**#26**

**Ekscytony w potencjałach moiré**

**Autor // Author:** Maja Walczak, Maciej Bieniek

*Wydział Podstawowych Problemów Techniki, Politechnika Wrocławska*

**Korespondujący autor // Corresponding Author:** 278583@student.pwr.edu.pl

Celem pracy jest budowa teorii ekscytonu w krysztale moiré stworzonym poprzez skręcenie dwóch warstw MoTe₂ [1] z zastosowaniem metod *ab initio* i ciasnego wiązania. Potencjały moiré pozwalają na modyfikowanie właściwości wzbudzeń optycznych, umożliwiając m.in. ich lokalizację.

Obraz zawierający tekst, zrzut ekranu, Czcionka, diagram

Zawartość wygenerowana przez AI może być niepoprawna.

Punktem wyjścia niniejszej projektu jest opis struktury elektronowej monowarstw MoTe2 za pomocą teorii funkcjonału gęstości, która stanowi podstawę do konstrukcji modelu ciasnego wiązania [2]. Następnie, poprzez wprowadzenie odpowiedniego potencjału moiré, odtworzony zostanie efekt drugiej warstwy MoTe2, modyfikujący wewnątrzwarstwowe energie pasm elektronowych i dziurowych.

W kolejnym kroku przedstawiona zostanie konstrukcja wzbudzeń elektron – dziura, których oddziaływania prowadzą do równania Bethego–Salpetera na stany ekscytonowe [3]. Wzbudzenia te, skonstruowane początkowo dla monowarstwy, można klasyfikować za pomocą całkowitego pędu pary elektron – dziura. Standardowo pędy te tworzą izolowane podprzestrzenie pełnej przestrzeni Hilberta, które mieszają się jednak w obecności potencjałów łamiących symetrię translacyjną, w tym także potencjałów moiré.

W ostatniej części zaprezentowana zostanie implementacja metody obliczającej stany własne ekscytonów z uwzględnieniem mieszania przestrzeni pędów całkowitych, co umożliwi wyznaczenie energii wiązania i funkcji falowych tzw. ekscytonów moiré. Podejście to pozwoli lepiej zrozumieć wpływ periodycznych modulacji moiré na odpowiedź optyczną materiałów zbudowanych ze skręconych monowarstw MoTe2, wykazujących fascynujące własności topologiczne.

**References**

[1] Cai et al., Signatures of fractional quantum anomalous Hall states in twisted MoTe2, Nature 622, 63 (2023)

[2] M. Bieniek, K. Sadecka, L. Szulakowska, P. Hawrylak, “Theory of Excitons in Atomically Thin Semiconductors: Tight-Binding Approach”, Nanomaterials 1582 (2022)

[3] M. Bieniek, L. Szulakowska, and P. Hawrylak, „Band nesting and exciton spectrum in monolayer MoS2”, Phys. Rev. B 101, 125423 (2020)