



Contribution ID: 42

Type: **Wystąpienie ustne // Talk**

Ekscytony w potencjałach moiré

Saturday, 6 September 2025 17:30 (10 minutes)

Celem pracy jest budowa teorii ekscytonu w kryształach moiré stworzonym przez skrócenie dwóch warstw MoTe_2 [1] z zastosowaniem metod *ab initio* i ciasnego wiązania. Potencjały moiré pozwalają na modyfikowanie właściwości wzbudzeń optycznych, umożliwiając m.in. ich lokalizację.

Punktem wyjścia niniejszego projektu jest opis struktury elektronowej monowarstw MoTe_2 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 MoTe_2 , modyfikujący wewnętrzwarstwowe 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 skróconych monowarstw MoTe_2 , wykazujących fascynujące własności topologiczne.

Primary authors: BIENIEK, Maciej; WALCZAK, Maja

Presenter: WALCZAK, Maja

Session Classification: InnoFusion 2025: Sesja wystąpień ustnych

Track Classification: Teoria // Theory