

核量子效应驱动的固体阿秒电子动力学涨落新机制

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/39386.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！

核量子效应驱动的固体阿秒电子动力学涨落新机制。原子核量子效应（Nuclear Quantum Effects, NQE）包含核的零点振动与量子隧穿，对材料晶格稳定性、量子顺电性乃至超导等现象具有决定性影响，但其在阿秒级超快电子动力学中的作用长期未被厘清。传统观点认为，固体高次谐波（High harmonic generation, HHG）主要由激光驱动电子在晶格势中的非线性运动决定，这时原子核通常被视为经典点粒子。然而，在凝聚态物理与化学体系中，原子并非经典意义上的点粒子，它始终受到零点振动和量子隧穿等核量子效应的影响。然而，人们对NQE在电子动力学中的作用仍缺乏清晰认识。特别是在以HHG为代表的阿秒尺度电子超快过程中，核量子效应究竟扮演何种角色、如何影响电子动力学行为，仍是一个悬而未解的问题。这一问题不仅关系到对物质本征量子行为的理解，也直接影响量子信息与超快光电子学的发展。

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孟胜研究员指导博士后胡史奇、博士生陈擎，利用自主发展的融合含时密度泛函（TDDFT）和环聚物分子动力学（RPMD）第一性原理方法，和自主开发的全量子动力学软件TDAP，以典型二维材料石墨烯为模型体系，系统研究了核量子效应对固体HHG的影响。研究发现，NQE会在原子周围引入一种新的电荷密度空间涨落结构——电荷密度涟漪（Charge Density Ripples, CDR）。这种由核量子离域效应诱导的电荷分布重构，相当于一种额外的有效极化场，能够显著改变电子在晶格中的非线性散射轨迹，从而直接调制HHG的振荡相位，并在谐波信号中留下可观测的特征，比如HHG椭圆偏振旋转角的异常变化。

该机制不同于传统的退相干模型，提供了一种全新的物理图像，并成功解释了此前实验中尚未完全厘清的现象。这一发现表明，高次谐波光谱可以作为一种全光学探针，用于探测由核量子效应驱动的电荷分布变化。该结果突破了固体HHG研究中通常将原子核视为经典粒子的传统认识，表明核量子效应是不可忽略的超快动力学因素。本工作为理解超快尺度下的核-电子量子动力学提供了新的思路，也为未来基于光场的量子态探测与调控提供了新的路径。

相关研究成果以Charge-Density Ripples Modulated by Nuclear Quantum Effects in High-Harmonic Generation in Solids为题发表在《物理学评论快报》（Phys. Rev. Lett. 136, 136901 (2026)）上。中国科学院物理研究所博士后胡史奇（现为马克斯·玻恩研究所博士后）为该工作的第一作者，中国科学院物理研究所孟胜研究员为通讯作者。参与工作的还有博士生陈擎。该项研究得到了科技部重点研发计划、国家自然科学基金委员会以及中国科学院青年团队项目的支持。（来源：中国科学院物理研究所）

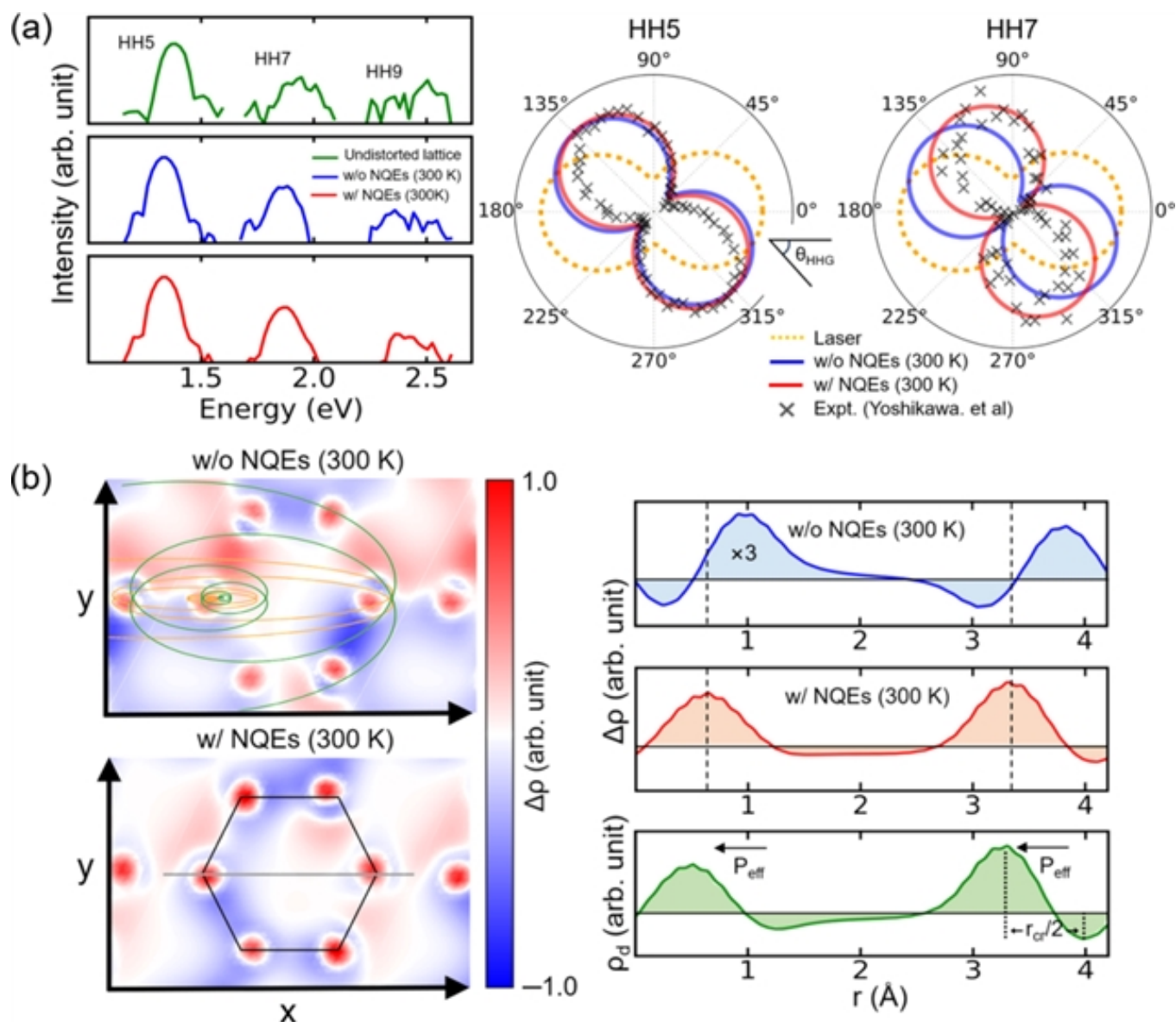


图 (a) 核量子效应调制的高次谐波谱及其椭圆偏振依赖。(b) 石墨烯晶格中核量子效应诱导的电荷密度涟漪。w/o NQE: 不考虑核量子效应；w/ NQE: 考虑核量子效应。

相关论文信息：<https://doi.org/10.1103/8v2p-j9m4>

特别声明：本文转载仅仅是出于传播信息的需要，并不意味着代表本网站观点或证实其内容的真实性；如其他媒体、网站或个人从本网站转载使用，须保留本网站注明的“来源”，并自负版权等法律责任；作者如果不希望被转载或者联系转载稿费事宜，请与我们联系。

作者：孟胜等 来源：《物理学评论快报》

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://iikx.com)转发