

合肥研究院二维电荷密度波材料研究取得进展

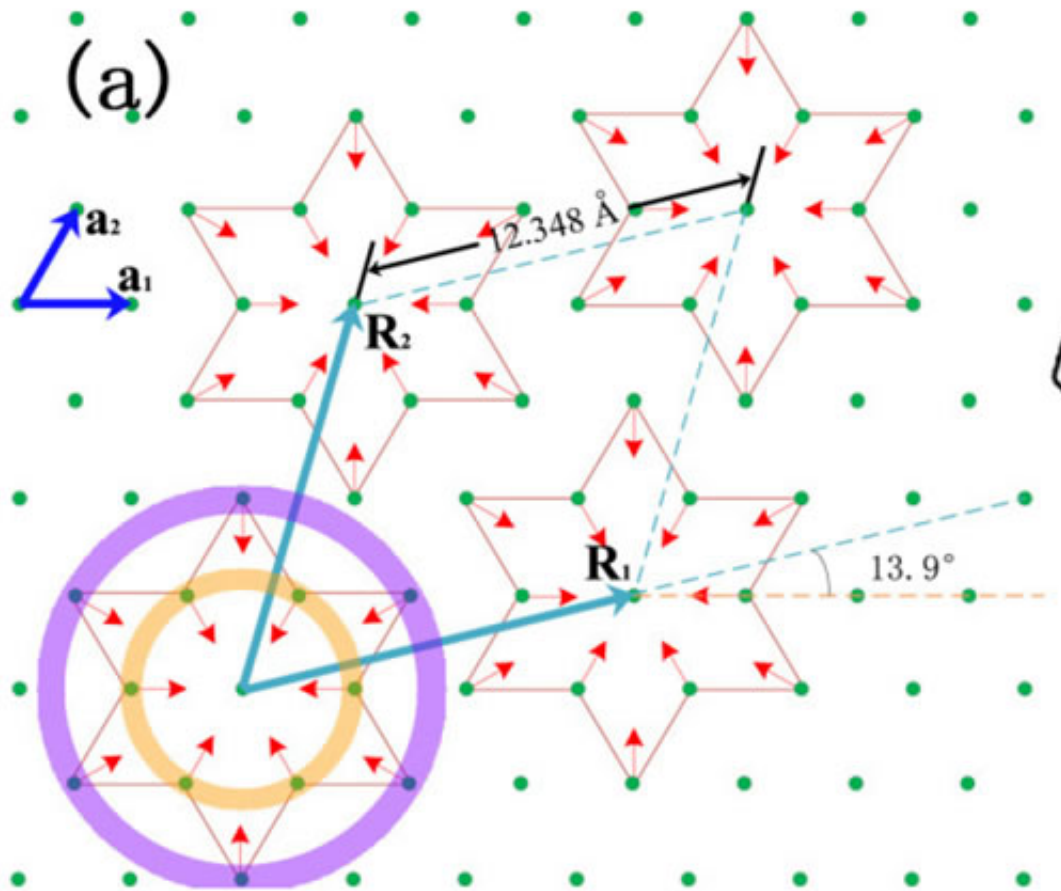


图1.在低温相中，每13个Ta原子（绿色原点）收缩形成一个“大卫”星团簇。红色箭头标定了收缩方向。

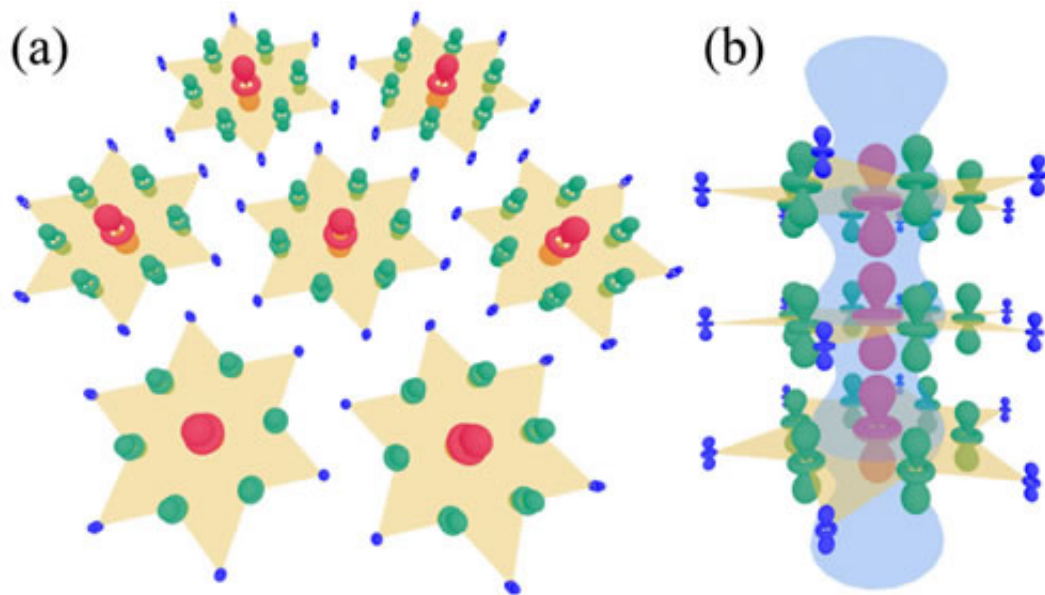


图2.(a)面内和(b)层间轨道密度波序示意图，每个黄色六角星代表一个“大卫”星团簇，红绿蓝三色都对应Ta-5d3z2-r2轨道。

近日，中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所研究员邹良剑课题组、与北京计算中心研究员林海青、常凯合作，通过对二维电荷密度波材料1T-TaS₂体系中的块体材料、单层体系、高温正常相和低温电荷密度波相进行系统性研究，发现电子关联和轨道密度波对于低温相的形成起到重要作用。相关研究结果发表在《物理评论B》上。

实验研究表明，1T-TaS₂具有丰富的相变过程，随着温度的降低，它会经过非公度电荷密度波、准公度电荷密度波和公度电荷密度波三次相变，在最后一次相变之后，体系会从金属转变为绝缘体。这一材料已被研究多年，但其低温相变机制目前尚无定论。

为了探索1T-TaS₂的低温相变机制，研究人员利用密度泛函理论和动力学平均场理论，对二维电荷密度波材料1T-TaS₂进行了系统研究。第一性原理结构弛豫结果显示，低温下每13个Ta原子会收缩形成一个“大卫”星团簇(图1)。通过分析费米能级附近的轨道特征，发现系统存在轨道密度波序，主要来源于团簇中心的Ta-5d_{3z²-r²}的贡献(图2)。结合动力学平均场理论结果，研究人员进一步确定，在结构畸变和库仑关联共同作用下才使得低温电荷密度波绝缘相稳定，进而在实验上被观测到；同时，轨道密度波起到了重要作用。此外，研究人员发现，块体系统的基态是一个层间反铁磁态，单层体系的基态是一个铁磁态。这对该体系的后续研究提供了重要参考，包括轨道机制、激子物理、平带特征以及潜在的应用价值。

以上研究得到了国家自然科学基金项目的资助。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/115745.html>