研究揭示声子激活库仑相互作用驱动激子弛豫机制

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/43303.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！

研究揭示声子激活库仑相互作用驱动激子弛豫机制。近日，中国科学技术大学教授赵瑾团队基于自主发展的第一性原理实时多体动力学方法，揭示了声子运动激活电子-空穴之间的库仑耦合、进而主导激子超快弛豫的新机制。11月10日，相关成果发表于《物理评论快报》。

激子是半导体中电子与空穴通过库仑相互作用形成的束缚态，在光电器件、二维半导体及量子信息等领域具有重要意义。长期以来，人们普遍认为，电子与空穴之间的库仑相互作用主要决定激子的形成、束缚能及其内部结构，而激子在光激发后的能量弛豫和动量散射过程则主要由电子-声子相互作用驱动。然而，库仑相互作用是否也能够直接参与并主导激子的非平衡动力学过程，仍是一个尚未得到充分认识的基本科学问题。

针对这一问题，研究团队利用自主发展的Hefei-NAMD程序，将GW准粒子计算、实时Bethe-Salpeter方程与非绝热分子动力学相结合，在包含电子-空穴多体关联效应的第一性原理框架下，研究了单层二硒化钨中光学亮激子向动量暗激子的超快转变过程。

研究发现，在理想的静态晶格中，由于晶体动量守恒，不同质心动量的激子态之间的库仑耦合受到严格限制。然而，晶格振动能够动态改变电子波函数，从而激活原本被禁止的激子态间库仑耦合。一旦这一耦合被激活，长程库仑相互作用便能够成为激子弛豫的主要通道，其作用甚至显著超过传统的电子-声子散射。

通过比较单粒子与包含多体关联效应的动力学模拟，研究团队发现，考虑电子-空穴库仑相互作用后，单层二硒化钨中亮激子向动量暗激子的转变时间由约239飞秒缩短至105飞秒，弛豫速度提高了一倍以上。进一步的微观机制分析表明，部分激子态之间的长程库仑耦合强度可达到35.76百万电子伏特，比相应的单粒子电子-声子耦合强一个数量级以上。此外，多体相互作用不仅加快了激子的动量弛豫，还能够改变其自旋和谷间散射路径，打开单粒子图像下难以实现的新弛豫通道。

这一研究揭示了声子与库仑相互作用在非平衡激子动力学中的一种新的协同机制：声子不仅能够直接驱动激子散射，还可以充当激活多体库仑耦合的动态开关，而被激活的库仑相互作用则能够主导随后的超快弛豫过程。这一发现拓展了人们对库仑相互作用物理作用的传统认识，表明库仑相互作用不仅决定激子的形成与束缚，也能够直接控制激子的动力学演化，为理解和调控二维半导体中的激子寿命、谷动力学及超快光电响应提供了新的理论视角。（来源：中国科学报 王敏）

相关论文信息：https://doi.org/10.1103/zpbg-7137

作者：赵瑾 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转发