
自陷态激子的第一性原理计算框架

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/29939.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！

自陷态激子的第一性原理计算框架。激子-声子耦合作为凝聚态物质中重要的多体相互作用，在激子吸收峰的重整化、声子散射辅助的激子发光等现象中都有体现。当激子-声子相互作用足够强时，激子会拖拽周围的晶格，形成局域的晶格畸变，形成类似于电子或空穴的极化子的一种新量子态——自陷态激子（或称激子极化子）。在实验中，自陷态激子多具有较大的展宽，并在光致发光谱中导致显著的斯托克斯红移。

尽管自陷态激子在很多体系中已有实验观测，当前对自陷态激子的理论研究仍然受限于巨大的困难：在大尺寸超胞中使用GW+BSE方法产生不可接受的巨大计算量，而常规方法无法给出包含激子效应的原子受力等。目前，高效、普适的自陷态激子理论计算框架仍然欠缺。

最近，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组博士生白云飞在王亚娴副研究员、孟胜研究员的指导下，自主发展了一种高效的第一性原理计算框架，用于研究绝缘体和半导体中的自陷态激子。通过将多体Bethe-Salpeter方程与微扰理论相结合，能够获得模式和动量分辨的激子-声子耦合矩阵元。利用激子能带、声子能带和激子-声子耦合矩阵元，可以自洽求解得到局域的自陷态激子波函数（包括局域的激子波函数以及局域的晶格畸变）。此外，该方法可以计算自陷态激子的势能面，预测其导致的斯托克斯红移，具有普适性。

以二维磁性半导体铬三卤化物为例，该工作计算了体系中的自陷激子态的形成过程和斯托克斯红移，与实验测量的光致发光谱能很好地吻合。此外，计算得到的晶格畸变模式也和瞬态吸收谱的测量相一致。这项作为自陷态激子的研究奠定了理论基础，并为量子材料的超快光激发和激子的相干调控提供了重要启发。

相关研究成果以 Ab Initio Self-Trapped Excitons 为题，发表于 Phys. Rev. Lett. 133, 046903 (2024)。该研究受到了国家自然科学基金委、科技部重点研发计划、中国科学院的资助。（来源：中国科学院物理研究所）

相关论文信息：<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.133.046903>

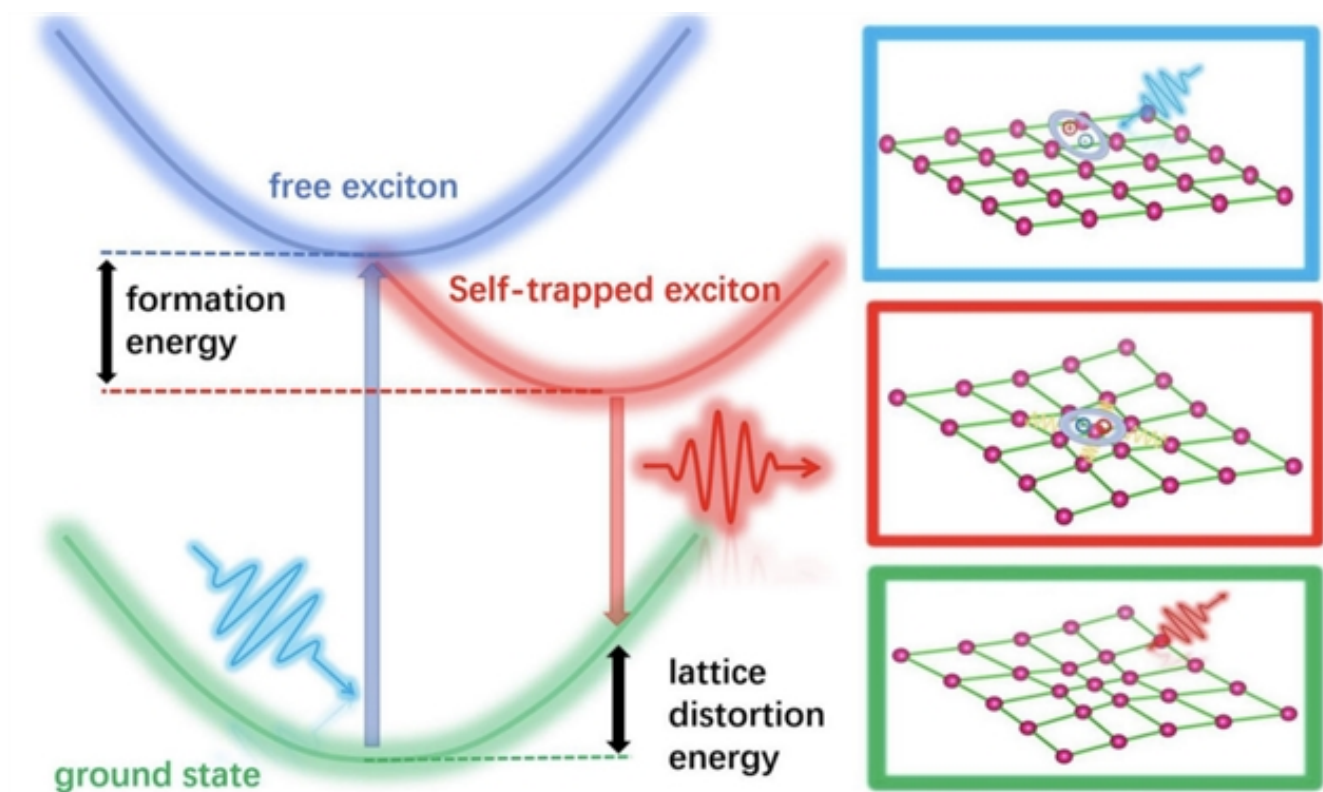


图 自陷态激子形成的Franck-Condon 图像

作者：王亚娴等 来源：《物理评论快报》

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