，可实现对短波LA(M)声子振幅的有效操控(图4)。

相关研究成果以Coherent-phonon-driven intervalley scattering and Rabi oscillation in multivalley 2D materials为题，发表在《物理评论快报》【Physical Review Letters 131, 066401(2023)】上。研究工作得到国家重点研发计划、国家自然科学基金委员会和中国科学院的支持。论文链接

图1. WSe₂中光激发电子谷间散射示意图和K/Q谷占据数的拉比振荡

图2. (a)K/Q谷瞬时能级(上)和LA(M)声子的相干振动(中)。K/Q谷上电子占据数的演化。(b)上图：40，300，500fs下模拟K/Q谷上的光发射信号。下图：实验及理论模拟中K谷与Q谷电子信号比值随时间的演化。灰色虚线标定为K谷与Q谷信号相当的临界时间。

图3. (a)模型(红线)和TDDFT计算(黑线)中K/Q谷瞬时能级的时间演化。(b)模型计算出的Q谷占据数及非绝热耦合矩阵元(NACME)(蓝色背景)的时间演化。

图4. (a)K谷至Q谷散射速率随LA(M)声子振幅的变化。(b)长波A1声子与短波LA(M)声子间的耦合示意图。(c)A1声子驱动下，LA(M)声子的时间演化。

研究团队单位：物理研究所

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](https://www.iikx.com)转发