
相干声子驱动山谷间散射和拉比振荡研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/24122.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！

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，对探讨激发态电子-声子相互作用以及谷电子器件的设计和实现均至关重要。目前，关于谷间散射理论和实验研究，多基于热平衡态或准平衡态。而超短激光脉冲能够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。

近日，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娴、研究员孟胜的指导下，利用组内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 WSe_2

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。而与目前实验中观测到的电子占据数指数型衰减有明显不同的是，相干声子驱动山谷间散射呈现出“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了直接印证，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，该研究探索了借助相干声子调制山谷间散射的通用路径。LA(M)声子振幅增加有利于提高电子

(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）上。研究工作得到国家重点研发计划、国家自然科学基金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，以及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) 及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 A_1 声子与短波LA(M)声子间的耦合示意图; (c) A_1 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](http://www.iikx.com)转发