مجلة جامعة طرطوس للبحوث والدراسات العلمية_ سلسلة العلوم الأساسية المجلد (١٠) العدد (٢) ٢٠٢٦

Tartous University Journal for Research and Scientific Studies –Basic Sciences Series Vol. (10) No. (2) 2026

(تأثير سماكة الطبقة على طاقة ارتباط البولارون و على كتلته الفعّالة في طبقة بلورية)

د. محمد حسن فاهوود*

د. أصف محسن يوسف**

ياسمين خالد الفتنه***

(تاريخ الإيداع ١١/١١/ ٢٠٢٥ – تاريخ النشر٨/٤/ ٢٠٢٦)

□ ملخّص □

تم في هذا البحث القيام بدراسة نظرية لتأثير سماكة الطبقة المدروسة (الطبقة الوسطى المتواجد بها البولارون) على عبارة الطاقة الأساسية للبولارون المدروس في طبقة بلورية متماثلة المناحي، كما قمنا بإجراء دراسة على قيمة الكتلة الفعّالة للبولارون في جملة مكونة من تماس ثلاث طبقات رقيقة بفرض أن الوسط متماثل$(\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3)$.

الكلمات المفتاحية: البولارون– البولارون السطحي– البولارون الحجمي– الكتلة الفعّالة– طاقة البولارون

*أستاذ في قسم الفيزياء– كلية العلوم – جامعة اللاذقية– سوريا

**أستاذ في قسم الفيزياء –كلية العلوم – جامعة طرطوس– سوريا

***طالبة ماجستير في قسم الفيزياء –كلية العلوم– جامعة اللاذقية – سوريا

مجلة جامعة طرطوس للبحوث والدراسات العلمية_ سلسلة العلوم الأساسية المجلد (١٠) العدد (٢) ٢٠٢٦

Tartous University Journal for Research and Scientific Studies –Basic Sciences Series Vol. (10) No. (2) 2026

(The Effect of Layer On Both Polaron Energy and its Effective Mass on thin Crystal Layer)

Dr.Mohmmad Hassan Fahoud*
Dr.Assef Mohsen Yousef***
Yasmeine khaled Alftnah***

(Received 11/11/2025.Accepted 8/4/2026)

□ABSTRACT □

In this research, we have conducted a theoretetical study of the effect of the thickness of the studied layer (the middle layer in which the polaron is located) on the basic energy expression qf studied polaron in an isotopic crystal layer, we have also conducted a study of effect the thickness of this layer on the value of the effective mass of the polaron in asystem consisting of three thin layer in contact. assuming that the medium surrounding the layer on the both sidesis summetrical $(\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3)$

Keywords: Polaron- Valumetrical Polaron- Surface Polaron- Effective mass- Enegy of Polaron

*Prof at department- faculty of sciences- Lattakia university-Syria.

** Prof at department- faculty of sciences- Tartous university-Syria.

***Master student at department-faculty of sciences- Lattakia- university- Syria

١- مقدمة:

أصبحت في الوقت الحالي دراسة المواد على شكل أفلام رقيقة إحدى أهم الوسائل المناسبة لمعرفة، وتحديد خصائص هذه المواد، الفيزيائية منها والكيميائية، والتي يصعب الحصول على خواصها و هي على هيئتها الطبيعية، حيث يكمن الفرق الجوهري بين المادة في حالتها الصلبة عنها على شكل طبقات رقيقة في السماكة، حيث في الحالة الصلبة عموماً نهمل تأثير الحدود الفاصلة(الطبقات الفاصلة) في الخصائص ولكن في حالة الطبقات الرقيقة يكون العكس تماماً فتأثير سماكة الطبقة، والحدود الفاصلة يكون له دور جوهري، كلما قلّت السماكة زاد تأثير الحدود في الخصائص الفيزيائية للمادة، و تعتبر تقنية الطبقات الرقيقة من أهم التقنيات التي سيطرت على أغلب الميادين العلمية، والصناعية أهمها: الإلكترونات الضوئية، والخلايا الشمسية وغيرها كثير[1].

تندرج دراسة البولارونات،و خصائصها من ضمن دراسة تقنية الأفلام الرقيقة، على الرغم من أن مفهوم البولارون تم تقديمه عام 1933م من قبل لانداو[2] إلّا أن الحل الدقيق لمسألة البولارون لايزال بعيد المنال، لذلك يظل البحث عن البولارونات و خصائصها مجالاً بحثياً نشطاً للغاية حتى يومنا هذا، فما هي البولارونات؟.

٢- مفهوم البولارون: Polaron

يمكن في بلورة نموذجية مثل (المجموعة IV و المجموعة I IIV انصاف نواقل) يمكن أن توصف الإلكترونات، و الثقوب بتقريب ممتاز، على فرض أنها تتحرك في البلورة و الذّرات مجمّدة في المكان، يمكن للإلكترونات و الثقوب أن تتبعثر على الفونونات بعيداً، و لكن عندما لاتوجد فونونات (درجة الحرارة منخفضة جداً) فإنّ كل الإزاحات الأيونية تهمل عند وصف انتقال الإلكترون والثقب لكن هذا التقريب غير كافٍ في البلورات العالية القطبية (مثل أنصاف النواقل II-VI، الهاليدات القلوية، الأوكسيدات ...)حيث يحدث تفاعل كولوم بين إلكترون الناقلية وأيون الشبكة ينتج زوج إلكترون –فونون قوي (Strong –electron –phonon cypling)، في هذه الحالة حتى بدون وجود فونونات حقيقية فإن الإلكترون المحاط بغيمة من الفونونات الإفتراضية يسحب الأيونات الموجبة إليه،و يدفع السالبة بعيداً، يمكن معالجة الفونونات الإفتراضية، و الإلكترون معاً كجسيمة مركبة جديدة تدعى بولارون (Polaron) ، يمكن بشكل مماثل لوصف بولارون الإلكترون وصف بولارون الثقب، و عليه يكون تعريف البولارون على أنه إلكترون أو ثقب محتبس بشحنات الإستقطاب في الجزيئات المجاورة[3].

٣- أهمية البحث وأهدافه:

يعد أهم اتجاهات الدراسة النظرية من الجمل متعددة الطبقات هو دراسة ظاهرة توضع حاملات الشحنة في مستوي التماس لطبقات مختلفة، حيث مازال الاهتمام بدراسة البولارون مستمراً حتى يومنا هذا نظراً لإرتباطه الواضح بأنصاف النواقل، و البلورات القطبية، لذلك فإنّ هذا العمل يهدف إلى إيجاد تأثير سماكة الطبقة على طاقة البولارون في جملة متعددة الطبقات منتهية السماكة، و أيضا إيجاد عبارة طاقة البولارون بدلالة سماكة الطبقة و تأثير هذه السماكة على الكتلة الفعّالة للبولارون في الطبقة المدروسة، أمّا دراسة تأثير البولارون على خصائص اللأفلام الرقيقة فقد تم من خلال دراسة معاملات هذه الأفلام على طاقة حاملة الشحنة لأن هذه الدراسة هي الغاية بغية إمكانية صناعة أفلام رقيقة تساعد في الصناعات الإلكترونية.

٤- طرق البحث و مواده:

نستخدم في هذا العمل التقريب الأديباتي، حيث نعتبر الحركة بإتجاه المحور Z بطيئة،و ذلك من أجل دراسة حالة الإرتباط الضعيف بين الإلكترون،والفونون، إضافةً لطريقة لي– لو و باينز (L.L.P) لدراسة الحركة

الطولية للإلكترون، انطلقنا في بداية هذا البحث من علاقة الهاملتونيان الكلي للجملة مع التأثير المتبادل مع الإهتزازات السطحية والحجمية.

٥- النتائج والمناقشة:

يُعطى لندرس حالة البولارون في طبقة بلورية أيونية منتهية السماكة، لتبسيط العمليات الرياضية، نفرض أن الوسط المحيط بالطبقة من الجانبين متماثل $(\varepsilon_1 = \varepsilon_3 = \varepsilon_2)$.

الهاملتونيان الكلي للجملة (الإلكترون في منطقة الناقلية $(k = 2$ مع التأثير المتبادل مع الإهتزازات البصرية(الحجمية والسطحية) بالصيغة الأتية:

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H^s}_{ph} + \hat{H^v}_{ph} + \hat{H^s}_{int} + \hat{H^v}_{int} + V_{sA} \quad (1)$$

حيث $\hat{H}_e$ الطاقة الحركية للإلكترون

$$\hat{H}_e = \frac{\hat{p}_\parallel{}^2}{2m^*} + \frac{\hat{p}_z{}^2}{2m^*} \quad (2)$$

$\frac{\hat{p}_\parallel{}^2}{2m^*}$ مؤثر الطاقة الحركية للإلكترون في مستوي الطبقة xy .

$\frac{\hat{p}_z{}^2}{2m^*}$ مؤثر الطاقة الحركية للإلكترون باتجاه المحور العمودي z على مستوي الطبقة

$\hat{H^v}_{ph}, \hat{H^s}_{ph}$ طاقة الفونونات السطحية والحجمية

$$\hat{H^s}_{ph} = \sum_{\overrightarrow{Qj}} \hbar\omega_{s_j} a^+{}_{Q_j} a_{Q_j} \qquad . \ J=1,2 \quad (3)$$

$$\hat{H^v}_{ph} = \sum_{\vec{q}} \hbar\omega_0 a^+{}_{\vec{q}} a_{\vec{q}} \quad (4)$$

a_{Q_j} و $a^+{}_{Q_j}$ مؤثري فناء وتوليد الفونونات في المستوي السطحي.

$a_{\vec{q}}$ و $a^+{}_{\vec{q}}$ مؤثري فناء وتوليد الفونونات من أجل الطبقة.

$\omega_0 = \left(\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_\infty}\right)^{1/2} \omega_{To}$ تردد الإهتزاز الضوئي (البصري) الطولي.

ω_{To} تردد الإهتزاز الضوئي العرضي.

ε_0 ثابتة العازلية الكهربائية السكونية.

ε_∞ ثابتة العازلية الكهربائية اللاعطالية.

$\hat{H^v}_{int}, \hat{H^s}_{int}$ يصفان التأثير المتبادل بين الإلكترونات مع الفونونات السطحية والحجمية على الترتيب و يعطيان بالصيغتين الآتيتين [4]:

$$\hat{H^s}_{int} = \sum_{\vec{Q}_1} C_{\vec{Q}_1} ch(\vec{Q}_1 z) e^{i\vec{Q}_1\vec{\rho}} \left(a_{\vec{Q}_1} + a^+{}_{Q_1}\right) + \sum_{\vec{Q}_2} C_{\vec{Q}_2} sh(Q_2 z) e^{i\vec{Q}_2\vec{\rho}} \left(a_{\vec{Q}_2} + a^+{}_{\vec{Q}_2}\right) \quad (5)$$

حيث:

$$\hat{H^v}_{int} = \sum_{\vec{q}_n} C\left[\sum_{m=2,4,6..} \frac{e^{i\vec{q}n\vec{\rho}} \sin\left(\frac{m\pi}{d}z\right)}{\left(q^2{}_n + \left(\frac{m\pi}{d}\right)^2\right)^2} (a_m(\vec{q}_n) + a^+{}_m + \sum_{m=1,3,5..} \frac{e^{i\vec{q}n\vec{\rho}} \sin\left(\frac{m\pi}{d}z\right)}{\left(q^2{}_n + \left(\frac{m\pi}{d}\right)^2\right)^2} (a_m(\vec{q}_n) + {} + a^+{}_m(\vec{q}_n))\right] \quad (6)$$

$$|C|^2 = \frac{4\pi\alpha(\hbar\omega_0)^2}{V\beta_0} \quad (7)$$

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar}\left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0}\right)\left(\frac{m^*}{2\hbar\omega_0}\right)^{1/2}, \beta_0 = \left(\frac{2m^*\omega_0}{\hbar}\right)^{1/2} \quad (8)$$

$a^+{}_m, a_m$ مؤثرات فناء وتوليد فونونات حجمية، $\vec{q}_n$ المتجه الموجي للفونون الحجمي، $\vec{\rho}$ متجه يعين الإلكترون في المستوي xy (مستوي الطبقة).

e شحنة الإلكترون.

V حجم البلورة.

ويُعطى كمون التأثير الذاتي للجملة المدروسة [5](جملة إلكترون–فونون) بالعلاقة:

$$V_{SA}(z) = \frac{e^2\delta}{\bar{\varepsilon_2}}\left[\frac{1}{2\gamma\delta d} ln\frac{1}{1-\delta^2} + \int_0^\infty \frac{e^{\gamma_2\eta d} ch(2\gamma_2\eta z)d\eta}{e^{2\gamma_2\eta d} - \delta^2}\right] \quad (9)$$

حيث:

$$\delta = \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon}{\varepsilon_2 + \varepsilon}$$

$\varepsilon_2, \varepsilon$ ثابتي العازلية الكهربائية للوسط المحيط والطبقة المدروسة على الترتيب.

η : العدد الموجي ، يستخدم عند الإنتقال من طور الإحداثيات الديكارتية باستخدام تحويل فورييه في الأوساط المتجانسة.

$\gamma = \left(\frac{\varepsilon_\perp}{\varepsilon_\parallel}\right)^{1/2}$ معامل أنزتروبية العازلية الكهربائية في الأوساط غير المتجانسة.

–لندرس أولاً حالة ارتباط ضعيفة لإلكترون–فونون:

تحل المسألة في التقريب الأديباتي عندما تعتبر حركة الإلكترون بإتجاه المحور z بطيئة، و بالتالي يمكننا كتابة المؤثر الهاملتوني(1) على شكل مجموع حدين طولي وعرضي:

$$\hat{H} = \hat{H}_\parallel + \hat{H}_\perp \quad (10)$$

حيث:

$$\hat{H}_\perp = \frac{\hat{p}^2{}_z}{2m^*} + V_{SA}(z) \quad (11)$$

و أن: $\hat{H}_\parallel = \hat{H} - H_\perp$ يصف الحركة في المستوي (xy).

–لدراسة الحركة الطولية للإلكترون نستخدم طريقة لي،لو وباينز [5]:

حيث نطبق التحويلين الآتيين:

$$U_1 = \exp(\vec{k}_\parallel - \textstyle\sum_{\vec{q}_\parallel} a^+{}_{q_\parallel} a_{q_\parallel} q_\parallel - \sum_{\vec{Q}_j}(a^+{}_{\vec{Q}_j} a_{\vec{Q}_J} \vec{Q}_j)\,\rho) \quad (12)$$

$$U_2 = \exp(\textstyle\sum_{\vec{q}_\parallel} a^+{}_{q_\parallel} f_{q_\parallel} - a^+{}_{q_\parallel} f^*{}_{q_\parallel} + \sum_{\vec{Q}_j}(a^+{}_{\vec{Q}_j} f_{\vec{Q}_J} - a_{\vec{Q}_j} f^*{}_{\vec{Q}_J}) \quad (13)$$

يستفاد من تطبيق التحويل U_1 اختصار $\vec{\rho}$ (متجه نصف القطرللإلكترون في المستويxy)، و يحقق التحويل U_2 نقل مؤثري البناء والهدم إلى f_qوf_{Q_j} بالترتيب ويعطيان بالصيغتين الآتيتين:

$$f_q^n = -\frac{C_q}{\left[\hbar\omega_0+\frac{\hbar^2 q_\parallel{}^2}{2m^*}\right]}\begin{Bmatrix}\times \cos\left(\frac{n\pi}{d}z\right) \; ; n = 1,3,5,\dots \\ \times \sin\left(\frac{n\pi}{d}z\right) \; ; n = 2,4,6,\dots\end{Bmatrix} \quad (14)$$

$$f_{Q_j} = -\frac{C_{Q_j}}{\left[\hbar\omega_{sj}+\frac{\hbar^2 Q_{Q_j}{}^2}{2m^*}\right]}\begin{Bmatrix}\times ch(Q_j.d) \; ; j = 1 \\ \times sh(Q_j.d) \; ; j = 2\end{Bmatrix} \quad (15)$$

لندخل الرمز:

$$H^* = U_2^{-1}U_1^{-1}H_\parallel U_1 U_2 = H_0^* + H_1^* + H_2^* \quad (16)$$

حيث:

$$H_0^* = \frac{\hbar^2}{2m^*} + \sum_{\vec{Q}_j} a^+{}_{Q_j} a_{Q_j}\left(\hbar\omega_{s_j} + \frac{\hbar^2 Q_j}{2m^*}\right) + \frac{\hbar^2 k^2{}_\parallel}{2m^*} + \sum_{\vec{q}_\parallel} a^+{}_{q_\parallel} a_{q_\parallel}\left(\hbar\omega_0 + \frac{\hbar^2 q^2{}_\parallel}{2m^*}\right)$$
$$- \sum_{\vec{q}_\parallel}\Bigg(\sum_{n=1,3,5..}\frac{\left|C^n{}_q\right|^2 \cos^2\left(\frac{n\pi}{d}z\right)}{\hbar\omega + \frac{\hbar^2 q^2{}_\parallel}{2m^*}} + \sum_{n=1,3,5..}\frac{\left|C^n{}_q\right|^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{d}z\right)}{\hbar\omega + \frac{\hbar^2 q^2{}_\parallel}{2m^*}}$$
$$- \sum_{\vec{Q}_j}\frac{\left|C^n{}_{Q_j}\right|^2 ch^2(Q_1 z)}{\hbar\omega_{s1} + \frac{\hbar^2 Q^2{}_1}{2m^*}} - \sum_{\vec{Q}_j}\frac{\left|C^n{}_{Q_j}\right|^2 sh^2(Q_1 z)}{\hbar\omega_{s1} + \frac{\hbar^2 Q^2{}_1}{2m^*}} \quad (17)$$

$$H_1{}^* = \frac{\hbar^2}{m^*}\sum_{\vec{q}_\parallel}\left(a^+{}_{q_\parallel} a_{q_\parallel} + a_{q_\parallel} f_{q_\parallel}{}^* + a_{q_\parallel}{}^+ f_{q_\parallel}\right)\vec{k}_\parallel \vec{q}_\parallel - \frac{\hbar^2}{m^*}\sum_{\vec{Q}_j}\left(a^+{}_{Q_j} a_{Q_j} + a_{\vec{Q}_j} a_{\vec{Q}_j}{}^+\right)\vec{k}_\parallel \quad (18)$$

$\vec{k}_\parallel$ المتجه الموجي في مستوي الطبقة(xy)

يعطي $H^*{}_2$ التأثير المباشر بين الفونونات السطحية والحجمية، سيتم إهمال هذا الحد لصغره، وسنعتبر $H_1{}^*$ مؤثر اضطراب، حيث نحصل باستخدام نظرية الإضطراب من المرتبة الثانية على:

$$\Delta E^{ph} = -\sum_{\vec{q}_j}\frac{|\langle\psi|H_1|\psi\rangle|^2}{\left(\hbar\omega_j+\frac{\hbar^2 q_j{}^2}{2m^*}\right)} \; ; j = 1,2,3 \quad (19)$$

وأنّ : $\omega_1 = \omega_{s1}, \omega_2 = \omega_{s2}, \omega_3 = 0 \quad , \quad \vec{q}_3 = \vec{q}_\parallel$ ، و $\vec{q}_1 = \vec{Q}_1$

$\vec{q}_2 = \vec{Q}_2$

بالإنتقال في العلاقة(19) من الجمع إلى التكامل نحصل على:

$$\Delta E^{ph} = -\frac{\hbar^2 k_\parallel{}^2}{2m^*}\left\{\frac{8}{d}\alpha_v L(z) + 2[M_1(z) + M_2(z)]\right\} \quad (20)$$

حيث:

تمثل الكمية ΔE^{ph} التصحيح في طاقة البولارون الناتج عن مؤثر الهاملتوني للفونونات السطحية والحجمية.

$$L(z) = \sum_{n=1,3,5,\ldots} ln\left(\frac{n\pi}{\beta_0 d}\right) cos^2\left(\frac{n\pi}{d}z\right) + \sum_{n=2,4,6,\ldots} ln\left(\frac{n\pi}{\beta_0 d}\right) sin^2\left(\frac{n\pi}{d}z\right) \quad (21)$$

$$M_j(z) = \int_0^\infty dQ_j.\tilde{\alpha}_{s_j}(Q_j)\ \frac{\beta_{s_j}Q^2{}_j}{\left(Q^2{}_j+\beta^2{}_{s_j}\right)^3}\begin{Bmatrix}\times ch^2 Q_j z & ,j=1\\ \times sh^2 Q_j z & ,j=2\end{Bmatrix} \quad (22)$$

و أن:

$$\tilde{\alpha}_{s_1} = \frac{e^2}{\hbar}\left(\frac{1}{\varepsilon_\infty+\varepsilon cth\left(\frac{Qd}{2}\right)} - \frac{1}{\varepsilon_0+\varepsilon cth\left(\frac{Qd}{2}\right)}\right)\left(\frac{m^*}{2\hbar\omega_{s_1}}\right)^{1/2}\frac{1}{ch^2\left(\frac{Qd}{2}\right)} \quad (23)$$

$$\tilde{\alpha}_{s_2} = \frac{e^2}{\hbar}\left(\frac{1}{\varepsilon_\infty+\varepsilon cth\left(\frac{Qd}{2}\right)} - \frac{1}{\varepsilon_0+\varepsilon cth\left(\frac{Qd}{2}\right)}\right)\left(\frac{m^*}{2\hbar\omega_{s_2}}\right)^{1/2}\frac{1}{ch^2\left(\frac{Qd}{2}\right)} \quad (24)$$

$$H^*{}_0 = -\sum_j \int_0^\infty \tilde{\alpha}_{s_j}\hbar\omega_{s_j}\xi_j(zQ_j)dQ_j - \alpha\hbar\omega_0[\eta_1(z)-\eta_2(z)] \quad (25)$$

$$\xi_j(z,Q_j) = \frac{\beta_{s_j}}{\left(Q^2{}_j+\beta^2{}_{s_j}\right)}\begin{Bmatrix}\times ch^2(Q_j,z)\ ,j=1\\ \times sh^2(Q_j,z)\ ,j=2\end{Bmatrix} \quad (26)$$

$$\eta_i(z) = \frac{4}{d}\sum\left[\left(\frac{n\pi}{d}\right)^2 - \beta^2{}_0\right] ln\frac{n\pi}{\beta_0 d}\begin{Bmatrix} cos^2\left(\frac{n\pi}{d}z\right) & ,n=1,3,5,\ldots\\ sin^2\left(\frac{n\pi}{d}z\right) & ,n=2,4,6,\ldots\end{Bmatrix} \quad (27)$$

و بالتالي يمكن كتابة الهاملتونيان الفعّال (المؤثر) للجملة الكترون –فونون بالصيغة:

$$H_{eff} = \frac{\hbar^2 k_\parallel{}^2}{2m^*{}_{eff}} + \frac{P^2{}_z}{2m^*} + W_{eff}(z) \quad (28)$$

حيث:

$$\mathrm{W_{eff}(z) = V_{SA}(z) + V^s{}_{ph}(z) + V^\upsilon{}_{ph}(z)} \quad (29)$$

$$\mathrm{V^s{}_{ph}(z)} = -\sum_{j=1,2}\int_0^\infty \alpha_{sj}(Q)\hbar\omega_{sj}(Q)\xi_j(z,Q_j)dQ \quad (30)$$

$$\mathrm{V^\upsilon{}_{ph}(z)} = -\alpha_\upsilon\hbar\omega_0[\eta_1(z)+\eta_2(z)] \quad (31)$$

$$m^*{}_{eff} = \frac{m^*}{1-\frac{8}{d}\alpha_\upsilon L(z) + 2[M_1(z)+M_2(z)]} \quad (32)$$

حالة خاصة: إذا فرضنا أن أحد السطحين للطبقة يسعى إلى اللانهاية، ففي الحالة الحدية $Z \gg \beta_0^{-1}\left(\sim\beta_{sj}^{-1}\right)$ فإنالإلكترون يكون في عمق الحجم للطبقة، ونحصل من (28) على

$$H_{eff} = \frac{\hbar^2 {k_\parallel}^2}{2{m^*}_{eff}} + \frac{{P^2}_z}{2m^*} + \frac{e^2(\varepsilon_0 - \varepsilon)}{4z\varepsilon_0\left((\varepsilon_0 + \varepsilon)\right)} - \frac{\pi}{2}\alpha_v \hbar\omega_0 \qquad (33)$$

و:

$$ {m^*}_{eff} = \frac{m^*}{1 - \frac{\pi}{8}\alpha_v} \qquad (34)$$

الكتلة المعبر عنها في العلاقة(٣٤) تأخذ بعين الإعتبار فقط تأثير الإهتزاز الحجمي من خلال معامل التأثير المتبادل α_v .

تصف المعادلتان(33),(34) حالة البولارون الحجمي، حيث أن الطاقة الخاصة والكتلة الفعّالة يعتمدان فقط على التأثير بين الإلكترون والفونونات البصرية الطولية، فعندما تتحقق المساواة $Z \ll \beta_{sj}^{-1}$فإن:

$$H_{eff} = \frac{\hbar^2 {k_\parallel}^2}{2{m^*}_{eff}} + \frac{{P^2}_z}{2m^*} + \frac{e^2(\varepsilon_0 - \varepsilon)}{4z\varepsilon_0\left((\varepsilon_0 + \varepsilon)\right)} - \frac{\pi}{2}\alpha_s \hbar\omega_s \qquad (35)$$

$$ {m^*}_{eff} = \frac{m}{1 - \frac{\pi}{8}\alpha_s} \qquad (36)$$

الكتلة المعبر عنها في العلاقة(٣٦) تأخذ بعين الإعتبار فقط تأثير الإهتزاز السطحي من خلال معامل التأثير المتبادل α_s .

يصف H_{eff} في هذه الحالة البولارون السطحي، وينتج من (36) أنه عندما $Z \ll \left(\beta^{-1}{}_{sj}\right)$ فإن مساهمة الإهتزاز الحجمي في H_{eff} يساوي الصفر.

وبأخذ القيمة الوسطى للهاملتونيان في (28) على التابع الموجي:

$$\psi(z) = C\left(\frac{d^2}{4} - z^2\right) ch\beta z \qquad (37)$$

و بوضع $\vec{k}_\parallel = 0$ نحصل على طاقة البولارون في الحالة الأساسية بالصيغة:

$$E_p = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m^* d^2} + \Delta E_{SA}^{Pl} - \Delta E_{SA}^{ph,s} - \Delta E_{SA}^{ph,v} \qquad (38)$$

يعبر الحد الأولي في العلاقة(38) عن الطاقة الحركية العرضية (باتجاه المحورz) للإلكترون، و ${\Delta E_{SA}}^{pl}$ طاقة التأثير الذاتي وتساوي إلى:

$$\Delta E_{SA}^{Pl} = \frac{e^2\beta}{\varepsilon_\infty D}\int_0^\infty \frac{dy}{(e^{2y}-\delta_\infty^2)}\left[\delta_\infty^2 + e^y\delta_\infty \frac{\pi^2 shy}{y(x^2+y^2)}\right] \tag{39}$$

حيث: $D=\frac{\beta_0 d}{2}$ و $\Delta E_{SA}^{ph,s}$ طاقة التأثير المتبادل بين الإلكترون والإهتزازات السطحية للطبقة:

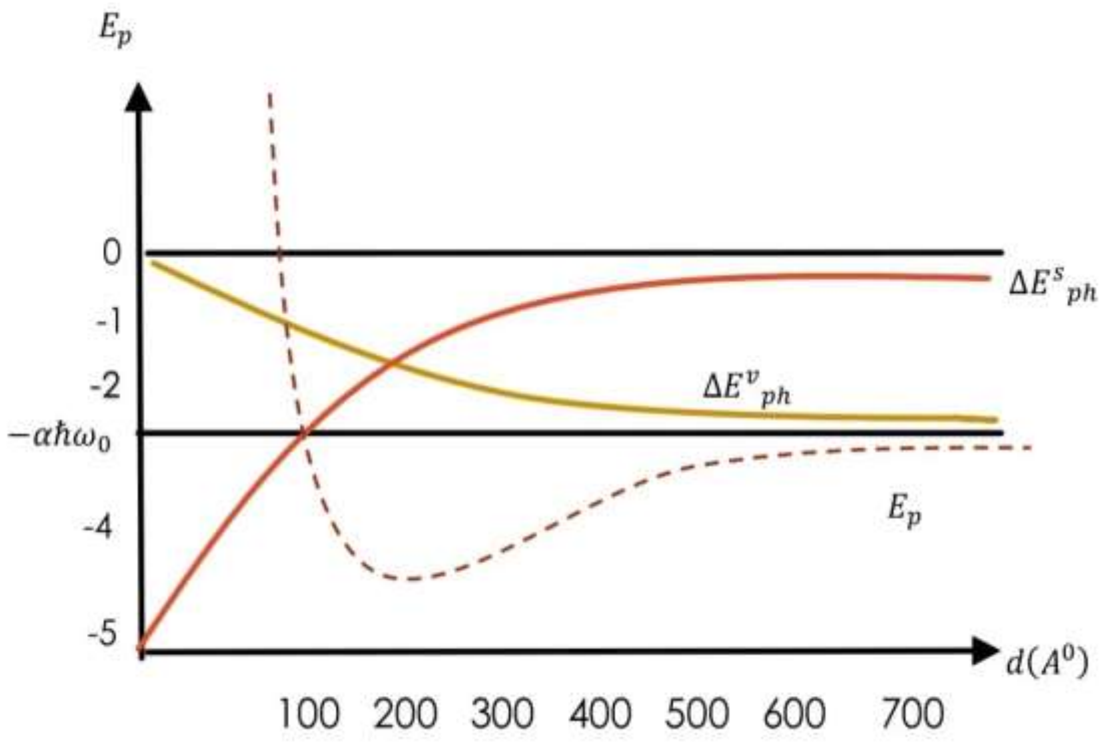
$$\Delta E_{SA}^{ph,s} = \frac{e^2\beta_0}{4D}\int_0^\infty \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty thy+\varepsilon} - \frac{1}{\varepsilon_0 thy+\varepsilon}\right).\frac{(2y(\pi^2+4y^2)+\pi^2 sh2y)}{2y(\pi^2+4y^2).(1+\frac{\omega_0}{\omega_{s1}}\frac{y^2}{D^3})}\frac{thy}{ch^2y}dy$$

$$+\frac{e^2\beta_0}{4D}\int_0^\infty \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty+\varepsilon thy} - \frac{1}{\varepsilon_0+\varepsilon thy}\right).\frac{(2y(\pi^2+4y^2)+\pi^2 sh2y)}{2y(\pi^2+4y^2).(1+\frac{\omega_0}{\omega_{s1}}\frac{y^2}{D^3})}\frac{1}{ch^2y}dy$$

$$\Delta E_{SA}^{ph,v} = \frac{e^2\beta_0}{2D}\left(\frac{1}{\varepsilon_\infty}-\frac{1}{\varepsilon_0}\right)\left\{\sum_{n=1,3,5,\ldots}\frac{1}{(1-{\alpha_n}^2)}ln(\alpha_n) + \left\{\sum_{n=2,4,6,\ldots}\frac{1}{(1-{\alpha_n}^2)}ln(\alpha_n)+\right\}\right\} \tag{40}$$

حيث:

$$\alpha_n = \frac{n\pi}{2D}$$



الشكل(1): يبين علاقة طاقة البولارون ضعيف الإرتباط في طبقة بلورية من زرنيخد الغاليوم GaAs قطبية

$\Delta E_{SA}^{ph,s}$ طاقة التأثير المتبادل بين الالكترونات مع الفونونات السطحية للطبقة(اهتزاز سطحي)

$\Delta E_{SA}^{ph,v}$طاقة التأثير المتبادل بين الإلكترون مع الإهتزاز الحجمي.

معاملات الجملة: $\frac{m^*}{m}=$ 0.07 , $\varepsilon = 10$, $\hbar\omega_0 = 0.038\ eV$, $\varepsilon_0 = 12.83$, $\varepsilon_\infty = 10.9$

يوضح الشكل(١) مايلي:

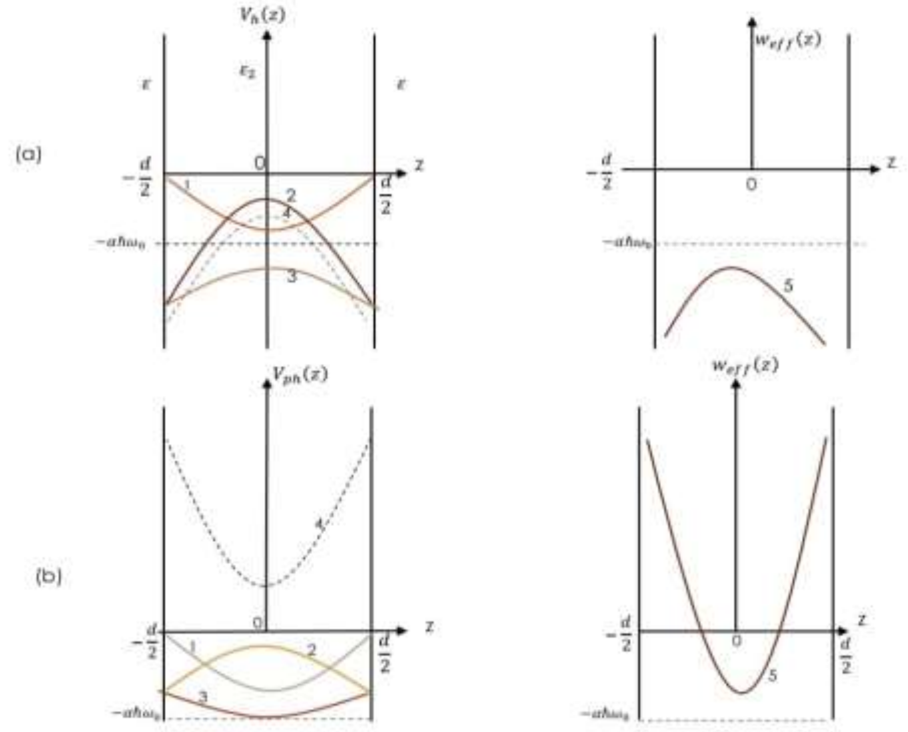
أ)ينقص مساهمة طاقة التأثير المتبادل بين الإلكترون والفونونات السطحية ΔE_{SA}^{s}مع ازدياد السماكة للطبقة، لأن الإلكترون المدروس (البولارون) يصبح في عمق الطبقة مع ازدياد سماكتها ويقل التأثير المتبادل بينه وبين الإهتزاز السطحي في هذه الحالة.

ب) تزداد ΔE_{SA}^{v} مساهمة طاقة التأثير المتبادل بين البولارون والإهتزاز الحجمي (الفونونات الحجمية) مع ازدياد d سماكة الطبقة، فيزداد حجمها وتزداد مساهمة طاقة الإهتزازات الحجمية ΔE_{SA}^{v}.

ت) تسعى الطاقة الكلية E_p للبولارون بالمحصلة إلى القيمة $-\alpha\hbar\omega_0$) الطاقة الخاصة للبولارون في بلورة حجمية (ضخمة)) مع ازدياد السماكة d.

نناقش العلاقة (28) من أجل طبقة رقيقة$(Qd \ll 1)$: ، بنشر تابعي الجيب والتجيب وفق z والإكتفاء بالنشر حتى المرتبة الثانية نحصل على:

$$V_{SA}{}'(z) = A_1 + A_2 z^2 \qquad (41)$$



الشكل(2)

يعبر الشكل(٢) عن تغير طاقة الكمون بدلالة الإحداثية z، العمودي على مستوى الطبقة($k = 2$) وذلك في حالتين:

- الحالة a): من أجل ثابتة العازلية الكهربائية ε_2 للطبقة المدروسة (التي تحتوي على الإلكترون) $k = 2$، أكبر بكثير من ثابتة العازلية الكهربائية للطبقتين$k = 1$، $k = 3$ المجاورتين $\varepsilon_2 \gg \varepsilon$، حيث

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_3 = \varepsilon$$

- الحالةb): نفس المنحنيات البيانية الموجودة في الحالة a) ولكن هذه المرة من أجل $\varepsilon_2 \ll \varepsilon$.

- أمّا بالنسبة للمنحنيات :

يعبر المنحني (١) V_{ph}^{v} الكمون الحجمي للفونونات الحجمية، تم رسمه باستخدام العلاقة (٣١) ، يبين المنحني (١) أنّ الكمون الحجمي يسعى إلى الصفرعند سطحي الطبقة أي عندما $z \to \pm\frac{d}{2}$ ، ويقترب من $-\alpha\hbar\omega_0$ في مركز الطبقة، ويعبر المنحني (٢) عن V_{ph}^{s} كمون الفونونات السطحية، يسعى إلى قيمة معينة(أقل من$-\alpha\hbar\omega_0$) عند حدود الطبقة وتقل قيمته في مركز الطبقة، وقد تم رسمه باستخدام العلاقة(٣٠)، ويعبر المنحني(٣) عن مجموع الكمونين الحجمي والسطحي للبولارون، أما المنحني(٤) يعبر عن الكمون الذاتي للإلكترون باعتباره شحنة نقطية، تم الحصول على عبارة الكمون الذاتي $V_{SA}(z)$ من حل معادلة بواسون، يتبين من هذا المنحني أنّ الكمون الذاتي للإلكترون يسعى إللى اللانهاية عند حدود

الطبقة2 $k = 2$ (أي عندما $(z \to \pm\frac{d}{2}$)، نتج ذلك بسبب اعتبارنا للإلكترون في الطبقة2 $k = 2$ شحنة نقطية بينما في الواقع الإلكترون في الوسط المادي(في الطبقة يعتبر شبه جسيم له نصف قطر) لذلك وللتخلص من هذا التباعد تمت دراسته كشبه جسيم (بولارون) له نصف قطر R_{pl} وبذلك تم التخلص من التباعد عند حدود الطبقة كما وجدنا في المنحنيين (١) و(٢).

أمّا المنحني (٥) فيعبر عن$W_{eff}(z)$ الكمون الفعّال الكلي حسب العلاقة(٢٩)، هذا وقد تم رسم المنحنيات من (١) حتى (٥) في الحالة b) لنفس المقادير الفيزيائية ولكن عندما ε $\ll \varepsilon_2$

نجد من مقارنة بسيطة بين الحالتين a) و (b) الدور الكبير لتأثير معامل العازلية الكهربائية $\varepsilon_1 , \varepsilon_2 , \varepsilon_3$. وسيتم شرح دور معامل العازلية الكهربائية بشكل أكثر وضوحاً من أجل طاقة البولارون الشكل(٣).

A_2،A_1 يعينان بالعلاقتين:

$$A_1 = \frac{e^2}{\bar{\varepsilon}\gamma^2 d} ln\frac{\bar{\varepsilon}_2}{\bar{\varepsilon}_1}\left(1-\frac{\bar{\varepsilon}_1}{\bar{\varepsilon}_2}\right) \tag{42}$$

$$A_2 = \frac{2e^2\delta{\gamma^2}_2}{\bar{\varepsilon}_2}\int_0^\infty \frac{\eta^2 e^{\gamma_2\eta}d\eta}{e^{2\gamma_2\eta d}-\delta^2} \tag{43}$$

و تعطى طاقة الكمون الذاتي للتأثير المتبادل للإلكترون مع الفونونات السطحية والحجمية الطولية بالعلاقة:

$$\acute{V}_{ph}(z) = -B_1 - B_2 z^2 \tag{44}$$

حيث:-

$$B_1 = \int_0^\infty dQ\tilde{\alpha}_{s_1}\frac{\hbar\omega_{s_1}(Q)\beta_{s_1}}{\left({Q^2}_1+{\beta^2}_{s_1}\right)} + \frac{4}{d}\sum_{n=1,3,5,\dots}\left[\left(\frac{n\pi}{d}\right)^2-{\beta_0}^2\right] ln\left(\frac{n\pi}{\beta_0 d}\right) \tag{45}$$

$$B_2 = \sum_{j=1}^{2}\int_0^\infty Q^2 dQ\tilde{\alpha}_{s_j}(Q)\frac{\beta_{s_j}\hbar\omega_{s_j}(Q)}{\left({Q^2}_j+{\beta^2}_{s_j}\right)} + \frac{4\pi^2}{d^3}\left\{\sum_{n=1}^{\infty} n^2\left[\left(\frac{n\pi}{d}\right)^2-{\beta_0}^2\right] ln\left(\frac{n\pi}{d}\right)\right\} \tag{46}$$

بالتعويض من (45) و (42) في (28) (من أجل $\vec{K}_\parallel = 0$) نحصل على:

$$H_{eff} = \frac{{P^2}_z}{2m^*} + (A_1 - B_1) + (A_2 - B_2)z^2 \tag{47}$$

عندما $A_2 > B_2$ ، فإن حل معادلة شرودنغر مع الهاملتونيان (48) تكون معادلة هزاز توافقي، حيث أن سويات طاقته تُعطى بالصيغة:

$$\Delta E_{SA}^{ph} = (A_1 - B_1) + \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) \tag{48}$$

حيث:

$$\omega = \sqrt{\frac{2}{m^*}(A_2 - B_2)} \qquad (49)$$

يجب ملاحظة أنه عند دراسة مسألة التأثير المتبادل بين الإلكترون والفونونات السطحية والحجمية يمكن استخدام طرق مختلفة، فمثلاً عندما يكون التأثير المتبادل بين الإلكترون والفونونات البصرية الطولية ضعيفاً نسبياً، يمكن استخدام نظرية الإضطراب، وعندما يكون قوياً يُفضل استخدام طريقة نظرية الإرتباط القوي،إذ توافق كل طريقة مجالاً معيناً لثابت التأثير المتبادل(إلكترون– فونون)، ولدراسة هذه المسألة يجب اعتماد طريقة تكون مقبولة من أجل قيم مختلفة لثابت الترابط إلكترون– فونون.

تم استخدام مثل هذه الطريقة في[8,6] وهي طريقة لي– لو –وباينز وذلك كما يلي:

يطبق المؤثر الهاملتوني في العلاقة (1) على التحويل القانوني U_1 حيث نتخلص من إحداثيات الإلكترون $\vec{\rho}$ في المستويxy :

$$U_1 = exp\left\{-ia_1\vec{\rho}\sum_{\vec{Q}_j} a^+{}_{\vec{Q}_j}a_{\vec{Q}_j}\vec{Q}_j - ia_2\vec{\rho}\sum_{\vec{q}_\parallel}\vec{q}_\parallel a^+{}_{\vec{q}_\parallel}a_{\vec{q}_\parallel}\right\} \qquad (50)$$

حيثa_1 و a_2 معاملات توافق الحالة الحدية ($a_1 , a_2 \to 0$)استقطاباً قوي الترابط، و توافق الحالة $a_1 = a_2 = 1$ حالة استقطاب وسط بين الترابط القوي والضعيف. في هذه الحالة تُطبق طريقة لي – لو– وباينز.

$$\dot{H} = U_1^{-1}HU_1 = \frac{{P_z}^2}{2m} + \frac{1}{2m^*}\left(\overrightarrow{p_\parallel} - a_1\sum_{\vec{Q}_j} a^+_{\overrightarrow{Qj}}a_{\vec{Q}_j}\vec{Q}_j - a_2\sum_{\vec{q}_\parallel}\overrightarrow{q_\parallel}a^+_{\vec{q}_\parallel}a_{\vec{q}_\parallel}\right)^2 - V_{SA}(z) + \sum_{\overrightarrow{Q_j}}\hbar\omega_{s_j}a^+_{\overrightarrow{Qj}}a_{Q_j} +$$
$$\sum_{\overrightarrow{q_\parallel}}\hbar\omega_0 a^+_{\vec{q}_\parallel}a_{\overrightarrow{q_\parallel}} + \sum_{\overrightarrow{Q_1}}C_{Q_1}ch(Q_1z)(e^{-i(1-a_1)\vec{Q}_j\vec{\rho}}a^+_{\overrightarrow{Qj}}. - e^{-i(1-a_1)\vec{Q}_j\vec{\rho}}.a_{Q1} + \sum_{\overrightarrow{Q_2}}C_{Q_1}ch(Q_1z)\left(e^{-i(1-a_2)\vec{Q}_j\vec{\rho}}.a^+_{\overrightarrow{Qj}} - e^{-i(1-a_1)\vec{Q}_j\vec{\rho}}.a_{Q2}\right) +$$
$$\sum_{q_\parallel}\left(\sum_{n=1.3,5}C_q^n\cos(\frac{n\pi}{d}z)\right).(e^{-i(1-a_1)\vec{q}_\parallel\vec{\rho}}.a_n^+ - e^{-i(1-a_1)\vec{q}_\parallel\vec{\rho}}.a_n\ ) + \sum_{n=1.3,5}C_q^n\sin(\frac{n\pi}{d}z).(e^{-i(1-a_1)\vec{q}_\parallel\vec{\rho}}a_n^+. - e^{-i(1-a_1)\vec{q}_\parallel\vec{\rho}}.a_n) \qquad (51)$$

توصف الجملة في هذه الحالة بالتابع الموجي:

$$|\psi\rangle\,|\phi\rangle \qquad (52)$$

حيث$|\psi\rangle$ يصف حالة الإلكترون، ويصف التابع $|\phi\rangle$ الإهتزازات البصرية(فونونات)، يمكن بمساعدة التحويل الثاني لطريقة لي– لو– وباينز (Lee- Low and Pains) كتابة التابع الموجي $|\phi\rangle$ بالصيغة:

$$|\phi\rangle = U_2|0\rangle \qquad (53)$$

حيث:

$$U_1 = e^{i\vec{k}\vec{\rho}}\exp[\sum_{\vec{Q}_j}(f^*_{Qj}a^+_{Qj} - f_{Qj}a_{Qj}).\exp[\sum_{\vec{q}_{\parallel,n}}(f^*_{q_\parallel,n^+}a^+_{n^+} - f_{q_\parallel}a_{n^+}).\exp[\sum_{\vec{q}_{\parallel,n}}\left(f^*_{q_\parallel,n^-}a^+_{n^-} - f_{q_\parallel,n^-}a_{n^-}\right)]]]$$

f_{Q_j}و$f_{\vec{q}_\parallel,n^\pm}$ توابع تغير للفونونات الحجمية والسطحية على الترتيب.

$$a_{Q_j}|0\rangle = 0 \quad , \quad a_q|0\rangle = 0 \quad , \quad \langle 0|0\rangle = \qquad (54)$$

بأخذ القيمة الوسطى للهاملتونيان H'_{eff} على التابع الموجي (54) نحصل على طاقة البولارون:

$$E(\vec{k}) = \left\langle\psi\left|\frac{P_z^2}{2m^*}\right|\psi\right\rangle + \langle\psi|V_{SA}|\psi\rangle + \sum_{\vec{q}_\parallel}\Big(\sum_{n=1,3,5}|f_{n^-}|^2\left(\hbar\omega_0 + \frac{a_2^2\hbar^2q_\parallel^2}{2m^*}\right) + \sum_{\vec{Q}_j}\left|f_{\vec{Q}_j}\right|^2\left(\hbar\omega_{sj} + \frac{a_1^2\hbar^2Q_j^2}{2m^*}\right)\Big) + \frac{1}{2m^*}\Big(\hbar\vec{k}_\parallel - \sum_{\vec{q}_\parallel}\Big(\sum_{n=1,3,5.} a_2\hbar\vec{q}_\parallel|f_{n^-}|^2 + \sum_{n=2,4,6.} a_2\hbar\vec{q}_\parallel|f_{n^+}|^2\Big) - \sum_{\vec{Q}_j} a_2\hbar\vec{Q}_j|f_{n^+}|^2\Big)^2 + \sum_{\vec{q}_\parallel}\Big(\sum_{n=1,3,5..}\left(\bar{C}_q^*f_{n^-} - \bar{C}_qf_{n^-}^*\right) + \sum_{n=2,4,6..}\left(\bar{C}_q^*f_{n^+} - \bar{C}_qf_{n^+}^*\right)\Big) + \sum_{\vec{Q}_j}\left(\bar{C}_Q^*f_{Qj^-} - \bar{C}_Qf_{Qj^-}^*\right)$$

حيث:

$$\bar{C}_{q,n^-} = C_{q,n^-}\left\langle\psi\left|cos\left(\frac{n\pi}{d}z\right)e^{-i(1-a_2)\vec{q}_\parallel\vec{\rho}}\right|\psi\right\rangle \qquad (55)$$

$$\bar{C}_{q,n^+} = C_{q,n^+}\left\langle\psi\left|sin\left(\frac{n\pi}{d}z\right)e^{-i(1-a_2)\vec{q}_\parallel\vec{\rho}}\right|\psi\right\rangle \qquad (56)$$

$$\bar{C}_{Q_1} = C_{Q_1}\left\langle\psi\left|ch(Q_1z)e^{-i(1-a_1)\vec{Q}_1\vec{\rho}}\right|\psi\right\rangle \qquad (57)$$

$$\bar{C}_{Q_2} = C_{Q_2}\left\langle\psi\left|sh(Q_2z)e^{-i(1-a_2)\vec{Q}_2\vec{\rho}}\right|\psi\right\rangle \qquad (58)$$

لندخل المعامل (بارامتر) η المستقل عن $\vec{k}$، عندما $\vec{k}$ صغير [9] نجد:

$$\eta\vec{k} = \sum_{\vec{Q}_j} a_1\vec{Q}_j\left|f_{Q_j}\right|^2 + \sum_{\vec{q}_\parallel}\left[\sum_{n=1,3,5\ldots} a_2\vec{q}_\parallel|f_{n^-}|^2 + \sum_{n=2,4,6\ldots} a_2\vec{q}_\parallel|f_{n^+}|^2\right] \qquad (59)$$

نعين البارامترات $f_{n^+}, f_{n^-}, f_{\vec{Q}_j}$ وذلك من تغير تابع الطاقة.

$$\frac{\partial E(\vec{k})}{\partial f_{\vec{\zeta}_N}} = 0\ , N = 1,2,3,4, (\vec{\zeta}_1 = \vec{Q}_1\ , \vec{\zeta}_2 = \vec{Q}_2\ , \vec{\zeta}_{3,4} = \vec{q}_\parallel \qquad (60)$$

فنحصل على:

$$f_\zeta = -\bar{C}_{\zeta_N}\left[\hbar\omega_N - \frac{(1-\eta)\hbar^2\vec{k}\zeta_Na_N}{m^*} + \frac{\hbar^2\zeta^2{}_Na^2{}_N}{2m^*}\right] \qquad (61)$$

حيث: $a_N = a_1$ من أجل $N = 1,3$ و $a_N = a_2$ من أجل $N = 2,4$.

بتعويض العلاقات من (55) حتى (61) في عبارة طاقةالبولارون نحصل على طاقة البولارون بزخم $\hbar\vec{k}$

$$E(\vec{k}) = \left\langle\psi\left|\frac{P^2{}_z}{2m^*}\right|\psi\right\rangle + \langle\psi|V_{SA}(z)|\psi\rangle + \frac{(1-\eta)\hbar^2k^2}{2m^*} - \sum\frac{\left|\bar{C}_{\zeta r}\right|^2}{\hbar\omega_N - \frac{(1-\eta)\hbar^2\overrightarrow{k_\parallel}\zeta_N a_N}{m^*} + \frac{\hbar^2\zeta_N^2 a_N^2}{2m^*}} + \frac{(1-\eta)\hbar^2}{m^*}\sum_{N,\zeta_N}\frac{(a_N\zeta_N)^2\left|\bar{C}_{\zeta N}\right|^2}{\hbar\omega_N - \frac{(1-\eta)\hbar^2\overrightarrow{k_\parallel}\zeta_N a_N}{m^*} + \frac{\hbar^2\zeta_N^2}{2m^*}} \quad (62)$$

يعطى التابع الموجي للإلكترون بالصيغة (37)، وعندما تكون سماكة الطبقة رقيقة يمكن استخدام التابع الموجي المعطى بالعلاقة الآتية بدلاً من العلاقة (37).

$$\psi_1(z) = \sqrt{\frac{2}{d}}cos\left(\frac{\pi z}{d}\right) \quad (63)$$

يمكن الحصول على طاقة الحالة الأساسية E_0 للبولارون في طبقة بلورية قطبية بالتعويض في العلاقة (63) عن $\vec{k}_\parallel = 0$.

$$E_0 = \Delta E + \Delta E_{SA}^{pl} - \Delta E_{e-ph}^{V} - \Delta E_{e-ph}^{s} \quad (64)$$

حيث ΔE الطاقة الحركية العرضية للإلكترون في الطبقة.

$$\Delta E = \left\langle\psi\left|\frac{P_z^2}{2m^*}\right|\psi\right\rangle \quad (65)$$

ΔE_{SA}^{pl} الطاقة الناتجة عن كمون التوافق الذاتي للجسيم:

$$\Delta E_{SA}^{pl} = \langle\psi|V_{SA}(z)|\psi\rangle \quad (66)$$

ΔE_{e-ph}^{V} طاقة التأثير المتبادل بين الإلكترون والفونونات الحجمية في الطبقة البلورية القطبية:

$$\Delta E_{e-ph}^{V} = -\sum_{\vec{q}_\parallel}\left(\sum_{n=1,3,5\ldots}\frac{\left|\bar{C}_{q_\parallel,n^-}\right|^2}{\hbar\omega_0+\frac{\hbar^2 q_\parallel{}^2 a_2{}^2}{2m^*}} + \sum_{n=2,4,6\ldots}\frac{\left|\bar{C}_{q_\parallel,n^+}\right|^2}{\hbar\omega_0+\frac{\hbar^2 q_\parallel{}^2 a_2{}^2}{2m^*}}\right) \quad (67)$$

ΔE_{e-ph}^{s}طاقة التأثير المتبادل بين الإلكترون والفونونات السطحية:

$$\Delta E_{e-ph}^{s} = -\sum_{\vec{Q}_j}\frac{\left|\bar{C}_{Q_j}\right|^2}{\hbar\omega_{s_j}+\frac{\hbar^2 Q_j{}^2 a_2{}^2}{2m^*}} \quad (68)$$

لحساب الكتلة الفعالة للبولارون ننشر التابع (62) وفق قوى $\vec{k}$ و نكتب الحد التربيعي بالصيغة $\frac{\hbar^2k^2}{2m_p}$ حيث m_p الكتلة الفعّالة للبولارون.

$$m_p = m^* + \Delta \mathrm{m}_{e-ph}^{V} + \Delta \mathrm{m}_{e-ph}^{s} \quad (69)$$

حيث m^* كتلة الإلكترون الحر، $\Delta \mathrm{m}_{e-ph}^{V}$ مساهمة في الكتلة الفعّالة m_p نتيجة تفاعل الإلكترون مع الإهتزاز الحجمي و تساوي إلى:

$$\Delta \mathrm{m}_{e-ph}^{V} = \frac{2\hbar^2}{m^*}\sum_{\vec{q}_\parallel}\left[\sum_{n=1,3,5\ldots}\frac{\left|\bar{C}_{q_\parallel,n^-}\right|^2 q_\parallel a_2}{\hbar\omega_0+\frac{\hbar^2 q^2{}_\parallel a^2{}_2}{2m^*}}+\sum_{n=2,4,6\ldots}\frac{\left|\bar{C}_{q_\parallel,n^+}\right|^2 q_\parallel a_2}{\hbar\omega_0+\frac{\hbar^2 q^2{}_\parallel a^2{}_2}{2m^*}}\right] \quad (70)$$

و $\Delta \mathrm{m}_{e-ph}^{s}$ المساهمة في الكتلة الفعّالة للبولارون نتيجة تأثير تفاعل الإلكترون مع الإهتزاز السطحي وتساوي إلى:

$$\Delta \mathrm{m}_{e-ph}^{s} = \frac{2\hbar^2}{2m^*}\sum_{\vec{Q}_j}\frac{a_1 Q_j\left|\bar{C}_{Q_j}\right|^2}{\left(\hbar\omega_{s_j}+\frac{\hbar^2 Q^2{}_j a^2{}_1}{2m^*}\right)^3} \quad (71)$$

عندما تسعى d إلى اللانهاية في العلاقة (64) فإنه يتم الحصول على نتيجة الطاقة ال للبولارون السطحي، وعلى كتلته الفعّالةعند تماس طبقتين بلوريتين واحدة قطبية و الأخرى غير قطبية كما في العمل [10].

بناءً على نتائج الحساب المعبر عنها على الشكل (2)يمكننا التوصل إلى النتائج التالية:

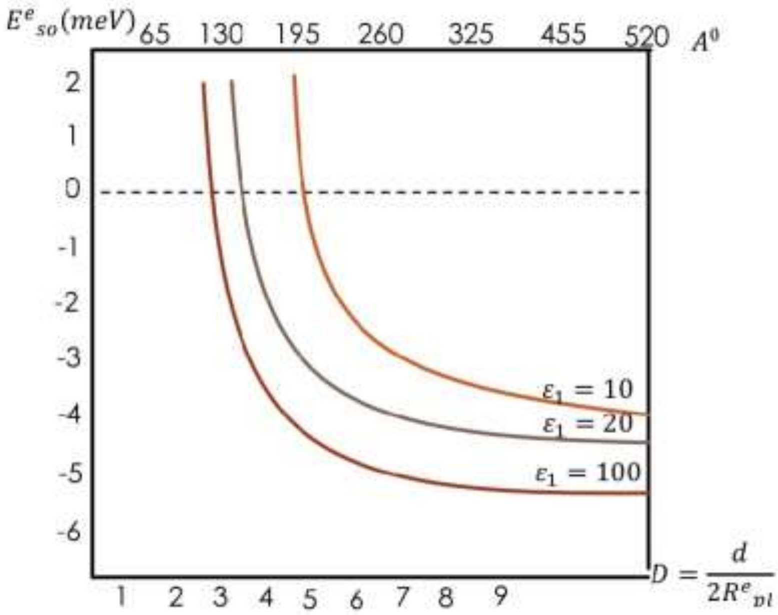
١- تنخفض طاقة البولارون في طبقة رقيقة مقارنةً بقيمتها في بلورة ضخمة، بسبب التأثير المتبادل مع الإهتزازات السطحية $-\Delta E_{e-ph}^{s}$، ولتأثير الذاتي $\Delta E_{SA}^{pl} < 0$ في حالة $\varepsilon_2 \ll \varepsilon_{1,3}$ ، tمثلاً من أجل سماكة طبقة $d \sim (2-3)R_{pl}$ فإن طاقة الكمون الذاتي $\Delta E^{pl}{}_{sA}$ تزيد (بالقيمة المطلقة) طاقة القياس الكمي $\frac{\pi^2\hbar^2}{2m^* d^2}$.

٢- لايعد اعتماد الطاقة الأساسية للبولارون على سماكة الطبقة مضطرداً، إذ توجد سماكة معينة للطبقة تكون عندها الطاقة صغرى، ويمكن تفسير اعتماد الطاقة على السماكة كما يلي:

في مجال السماكة الصغيرة$\left(d \le R_{pl}\right)$ فإن القسم الأساسي في الطاقة يكون الطاقة الكوانتية القياسية $\frac{\pi^2\hbar^2}{2m^* d^2}$ ، و بإزدياد السماكة فإن الدور الأساسي في الطاقة يكون لمساهمة الطاقة الكمونية الذاتية .$\sim \frac{1}{d}$

٣- يقل تأثير المساهمة الحجمية لطاقة الإلكترون مع الفونونات الحجمية E_{e-ph}^{V} في طاقة البولارون بإنقاص السماكة (نتيجة النطاق الحجمي للصفيحة)، و كذلك يؤدي إلى نقص الكتلة الفعّالة m_p للبولارون.

٤- تعتمد طاقة البولارون على العازلية الكهربائية للطبقة البلوريةالقطبية المدروسة وعلى العازلية الكهربائية للطبقات المجاورة.

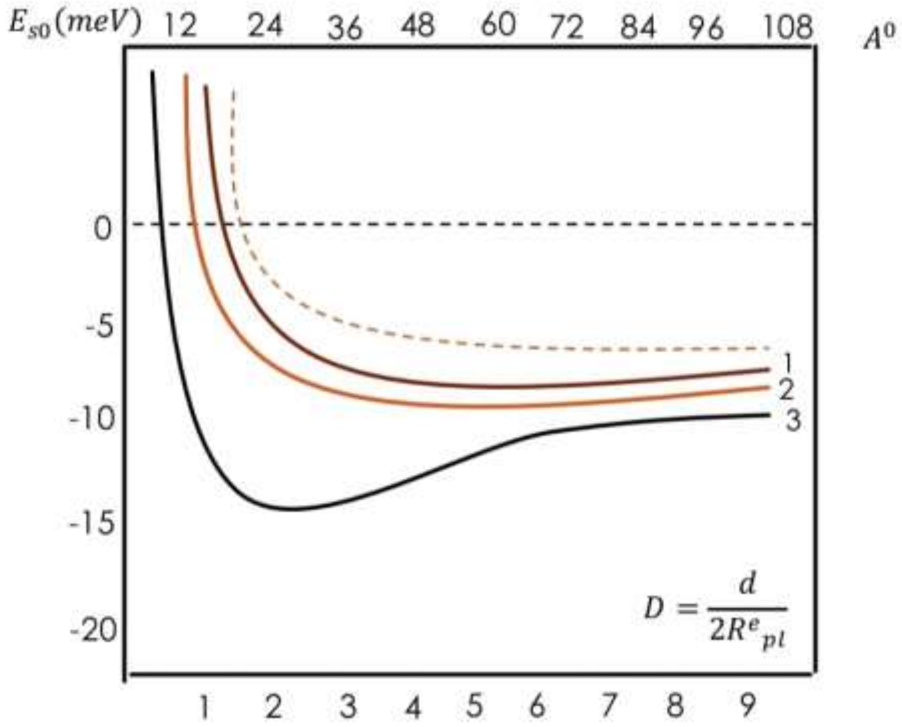


الشكل(3) علاقة طاقة ارتباط البولارون الإلكتروني بسماكة طبقة رقيقة من تيلورايد (CdTe) من أجل قيم مختلفة لثابتة عازلية الطبقة المحيطة (غير القطبية).

$1)\ \varepsilon_1 = 10, \quad 2)\varepsilon_1 = 20, \quad 3)\varepsilon_1 = 100$

معاملات البلورة CdTe:

$$m_e/m_0 = 0.11\ , \quad \varepsilon_\infty = 7.13\ , \varepsilon_2 = \varepsilon_0 = 10.6\ , \quad \hbar\omega_0 = 0.033\text{eV}$$



الشكل(4) علاقة طاقة ارتباط البولارون الإلكتروني بسماكة الطبقة d (pbI_2) من أجل قيم مختلفة لثابتة عازلية الطبقة المحيطة.

$1)\ \varepsilon_1 = 10, \quad 2)\varepsilon_1 = 20, \quad 3)\varepsilon_1 = 100$

يعبر الخط المنقط عن طاقة البولارون بدلالة سماكة الطبقة d في الكمون الذاتي$V_{SA}(z)$ بدون تأثير الإهتزاز (دون أخذ الفونونات).

معاملات الجملة:

$$^{m_e}/_{m_0} = 0.48\,, \quad \varepsilon_\infty = 6.1\ , \ \varepsilon_0 = 28.4\ , \ \hbar\omega_0 = 0.0134\text{eV}$$

من الشكلين(٣) و(٤) يمطننا استخلاص النتائج التالية:

١- تنقص طاقة البولارون في الطبقة الرقيقة عن طاقة ارتباط البولارون في بلورة ضخمة (سميكة) بسبب الطاقة الناتجة عن المساهمة السطحية لتفاعل الإلكترون مع الإهتزاز السطحي $\Delta E_{e-ph}^{S}-$، وكذلك نتيجة طاقة التأثير الذاتي للبولارون $\Delta E_{SA}^{pl} < 0$ في الحالة $\varepsilon_2 \ll \varepsilon_{1,3}$.

٢- تتغير طاقة الحالة الأساسية للبولارون كدالة لسماكة الطبقة بشكل غير مضطرد، حيث توجد سماكة معينة للطبقة تكون عندها طاقة البولارون صغرى ، تُفسر ظاهرة عدم اضطراد الطاقة مع السماكة أنّه في مجال السماكة $d \ll R_{pl}$ فإنّ الدور الأساسي في عبارة الطاقة يكون للحد $\frac{\pi^2\hbar^2}{2m^*d^2}$ وبزيادة d يكون الدور الأساسي في عبارة الطاقة هو لطاقة الكمون الذاتي $\sim\frac{1}{d}$.

٣- تقل مساهمة ΔE_{e-ph}^{V} الطاقة الخجمية لتبادل إلكترون –فونون مع نقصان سماكة الطبقة وذلك بسبب نقص حجم هذه الطبقة.

٤- ينتج أيضاً أنّ طاقة البولارون تعتمد على سماكة الطبقة، وعلى أنزتروبية العازلية الكهربائية للطبقة وثوابت العازلية الكهربائية للطبقات المجاورة.

الاستنتاجات والتوصيات:

للقيام بالدراسة النظرية لمسألة التأثير المتبادل إلكترون– فونونات (الفونونات الضوئية للإهتزاز الطولي السطحي والحجمي) يمكن تطبيق طرق مختلفة، مثلاً عندما يكون التأثير المتبادل بين الإلكترون والفونونات الضوئية الطولية ضعيف، فعندها تكون نظرية الاضطراب صحيحة، وفي حالة التأثير بين القوي والضعيف، تكون نظرية الإرتباط القوي صحيحة.

(حالة الارتباط: قوي ، ضعيف، بين القوي والضعيف) كل طريقة من من هذه الطرق توافق مجال محدد ثابت، فمن المهم إظهار قيم المعاملات التي من أجلها ينتقل البولارون السطحي الحر إلى توضع آلي، للإستمرار في دراسة هذه المسألة من الضروري استخدام الطريقة التي تكون عندها المسألة صحيحة، أي من أجل أي قيمة لثابت التأثير المتبادل إلكترون– فونون، حيث في هذه المقالة تم الإنطلاق من طريقة لي – لو وباينز.

References

- [1]- K.L.chopra,"*Thin film phenomena*", Me Grew Hill book Co, New York.(1969).
- [2]-LandauL.D.and LifshitzE.M.*QuantumMecahanics,Oxford*. Pergoma,(1965).
- [3]-A.Emin,Polarons,*United states of America by cambridge University press*, New York,2013.
- [4]-Licary.J.and Evrard R. *Electron-phonon interaction in a dielectric state: Effect the electronic ploriability-ph*ys.RevB,1977,V.15,N4,P.2254-2264.
- [5]محمد فاهود ،*كمون كولوم للإلكترون والثقب (الاكستون) في الأفلام الرقيقة، وتأثير معامل اللاتناحي للعازلية الكهربائية*، مجلة جامعة تشرين للدراسات والبحوث العلمية – سلسلة العلوم الأساسية المجلد(33) العدد(2) عام 2011.
- [6]-Hipolito O.*Exciton-phonon Bound state in polar crystals* I. phys.c.,1979,V.12,N21, p.4664-4671.
- [7]-Friedbeger R. and Lee T.*D.Binding Energy of winnier Exciton*. Phys Rev. D,1977,V.15,N6 p.1694-1700.
- [8]-Fuchs R. and Kliewerk.L.*Optical modes of vibration in a Ionic crystal slab-phys.* Rev,1965,N6A, P.A2076-A2089.
- [9]-Lee T.D., Low F.E.,*pines D,the motionof slow electron in a polar crystals-phys.* Rev,1953,V.90,N2,P.297-302.
- 10-Beril S.I.,Pokatilov E.P.*surface state in Quantum Dilectric phys.state*.sol 1978,V12,N10,P.2030-2033.