物理所等提出自陷态激子的第一性原理计算框架

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/29976.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！

物理所等提出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，体现于激子吸收峰的重整化、声子散射辅助的激子发光等现象。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，产生类似于电子或空穴的极化子的新量子态即自陷态激子。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。尽管自陷态激子在较多体系中已有实验观测，但自陷态激子的理论研究面临挑战。当前，高效而普适的自陷态激子理论计算框架仍然欠缺。

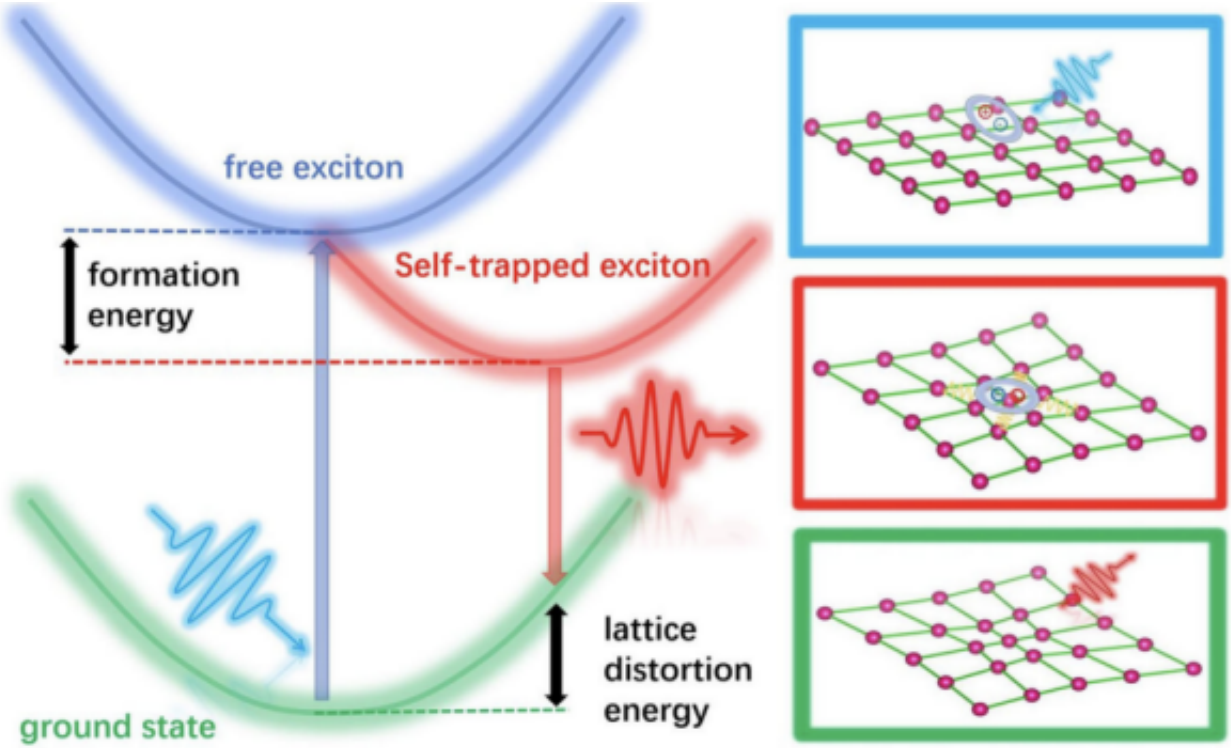
近日，中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家研究中心表面物理国家重点实验室SF10组博士生白云飞在副研究员王亚娴、研究员孟胜的指导下，自主发展了用于研究绝缘体和半导体中的自陷态激子的第一性原理计算框架。这一框架通过结合多体Bethe-Salpeter方程与微扰理论相，能够获得模式和动量分辨的激子-声子耦合矩阵元。利用激子能带、声子能带和激子-声子耦合矩阵元，可以自洽求解得到局域的自陷态激子波函数。同时，该方法可以计算自陷态激子的势能面，预测其导致的斯托克斯红移，具有普适性。

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，且与实验测量的光致发光谱吻合。同时，研究发现，计算得到的晶格畸变模式与瞬态吸收谱的测量一致。

上述成果为自陷态激子研究奠定了理论基础，并对量子材料的超快光激发和激子的相干调控研究具有启发意义。

相关研究成果以*Ab Initio Self-Trapped Excitons*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、国家重点研发计划、中国科学院相关项目的支持。

论文链接



自陷态激子形成的Franck-Condon图像

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转发