

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования

«Уральский федеральный университет имени первого Президента России  
Б.Н. Ельцина»

Факультет: «Физический факультет»

Направление подготовки: 03.03.02 Общая физика

Проектная работа

на тему:

«Численное моделирование экситонной динамики и оптического отклика в  
гексагональном нитриде бора (hBN) с учетом кулоновских взаимодействий  
и диэлектрического окружения»

Автор работы:

обучающийся 3 курса

очной формы обучения

Колецкий Александр Олегович

подпись \_\_\_\_\_,

Руководитель работы:

Малахов Михаил Александрович

Оценка \_\_\_\_\_

Подпись \_\_\_\_\_

«\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2025 г

Екатеринбург– 2025

Введение.....	3
1. Теоретические основы.....	4
1.1. Кристаллическая структура и электронные свойства hBN.....	4
1.2. Экситоны в двумерных материалах .....	6
1.3. Кулоновское взаимодействие и потенциал Рытовой-Келдыша.....	7
2. Методика моделирования: Накачка-Зондирование.....	7
3. Результаты и Обсуждение.....	8
3.1. Временная динамика и генерация тока .....	8
3.2. Возбуждение электронов из Валентной Зоны в Зону Проводимости...8	
3.3. Возбуждение электронов из Основной Зоны в Зону Проводимости...12	
Заключение.....	14
Список литературы.....	18

## Введение

Двумерные материалы, такие как графен, гексагональный нитрид бора (hBN) и дихалькогениды переходных металлов, демонстрируют уникальные электронные и оптические свойства, открывая перспективы для новой электроники и фотоники (4). Понимание динамики носителей заряда, особенно экситонов, в таких материалах при сверхбыстрых временных масштабах имеет решающее значение для применения этого класса материалов в электронике

Одним из перспективных направлений является исследование динамики электронов с использованием методов накачки-зондирования. Эти методы позволяют изучать релаксационные процессы и динамику электронов с высоким временным разрешением. Данная работа посвящена теоретическому и численному моделированию динамики электронов в hBN под действием сверхкоротких лазерных импульсов. Основное внимание уделяется роли кулоновских взаимодействий в формировании экситонных состояний и влиянию диэлектрического окружения на их свойства. Для моделирования используется программное обеспечение EDUS (5), позволяющее проводить расчеты с высокой точностью.

**Цель работы:** теоретическое и численное моделирование динамики электронов в двумерных материалах (hBN) с использованием метода накачки-зондирования, анализ влияния кулоновских взаимодействий и диэлектрического окружения на экситонные состояния.

## 1. Теоретические основы

### 1.1. Кристаллическая структура и электронные свойства hBN

Гексагональный нитрид бора (hBN) обладает структурой пчелиных сот.

Электронные состояния в периодическом кристалле описываются в рамках теоремы Блоха, где волновые функции электронов представляются в виде плоских волн, модулированных периодической функцией.

$$\psi_{nk}(r) = e^{ik \cdot r} u_{nk}(r) \quad (1.1.1)$$

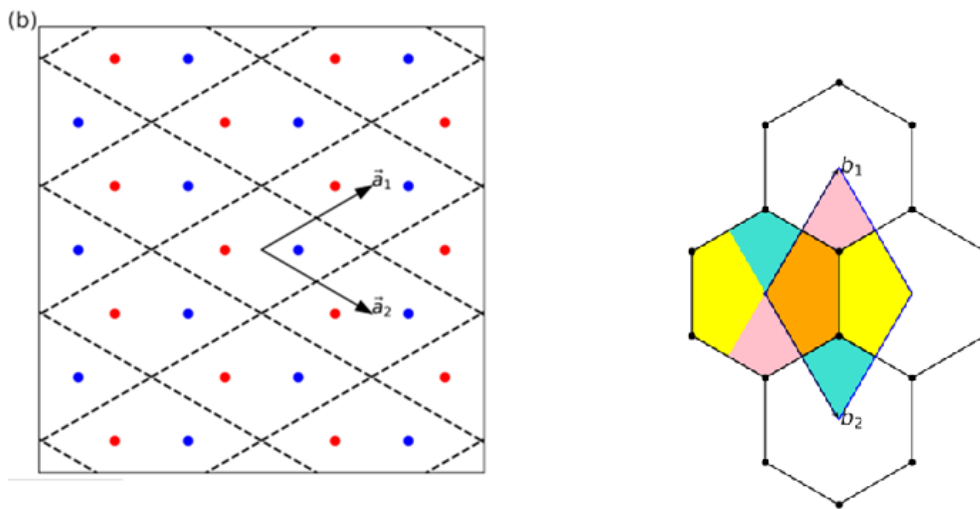


Рис 1. Прямая решетка гексагонального нитрида бора и зона Бриллюэна.

$$a_{1,2} = a \left( \cos \left[ \frac{\pi}{6} \right] \pm \sin \left[ \frac{\pi}{6} \right] \right) \quad (1.1.2)$$

Для описания электронных состояний используются векторы обратной решетки. Гамильтониан системы в приближении сильной связи учитывает взаимодействия между ближайшими соседями.

Матричные элементы гамильтониана в пространстве квазиимпульсов позволяют рассчитать зонную структуру материала.

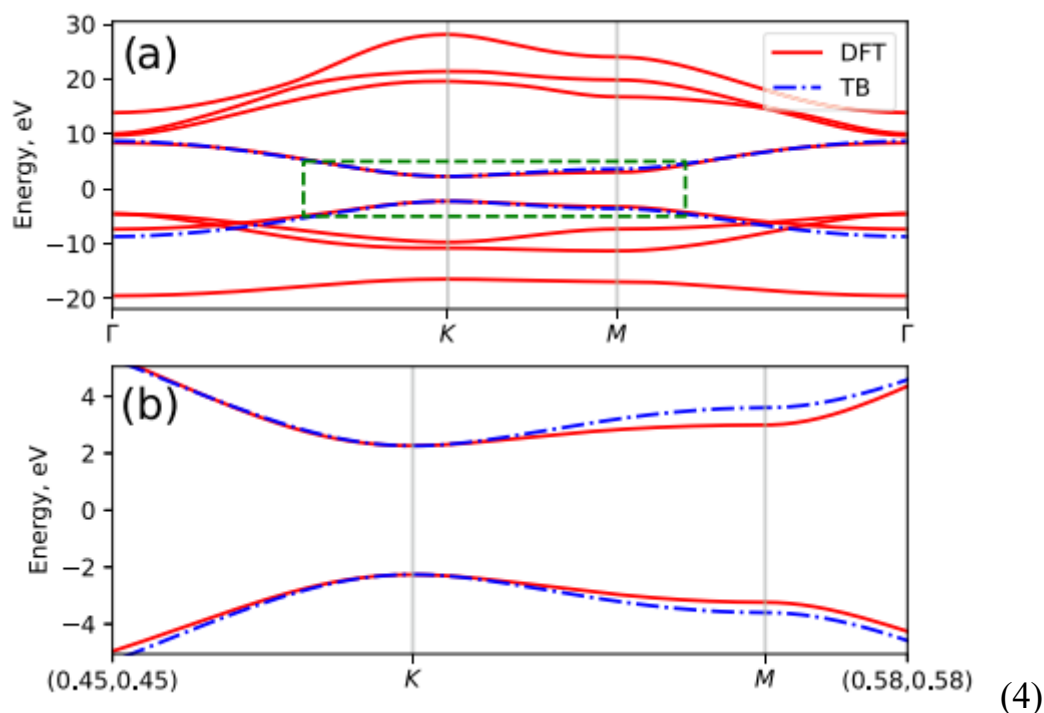


Рис. 2. Зонная структура hBN, рассчитанная методами DFT (теория функционала плотности) и TB (метод сильной связи)

## 1.2. Экситоны в двумерных материалах

Экситон – это квазичастица, представляющая собой связанное состояние электрона проводимости и дырки в валентной зоне, удерживаемых вместе электростатическим кулоновским взаимодействием. В hBN, как и в других полупроводниках, экситоны формируются при поглощении фотона с энергией, близкой, но обычно несколько меньшей ширины запрещенной зоны.

Энергетический спектр экситонов Ванье-Мотта для 2D материалов описывается формулой, аналогичной атому водорода, но с учетом эффективной массы электрон-дырочной пары ( $\mu^*$ ) и диэлектрической проницаемости окружения. Энергия связи экситона

$$E_b = (\mu e^4) / (2\hbar^2 (4\pi\epsilon_0 \epsilon_{r,eff})^2), \quad (1.1.4)$$

### 1.3. Кулоновское взаимодействие и потенциал Рытовой-Келдыша

В двумерных системах кулоновское взаимодействие между зарядами модифицируется из-за неоднородного диэлектрического окружения. Оно описывается потенциалом Рытовой-Келдыша (6):

$$V_q = V_q^{(RK)} = \frac{e^2}{\epsilon_0(\epsilon_1 + \epsilon_2)A} \frac{1}{|q|(r_0|q| + 1)}, \quad (1.1.5)$$

Где  $r_0$  — это эффективная толщина двумерного материала,  $\epsilon$  — это диэлектрическая проницаемость.

Этот потенциал отличается от стандартного кулоновского закона  $1/r$  и важен для корректного описания экситонных свойств.

### 2. Методика моделирования: Накачка-Зондирование

Моделирование динамики электронов проводилось с использованием техники накачки-зондирования. Мощный сверхкороткий импульс "накачки" (pump) возбуждает систему, переводя электроны из валентной зоны (Val.) и основных уровней (Core) в зону проводимости (Cond.). Последующий, более слабый импульс "зонда" (probe), задержанный на определенное время, исследует изменения в оптических свойствах материала (например, поглощение или отражение), вызванные накачкой. Это позволяет отслеживать релаксацию возбужденных носителей во времени.

Расчеты проводились для гексагонального нитрида бора (hBN).

Анализировалось влияние кулоновского взаимодействия (сравнение результатов с и без его учета) и параметров диэлектрического экранирования ( $r_0$  — эффективная толщина двумерного материала,  $\epsilon$  — это диэлектрическая проницаемость) на спектры поглощения и динамику носителей.

### 3. Результаты и Обсуждение

#### 3.1. Временная динамика и генерация тока

После воздействия лазерного импульса в системе генерируется электрический ток, который затем быстро затухает. Фурье-образ этого тока (или поляризации) позволяет получить спектр поглощения/излучения системы.

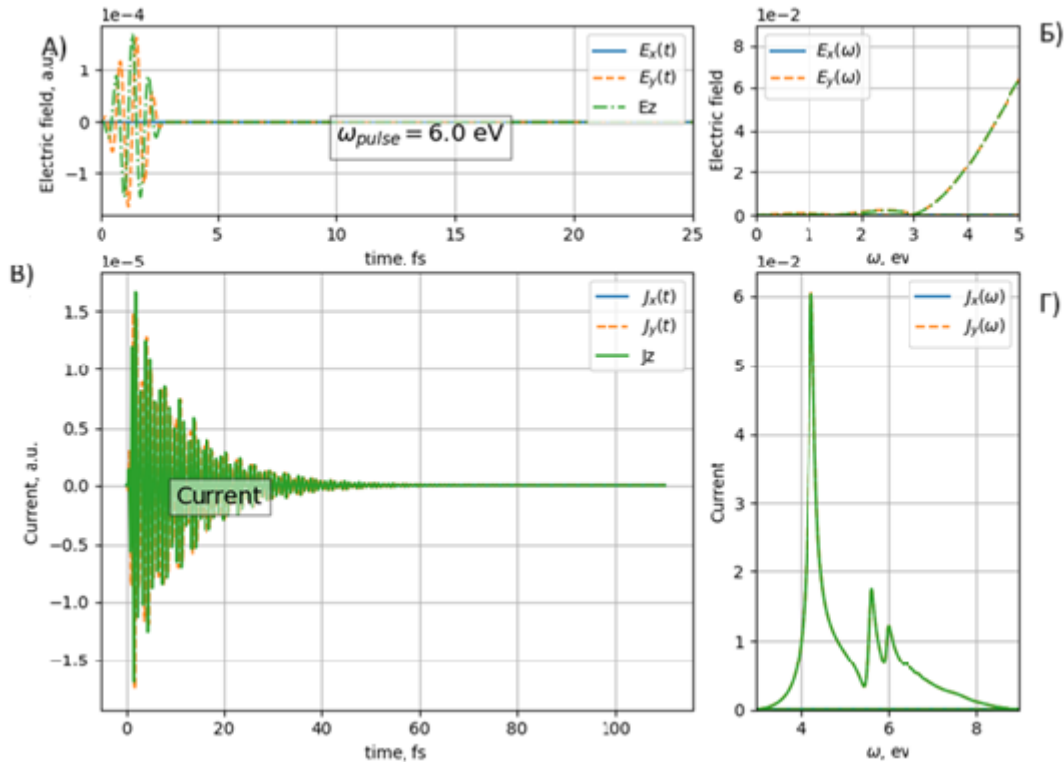


Рис. 3. а) Временная зависимость электрического поля накачки. б) Фурье-образ поля. в) Генерируемый ток в системе. г) Фурье-образ тока, соответствующий спектру поглощения.

На графиках временной зависимости видны осцилляции тока, соответствующие характерным частотам переходов в системе.

#### 3.2. Возбуждение электронов из Валентной Зоны в Зону Проводимости (Val. $\rightarrow$ Cond.)

Этот процесс моделирует отклик hBN на оптическое возбуждение, приводящее к генерации электрон-дырочных пар и формированию валентных экситонов. При учете кулоновского взаимодействия в спектре поглощения, полученном из динамики поляризации, наблюдаются четкие пики ниже края зоны проводимости, соответствующие связанным состояниям электрона и

дырки – валентным экситонам. В расчетах без учета кулоновских сил (NOCOULOMB) эти пики отсутствуют, и спектр отражает лишь межзонную плотность состояний. Это демонстрирует фундаментальную роль кулоновского притяжения в формировании экситонных особенностей оптического отклика.

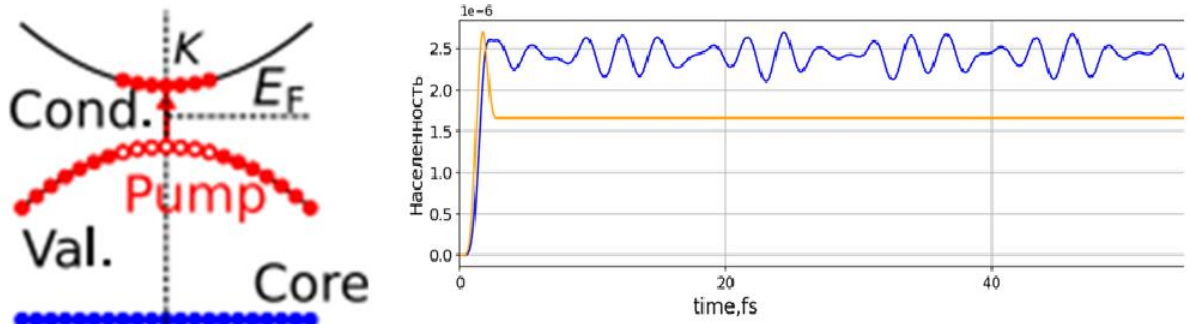


Рис 4. Переход электронов из валентной зоны в зону проводимости и концентрация возбужденных носителей в зоне проводимости: сравнение с учетом кулоновского взаимодействия (синяя линия) и без него (оранжевая линия).)

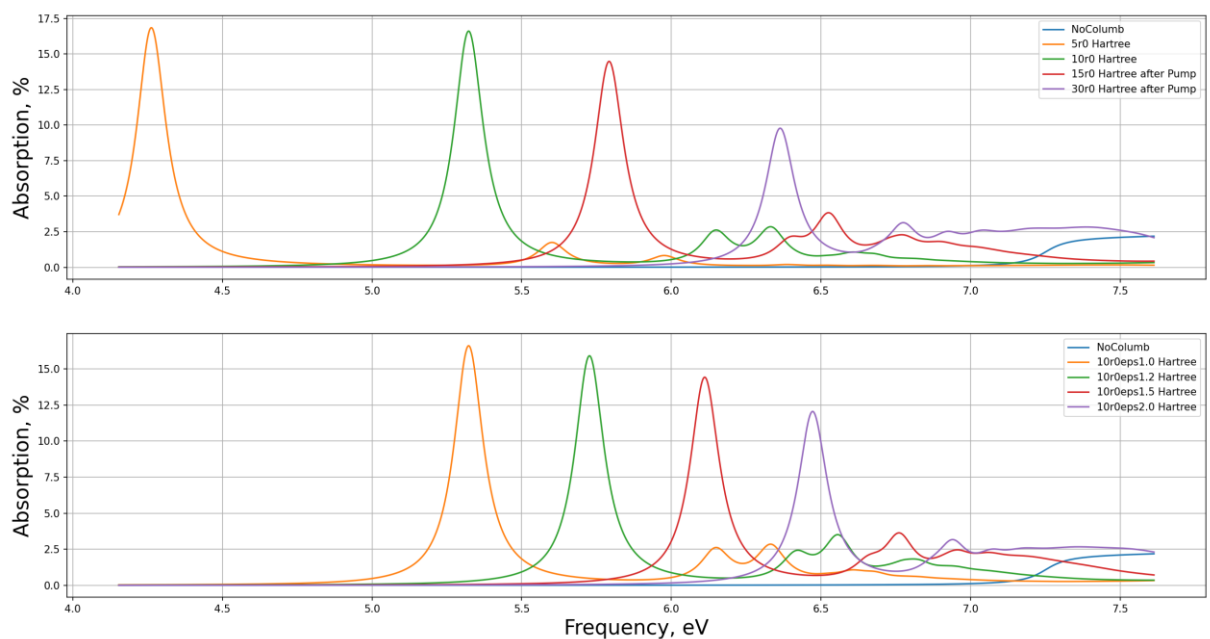




Рис. 5. Влияние диэлектрического окружения на валентные экситоны: а) зависимость спектра поглощения от параметра  $r_0$ ; б) зависимость спектра поглощения от параметра  $\varepsilon$ .

Свойства валентных экситонов, такие как их энергия связи и интенсивность соответствующего пика в спектре, сильно зависят от параметров диэлектрического окружения – длины экранирования  $r_0$  и диэлектрической проницаемости  $\varepsilon$ . Увеличение  $r_0$  приводит к уменьшению энергии связи валентного экситона. Аналогично, увеличение  $\varepsilon$  приводит к увеличению энергии связи экситона и снижению его интенсивности.

### **Анализ динамики концентрации возбужденных носителей**

Динамика концентрации возбужденных носителей в зоне проводимости, представленная на Рис. 4, наглядно иллюстрирует фундаментальное влияние кулоновского взаимодействия на поведение системы после оптического возбуждения. В случае моделирования без учета кулоновских сил (оранжевая линия), после первоначального резкого роста, вызванного импульсом накачки, концентрация носителей быстро спадает до некоторого квазистационарного уровня и далее остается практически неизменной. Такое поведение характерно для системы независимых частиц, где отсутствуют сильные корреляции, способные поддерживать когерентные осцилляции или приводить к формированию связанных состояний.

Напротив, при учете кулоновского взаимодействия (синяя линия) картина меняется. Во-первых, средняя концентрация возбужденных носителей после прохождения импульса накачки оказывается заметно выше, чем в случае. Это связано с тем, что часть энергии системы теперь аккумулируется в связанных экситонных состояниях, которые также вносят вклад в общую картину возбуждения. Во-вторых, и это наиболее яркое отличие, наблюдаются выраженные и длительные осцилляции концентрации носителей. Такие осцилляции являются прямым следствием когерентной динамики в системе, обусловленной кулоновским притяжением между электронами и дырками. Таким образом, кулоновские взаимодействия не только определяют энергетический спектр экситонов (проявляющийся в спектрах поглощения), но и коренным образом влияют на временную эволюцию и когерентность возбужденных состояний в материале.

### 3.3 Возбуждение электронов из Остовной Зоны в Зону Проводимости (Core $\rightarrow$ Cond.)

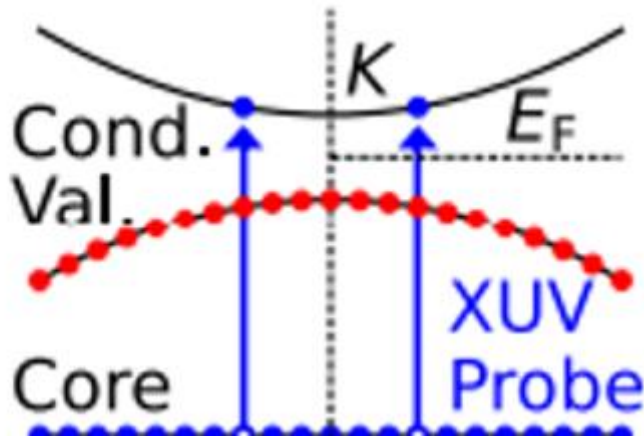


Рис. 6. Переход электронов из остовной зоны , в зону проводимости

Этот процесс моделирует отклик hBN на XUV-возбуждение, приводящее к ионизации остовных уровней и формированию остовных экситонов и дырок.

Параметры диэлектрического окружения  $r_0$  и  $\epsilon$  также влияют на свойства остовных экситонов, хотя степень этого влияния может отличаться от валентных экситонов из-за большей локализации остовной дырки. Общие тенденции схожи: повышение  $R_0$  или  $\epsilon$  увеличивает энергию связи остовного экситона.

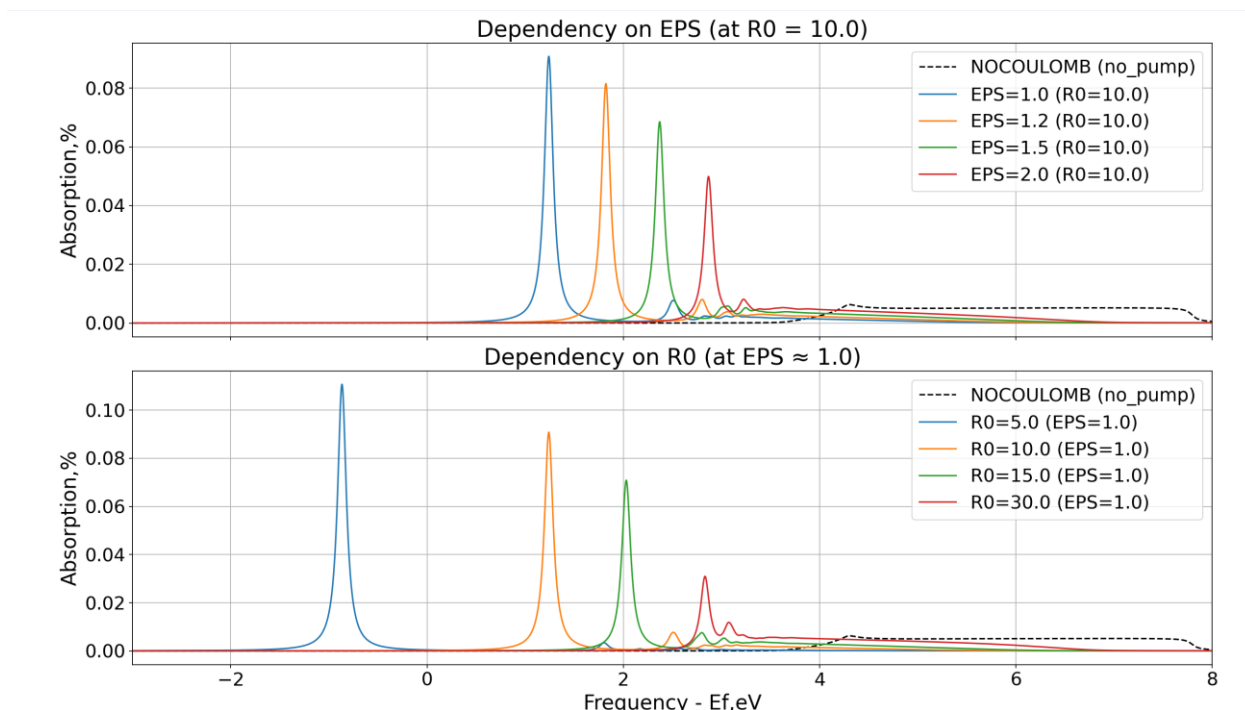


Рис. 7. Влияние диэлектрического окружения на основные экситоны: а) зависимость спектра поглощения от параметра  $\epsilon$ ; б) зависимость спектра поглощения от параметра  $R_0$ .

### Обсуждение значимости:

Полученные результаты подчеркивают, что точный учет кулоновских взаимодействий и эффектов диэлектрического окружения необходим для адекватного описания оптических свойств и ультрабыстрой динамики экситонов в hBN. Моделирование без учета этих факторов (например, в приближении невзаимодействующих электронов) дает существенно иные, неполные результаты, не отражающие экситонную природу возбуждений. Понимание этих эффектов важно для интерпретации экспериментальных данных, полученных методами сверхбыстрой спектроскопии, а также для целенаправленного дизайна оптоэлектронных устройств на основе 2D материалов, где экситонные свойства могут быть настроены путем инженерии диэлектрического окружения.

## Заключение

В данной работе проведено комплексное теоретическое и численное моделирование ультрабыстрой динамики электронов в гексагональном нитриде бора (hBN) с особым акцентом на экситонные эффекты и влияние диэлектрического окружения. Исследования базировались на методах решения уравнений движения в реальном времени, реализованных с использованием программного обеспечения EDUS, для моделирования процессов накачки-зондирования.

### Основные результаты и выводы:

1. Ключевая роль кулоновских взаимодействий:
  - Продемонстрировано, что кулоновское взаимодействие между электронами и дырками является определяющим фактором для формирования экситонных состояний в hBN.
  - Моделирование без учета кулоновских взаимодействий приводит к существенно иным результатам, не отражая появления экситонных пиков и особенностей динамики связанных электрон-дырочных пар.
  - Включение кулоновского взаимодействия приводит к появлению четко выраженных экситонных резонансов в спектрах поглощения и более сложной, замедленной и осциллирующей динамике энергетических потерь, что указывает на формирование связанных когерентных состояний.
2. Значительное влияние диэлектрического экранирования:
  - Эффекты экранирования, описываемые потенциалом Рытовой-Келдыша через параметры эффективной толщины ( $r_0$ ) и диэлектрической проницаемости подложки/окружения ( $\epsilon$ ), оказывают существенное влияние на экситонные состояния.
  - Изменение  $r_0$  и  $\epsilon$  приводит к заметным сдвигам положения и интенсивности экситонных пиков в спектрах поглощения. Усиление экранирования (например, увеличение  $\epsilon$  или уменьшение  $r_0$ ) ослабляет кулоновское притяжение, что модифицирует энергию связи экситонов, смещая пики к более высоким энергиям и уменьшая их интенсивность.

- Динамика релаксации возбужденных состояний также зависит от параметров экранирования.

Таким образом, проведенное исследование подчеркивает критическую важность учета многочастичных кулоновских эффектов и влияния диэлектрического окружения для адекватного описания ультрабыстрых процессов и оптических свойств в двумерных материалах, таких как hBN. Полученные результаты имеют как фундаментальное значение для понимания физики экситонов в 2D системах, так и практическую ценность для интерпретации экспериментальных данных и направленного дизайна оптоэлектронных и фотонных устройств.

## Список литературы

- 1 **Molaei M. J., Younas M., Rezakazemi M.** A comprehensive review on recent advances in two-dimensional (2D) hexagonal boron nitride // *ACS Applied Electronic Materials*. — 2021. — Т. 3, № 12. — С. 5165–5187.
- 2 **Wang G., Chernikov A., Glazov M. M., Heinz T. F., Marie X., Amand T., Urbaszek B.** Colloquium: Excitons in atomically thin transition metal dichalcogenides // *Reviews of Modern Physics*. — 2018. — Т. 90. — № 021001.
- 3 **Zong A., Nebgen B. R., Lin S.-C., Spies J. A., Zuerch M.** Emerging ultrafast techniques for studying quantum materials // *Nature Reviews Materials*. — 2023. — Т. 8. — С. 224–240.
- 4 **Cistaro G., Malakhov M., Esteve-Paredes J. J., Uría-Álvarez A. J., Silva R. E. F., Martín F., Palacios J. J., Picón A.** Theoretical approach for electron dynamics and ultrafast spectroscopy (EDUS) // *Journal of Chemical Theory and Computation*. — 2023. — Т. 19, № 1. — С. 333–348.
- 5 **EDUS** [Электронный ресурс] // *GitHub*. — URL: <https://github.com/anpicon/EDUS>
- 6 **Malakhov M., Cistaro G., Martín F., Picón A.** Exciton migration in two-dimensional materials // *Communications Physics*. — 2024. — Т. 7. — № 196.