
TiSe₂中的隐藏手性电荷密度波研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/25106.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！

在电荷密度波材料中，电子密度的重新调制以及伴随的晶格畸变往往会破坏材料原本的对称性，导致

多种自由

度的对称性破缺以

及演生相的产生。获得广泛研究的电

荷密度波材料1T-TiSe₂

，在无手性晶格中表现出螺旋电子序，为科学家在凝聚态中探讨手性这一自然界常见的对称性破缺提供了独特的研究平台。然而，前期研究对形成手性电荷密度波的微观机制未有定论。

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组博士研究生聂正蔚和陈大强，在副研究员王亚娴、

研究员孟胜的指导下，利用组内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1T-TiSe₂

中光诱导的亚稳态电荷密度波相变机制（图1），揭示了光与材料之间的手性传递行为。

研究表明，晶格沿布里渊区边界M点的光学声子畸变模式构成了1T-TiSe₂

的亚稳相，且这三支等效的向列相叠加态构成了多被观测的能量最低模式（triple-q

mode）。然而，线偏光可以打

破三支声子的对称性，诱导出单一M点声子模式主导的single-q

模式（图2）。进一步，利用single-q

模式层之间的堆垛，研究提出了手性电荷密度波的模式结构。这种结构可以利用圆偏振光激发并

稳定（图3）。该研究强调了手性在“光-电子-晶格”自由度之间的转移和调控机制，并给出了

可实验观测的判据（图4），以期启发未来的手性相变实验探索。

相关研究成果以Unraveling Hidden Charge Density Wave Phases in

1T-TiSe₂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、中国科学院的支持。

[论文链接](#)

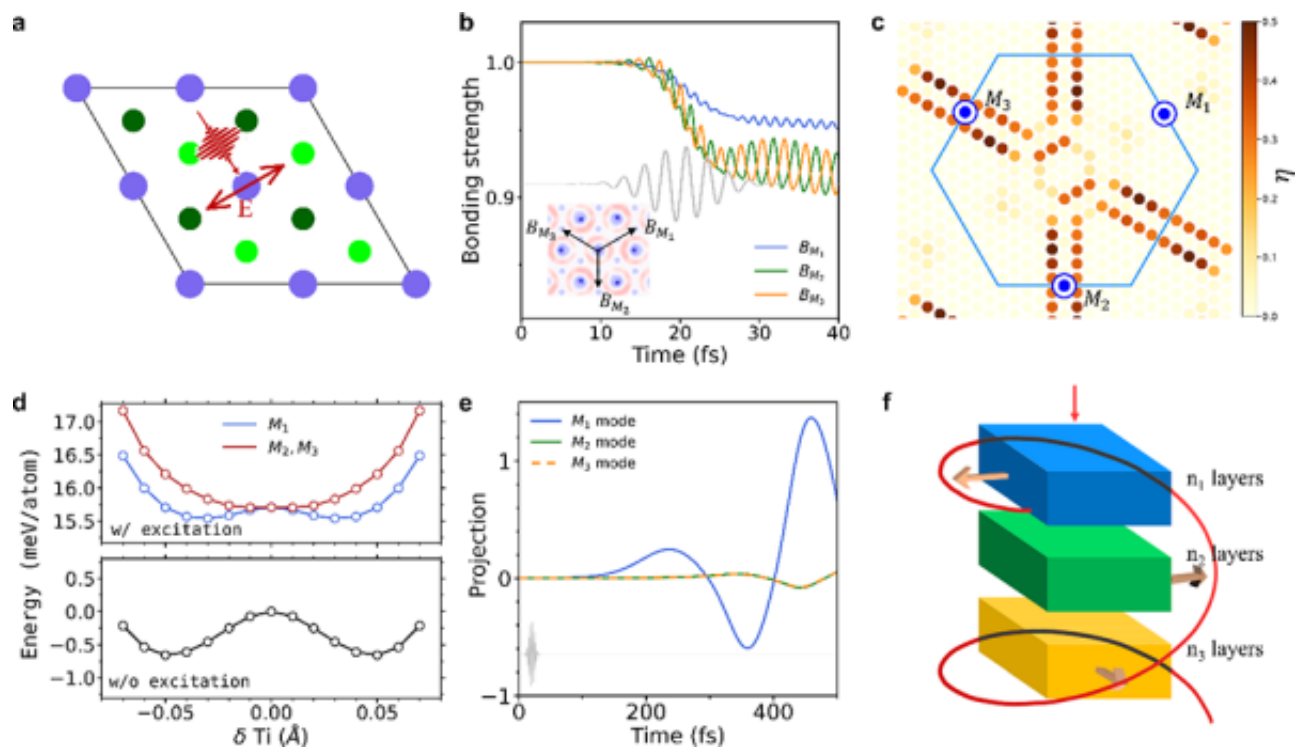


图1. (a) 线偏振光诱导的瞬态，(b-d) 电子序响应和 (e) 晶格序响应，(f) 圆偏振光诱导的螺旋序示意图。

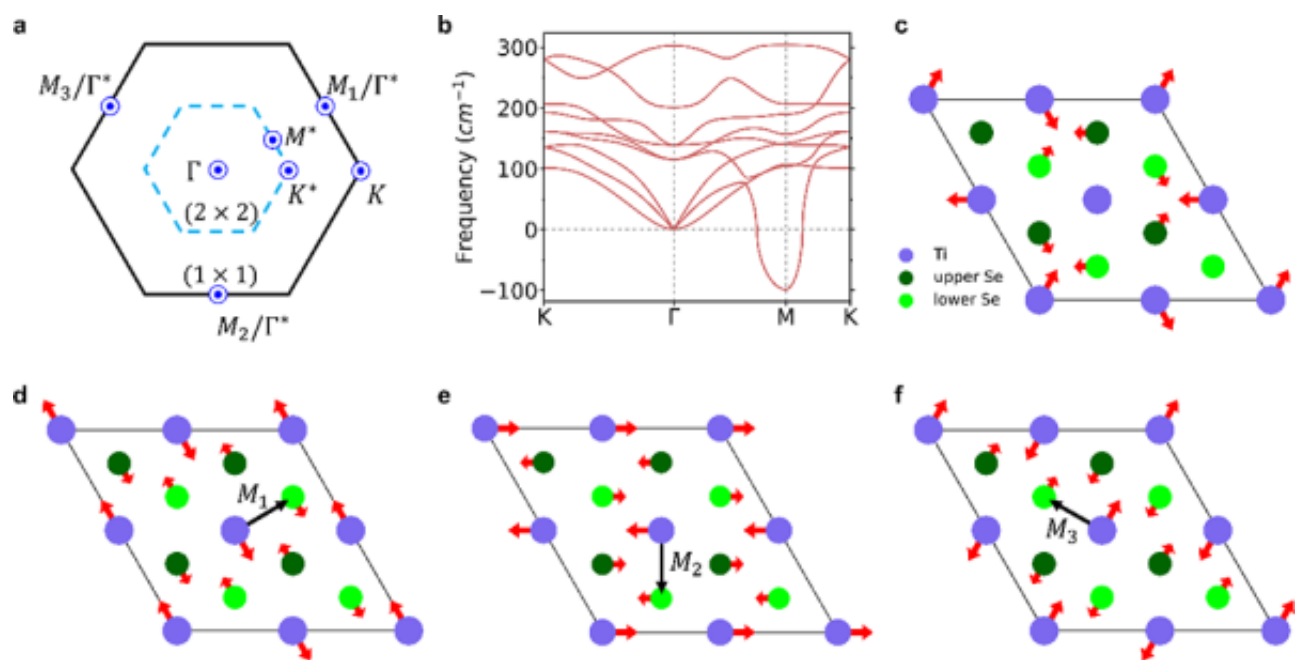


图2. 1T-TiSe₂ (a) 第一布里渊区高对称点，(b) 声子谱、(c) triple-q和 (d-f) single-q模式。

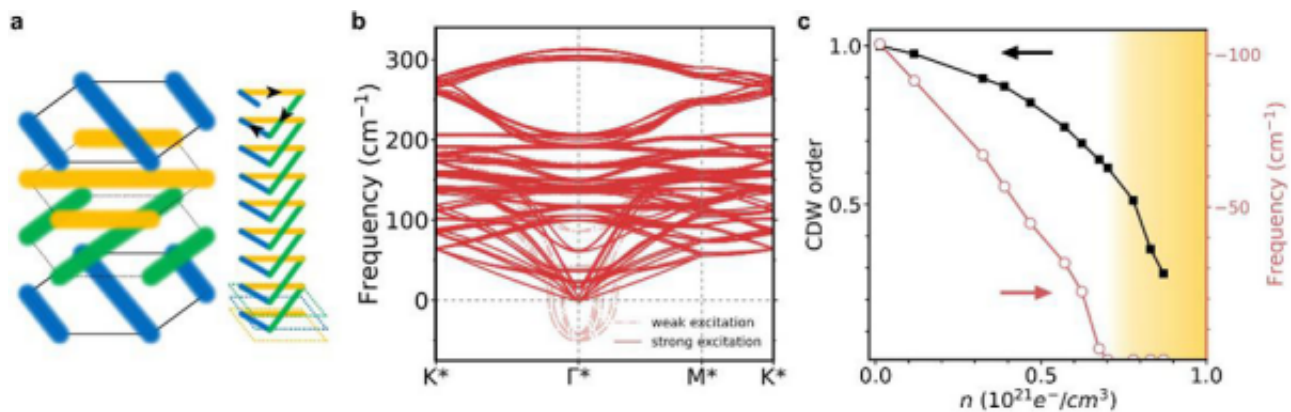


图3. (a) 手性模型的 (b) 激发态热力学稳定性及 (c) 激发态电荷密度波序/稳定性分析。

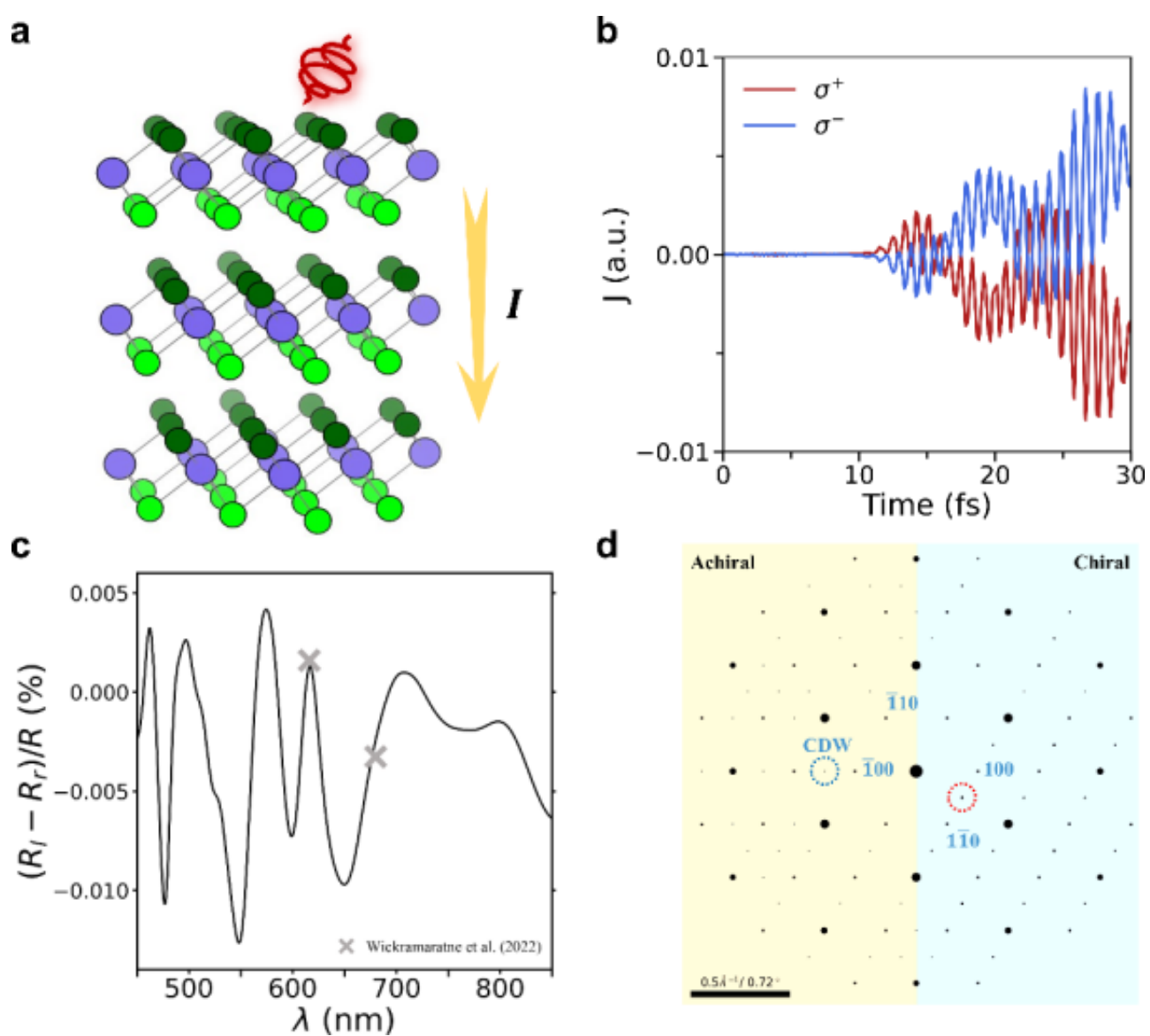


图4. 手性模型的 (a-b) 圆偏光电流 (c) 圆二色谱及 (d) 电子衍射图样模拟。

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