

طاقة اكستون فان – موت في طبقة رقيقة من تيلوريد الكادميوم (CdTe)

د. محمد فاهود*

د. مفيد عباس**

بشار أحمد***

تاريخ الإيداع 10 / 1 / 2019. قُبل للنشر في 19 / 5 / 2019

□ ملخص □

تم نظرياً دراسة تأثير الكمون الذاتي لحاملة الشحنة على طاقة اكستون فان – موت (Wannier – Mott) في جملة مكونة من ثلاث طبقات رقيقة غير متجانسة، وتم الحصول على صيغ طاقة ارتباط الاكستون الخفيف والثقيل في طبقة رقيقة من تيلوريد الكادميوم (CdTe) على ركيزة من كبريت الكادميوم (CdS). تم استخدام بعض طرق التقريب في الحصول على طاقة ارتباط الاكستون الخفيف والثقيل E_{ex}^{le-1hh} , E_{ex}^{le-1lh} (كتقريب طريقة التغيير - وتقريب القطع المكافئ للطاقة الكمونية للثقب). تم في هذا العمل توضيح دور الاكستونات في امتصاص الضوء في الخلايا الشمسية، وتبين أن مساهمة الاكستونات في نقل التيار تكون عندما تتفكك الاكستونات عند منطقة الوصلة p-n الى ثقب والكترونات حرة.

الكلمات المفتاحية: اكستون فان موت، اكستون فرينكل، تفكك الاكستون، الأفلام الرقيقة، تيلوريد كادميوم.

* أستاذ ، قسم الفيزياء، كلية العلوم، جامعة تشرين، اللاذقية، سورية.

** أستاذ ، قسم الفيزياء، كلية العلوم، جامعة تشرين، اللاذقية، سورية.

*** طالب ماجستير ، قسم الفيزياء، كلية العلوم، جامعة تشرين، اللاذقية، سورية.

Energy of Wannier–Mott Exciton in Thin Film of Cadmium Telluride (CdTe)

Dr. Mohammad Fahoud*

Dr. Mufid Abbas**

Bashar Ahmad***

(Received 10 / 1 / 2019. Accepted 19 / 5 /2019)

□ ABSTRACT □

In this work the effect of self-action potential charge carriers has been studied in heterogeneous compound consisted of three layers' system on Wannier –Mott Exciton, the binding energy formula for light and heavy exciton in CdTe thin film deposited on CdS substrate has been readied.

Some Method approximations have been applied on light and heavy exciton binding energy ($E_{ex}^{le-1/h}$, $E_{ex}^{le-1/hh}$) Such as The Variational Method and parabolic approximation for potential of holes. In this work has been illustrated the exciton roles conductivity current at the contact p-n in solar cells where the excitons have been decayed into free electrons and free holes.

Key words: Wannier – Mott exciton, dielectric constant, Frenkel exciton, exciton dissociation, thin film, Cadmium Telluride,

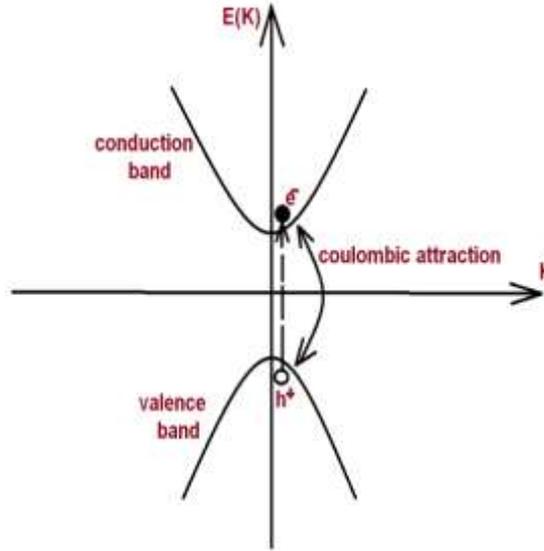
* prof. at physics department- faculty of sciences – Tishreen university - Lattakia – Syria.

** prof. at physics department- faculty of sciences – Tishreen university - Lattakia – Syria.

*** Master student at physics department - faculty of sciences – Tishreen university –Lattakia – Syria.

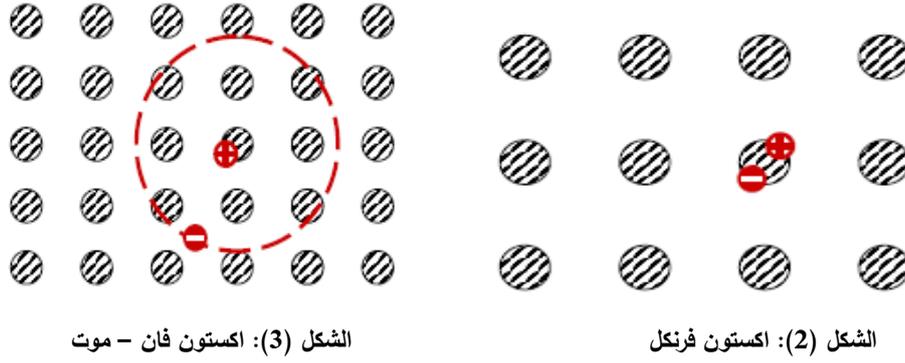
مقدمة

تعرف حالة الارتباط الكولوني بين إلكترون وثقب إلكتروني بالاكستون، والذي يتشكل عندما يمتص نصف ناقل فوتون طاقته أقل من طاقة فجوة الطاقة (energy bandgap) مما يؤدي لإثارة إلكترون من عصابة التكافؤ إلى عصابة الناقلية تاركاً خلفه ثقب إلكتروني مشحون ايجابياً، حيث يجذب الإلكترون في عصابة الناقلية إلى هذا الثقب بواسطة تفاعل كولون التجاذبي [1,2] كما في الشكل (1)



الشكل (1): تشكل زوج إلكترون ثقب مرتبط (اكستون) بواسطة التفاعل الكهربائي الكولوني الساكن.

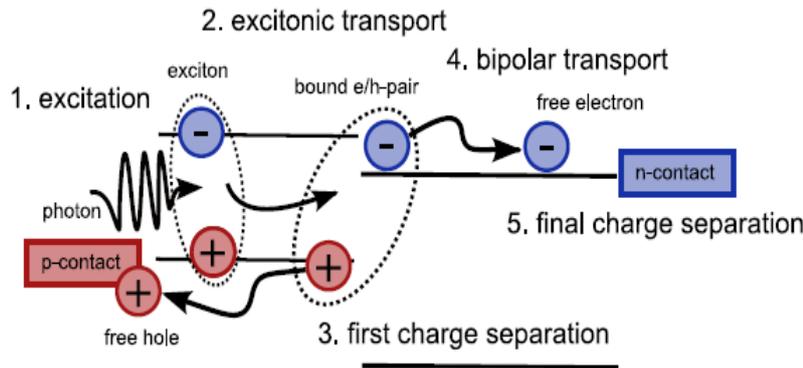
ففي حالة المواد التي لها ثابتة عازلية كهربائية صغيرة، يكون التفاعل الكولوني بين الإلكترون والثقب قوي (الحجب ضعيف) فتتشكل اكستونات فرينكل الموضحة في الشكل (2) [3]، والتي سميت بهذا الاسم نسبة إلى [Ykov Frenkel]، الذي قدم لأول مرة في التاريخ مفهوم الاكستون في عام 1931 كتفسير نظري لإصدار خطوط ضوئية ضيقة في طيف البلورات الجزيئية العضوية، وذلك في التجارب التي قام بها I. W. de Haas . Obreimov , P . Pringsbein ، وآخرون في أواخر عام 1920 [4-6]، وتتصف هذه الاكستونات بكونها ذات نصف قطر صغير وطاقة ارتباط كبيرة (0.1 – 1 eV) ، وهي شائعة في الأجسام الصلبة العازلة الأيونية (SiO₂)، كما تتواجد في بلورات الهاليدات القلوية (NaI) [7]. أما في حالة أنصاف النواقل التي تكون فيها ثابتة (سماحية) العازلية الكهربائية كبيرة، يميل حجب الحقل الكهربائي إلى تقليل التفاعل الكولوني بين الإلكترونات والثقوب (الحجب قوي) فيتشكل نوع آخر من الاكستونات يُعرف بإكستونات فان - موت الموضحة في الشكل (3) نسبة إلى Gregory Hugh Wannier و Francis Mott Sir Nevil اللذان قدما عام 1950 تصوراً للاكستون في بلورة نصف ناقل مغاير لأكستون فرينكل من حيث الخواص الفيزيائية [3]، وقد تمت ملاحظته تجريبياً للمرة الأولى في أطيايف الفلورة الضوئية لثنائي أكسيد النحاس (CuO₂) من قبل Evgeniy Gross عام 1951 [8]، وتتصف هذه الاكستونات بكونها ذات نصف قطر كبير وطاقة ارتباط صغيرة (0.01-0.1eV)، ويتشكل هذا النوع من الاكستونات في بلورات أنصاف النواقل ذات الفجوات الطاقية الصغيرة وثوابت العازلية الكهربائية الكبيرة، مثل (...ZnS ,GaAs, CdTe).



الشكل (3): اكستون فان - موت

الشكل (2): اكستون فرنكل

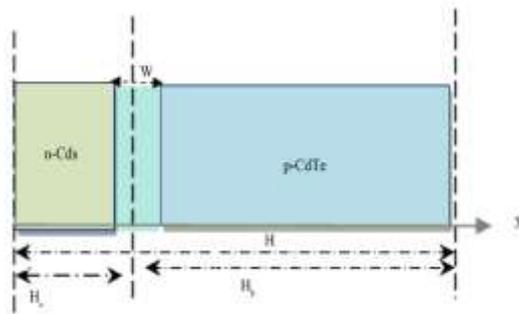
فانقت لوحظ تجريبيا وجود اكستونات فان - موت في تيلوريد الكاديوم (CdTe) في درجات حرارة مساوية لدرجة حرارة الغرفة وأعلى منها [9,10]، ولكن تم اعتبار اكستونات فان - موت ذات تأثير مهم على أداء الخلايا الشمسية اللاعضوية عند درجة حرارة الغرفة لمدة من الزمن وذلك لسببين: أولهما اعتبار تواجد هذه الاكستونات في أنصاف النواقل عند درجات حرارة مساوية لدرجة حرارة الغرفة وأعلى منها غير ذو أهمية لكن هذه النظرة سرعان ما عُبِرت من قبل A. Hangleiter, M. H. Pilkuhn و D. E. Kane and R. M. Swanson الذين اقترحوا إن كثافة الاكستونات الحرة (اكستون فان - موت) في السيليكون عند درجة حرارة الغرفة يمكن أن تقترب من قيمة كثافة الحوامل الأقلية، أما السبب الثاني لإهمال تأثير الاكستونات فهو نتيجة لكونها معتدلة الشحنة، وبالتالي لا يمكن أن تساهم في نقل التيار [11,12]، ولكي يساهم اكستون فان موت في التيار يجب أن ينتشر إلى منطقة الوصلة p-n في الخلية الشمسية، حيث يميل إلى أن يتفكك تحت تأثير الحقل الكهربائي القوي إلى إلكترون حر وثقب حر يساهمان في التيار، وبالتالي تساهم اكستونات فان موت في زيادة التيار المتولد ضوئياً في الخلايا الشمسية اللاعضوية كما هو موضح في الشكل (4) [13].



الشكل (4): مساهمة اكستون فان - موت في التيار الضوئي

إن طاقات ارتباط الاكستونات في الخلايا الشمسية الحجمية ثنائية القطبية من مرتبة عدة (meV) مما يؤدي إلى التفكك الحراري مباشرة بعد التولد، وبالتالي يمكن أن يوصف سلوك الخلية الشمسية بدقة بدلالة أزواج إلكترون وثقب غير

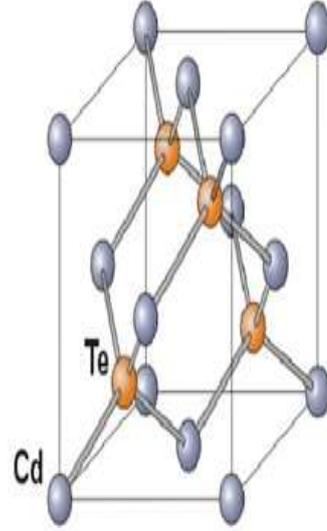
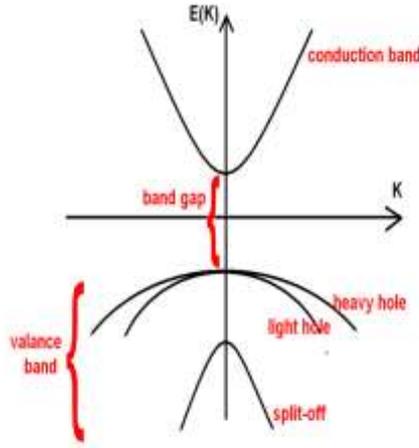
المتفاعلة، ولكن في البنى النانوية المعزولة تغدو طاقة الاكستون مساوية لمضاعفات $K_B T$ مما يؤدي لظهور تأثيرات اكستونية في طيفي الامتصاص والتيار الضوئي، ويمكن أن يمنع بشدة انفصال الشحنة الفعّال مما يؤدي إلى سلوك نقل يهيمن عليه انتشار الاكستون كما هي الحالة في الخلايا الشمسية العضوية، حيث يتطلب تفكك الاكستون سطوح ببنية حجمية غير متجانسة مصممه خصيصا لذلك، حيث يعتمد وصف الاكستونات عند محاكاة سلوك الخلايا الشمسية العالية الكفاءة بشكل رئيسي على التعزيز الاكستوني للانتقالات الضوئية بالقرب من حد العصابة الفعّال [14]، وهذا ما تؤكدته الدراسة التجريبية على الخلية الشمسية (CdS/CdTe) الموضحة في الشكل (5) حيث تم فيها دراسة تأثير الاكستونات على المردود الكومومي لهذه الخلية عند سماكات معينة لطبقة تيلوريد الكاديوم [15,16].



الشكل (5): الخلية الشمسية CdS/CdTe.

يُعتبر الأثر الرئيسي للاكستونات على أداء الخلية الشمسية هو تحديد مميزات الانتشار للأنماط المتولدة ضوئياً بواسطة الترابط الفعّال بين حركة الحوامل الحرة والاكستونات، وقد بين Stefan T. Omelchenko، وآخرون أن كثافة تيار الدارة المقصورة هو عبارة عن مجموع قسمين: الأول للحاملات الحرة، والثاني اكستوني [17].

يعد تيلوريد الكاديوم (CdTe) مرشحاً مثالياً للأفلام الرقيقة للخلايا الشمسية نتيجة فجوة عصابة الطاقة المثالية القريبة من 1.45 eV الشكل (7)، وعامل الامتصاص الضوئي الأكبر من $(1 \times 10^5 \text{ cm}^{-1})$ والذي يعني أن 90% من الضوء الساقط يمكن أن يمتص بواسطة الميكرومترات القليلة الأولى من طبقة التيلوريد كاديوم، وهو مركب بلوري مستقر يمثل نصف ناقل (II-VI) ذو بنية بلورية مكعبة مركزية الوجوه (face-centered cubic) من نوع بنية كبريت الزنك (zinc blende structure)، كما في الشكل (6) [18, 19]، وتكون فيه عصابة الفجوة مباشرة، وتتحلل عصابة التكافؤ إلى ثلاث عصابات ثانوية (sub-band) كما هو الحال في جميع المركبات الكيميائية التي تمتلك بنية من نوع كبريت الزنك (zinc blende structure)، و يشار إلى هذه العصابات بعصابة الثقوب الثقيل (Heavy Hole Band)، وعصابة الثقوب الخفيف (Light Hole Band)، وعصابة الانقسام (Split-Off Band)، حيث تكون عصابات الثقوب الثقيل، والثقب الخفيف منطبقتين (degenerated) عند العدد الموجي $k=0$ كما في الشكل (7) الذي يوضح عصابة الناقلية (في الأعلى)، وعصابتي الثقوب الخفيف والثقب الثقيل (في الوسط)، وعصابة الانقسام (في الأسفل) [20]، وسنوضح في هذا العمل تأثير هذا الانقسام على طاقة ارتباط اكستون فان - موت.



الشكل (6): الخلية الأولية لتيلوريد الكاديوم الشكل (7): عصابات الطاقة لأنصاف النواقل ذات بنية كبريت التوتياء

أهمية البحث وأهدافه:

يهدف هذا البحث إلى دراسة نظرية للحصول على طاقة الكمون الذاتي لاكستون فان - موت في طبقة CdTe، وذلك من حل معادلة بواسون، ثم إضافة هذا الكمون إلى المؤثر الهاملتوني للاكستون، وحل معادلة شرودنجر للحصول على طاقة ارتباط الاكستون في هذه الطبقة ومناقشة تأثير سماكة طبقة CdTe على طاقة الارتباط، بالإضافة إلى مناقشة تأثير معاملات طبقة CdTe والطبقات المجاورة المكونة للجمل على طاقة ارتباط الاكستون. وذلك لما لهذه الدراسة أهمية بالغة في صناعة الخلايا الشمسية، وصناعة الأجهزة الالكترونية، واستخداماتها الواسعة.

طرائق البحث ومواده:

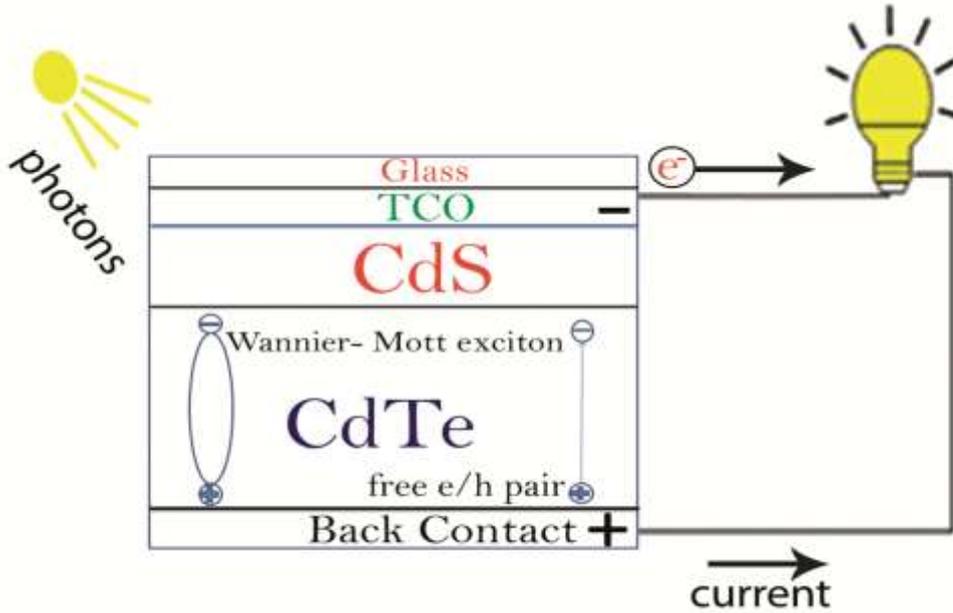
يُعتمد في حل هذه المسألة والمسائل المشابهة استخدام طريقة التغيرات (المتحولات) (variation method)، وتسمى أيضاً طريقة رالي - ريتز (The Rayleigh - Ritz method). يمكن بواسطة طريقة التغيرات الحصول على التابع الموجي للاكستون (إلكترون-ثقب) بالتشابه مع التابع الموجي لإلكترون ذرة الهيدروجين (إلكترون-نواة) وذلك بإدخال معامل متغير λ مثلاً، ثم حساب طاقة الاكستون بدلالة المعامل المتغير، وبعد ذلك يتم حساب قيمة معامل التغير عند القيمة الصغرى لطاقة ارتباط الاكستون (طاقة الحالة الأساسية)، وتعويض قيمة المعامل المتغير في عبارة الطاقة والتابع الموجي.

ونظراً لصعوبة العبارة الناتجة من الحل بسبب طبيعة طاقة كمون كولون اعتمد كتابة برنامج حاسوبي بلغة

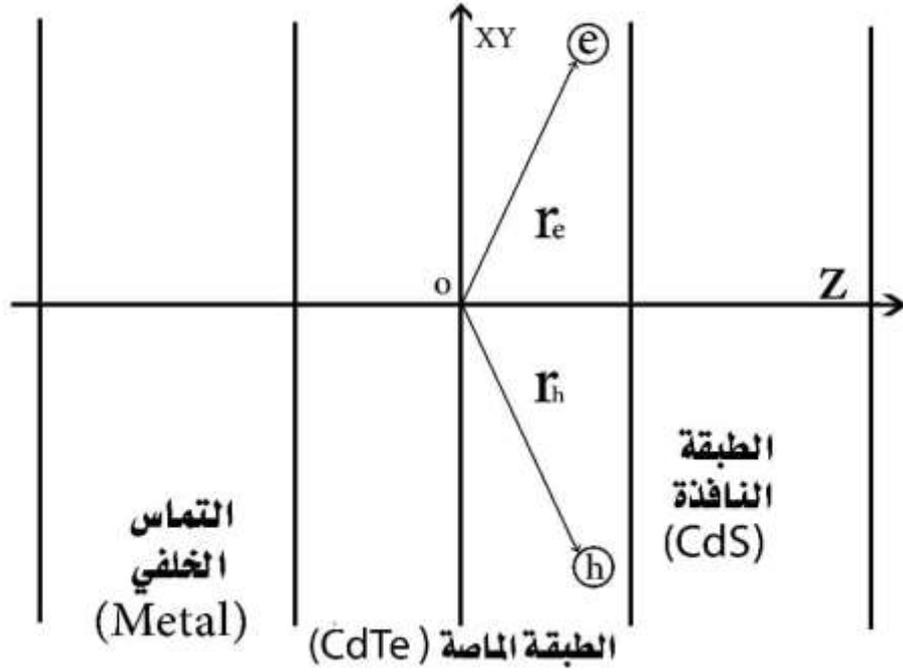
MATLAB، وكذلك تم بواسطة البرنامج رسم E_{ex}^1 طاقة الحالة الأساسية للاكستون بدلالة λ و ρ_2 سماكة الطبقة ومعامل اللاتناحي.

النتائج والمناقشة:

يلعب الاكستون دوراً هاماً في تشكيل طيف الامتصاص والإصدار في الجمل ثنائية البعد، لذلك يتم الاهتمام بحساب علاقة طاقة الاكستون مع ℓ سماكة الطبقة [21]. وقد وجد أن أحد أهم الظواهر في أنصاف النواقل هي دراسة طيف الاكستون، لذلك فإن هذا الطيف يُدرس بشكلٍ فعّال نظرياً وتجريبياً، ولما للموضوع من أهمية قصوى في الصناعات الإلكترونية والضوئية فإن الأعمال التجريبية المنشورة في هذا المجال أقل بكثير من المنشورات النظرية. لحساب طاقة اكستون فان - موت في طبقة رقيقة من CdTe الداخلة في تركيب الخلية الشمسية الموضحة في الشكل (8)، نفرض أن الإلكترون والنقبة في الطبقة الوسطى ($k=2$) من جملة مؤلفة من تماس ثلاث طبقات رقيقة (metal/p- CdTe /n-CdS) كما في الشكل (9) (الإلكترون في عصابة الناقلية والنقبة في عصابة التكافؤ حيث تعتبر عصابة متحللة الطاقة)، ويتم في الوقت الحالي الحصول على معظم الخلايا الشمسية وفق قاعدة اتحاد التركيب المذكور أعلاه.



الشكل (8): الخلية الشمسية لتيلوريد الكاديوم CdTe وطبقاتها.



الشكل (9): جملة (metal/p-CdTe/n-CdS)

هاملتون اكستون فان - موت في طبقة رقيقة

Wannier – Mott Exciton Hamiltonian in Thin Film

ندرس جملة ثلاثية الطبقات كما هو مبين في الشكل (9). يقع الإلكترون والثقب في الطبقة الوسطى (k=2). يُعطي هاملتون النظام بالعلاقة:

$$\hat{H} = \hat{H}_{ex} + \hat{H}_0 \quad (1)$$

حيث \hat{H}_{ex} هاملتون الاكستون في مستوي الطبقة xy، يُعطي بالصيغة:

$$\hat{H}_{ex} = \frac{\hat{p}_{\bar{R}}^2}{2M_{ex\perp}} + \frac{\hat{p}_{\rho}^2}{2\mu_{\perp}} + U(\rho, z_e, z_h) \quad (2)$$

ويصف المؤثر الهاملتوني \hat{H}_0 الحركة الطولية للإلكترون والثقب في الطبقة (باتجاه المحور z).

$$\hat{H}_0 = \sum_{c=e,h} \left[\frac{\hat{p}_{c\perp}^2}{2m_{c\perp}} + U_{SA}(z_c) + U_b(z_c) \right] \quad (3)$$

حيث: $M_{ex} = m_{e\perp}^* + m_{h\perp}^*$; $\mu_{\perp} = \frac{m_{e\perp}^* \cdot m_{h\perp}^*}{m_{e\perp}^* + m_{h\perp}^*}$ ، وأن إحداثي الثقب والإلكترون وفق المحور z

، وأن $U(\rho, z_e, z_h)$ كمون التأثير المتبادل إلكترون - ثقب، والذي يمكن الحصول عليه من حل معادلة بواسون ، $div(\vec{\epsilon}_k grad U(\vec{r})) = -\epsilon_0^{-1} \rho_k$; k= 1 , 2 , 3 :[7]:

$$U(\rho, z_e, z_h) = \int_0^{\infty} \frac{d^2 \rho}{(2\pi)^2} e^{i\vec{\eta}\vec{\rho}} U(\vec{\eta}, z_e, z_h) \quad (4)$$

حيث

$$U(\vec{\eta}, z_e, z_h) = \frac{e}{2\varepsilon_0\varepsilon_2\eta} \left\{ e^{-\gamma_2\eta|z_e - z_h|} + \frac{2}{e^{2\xi_2} - \delta_1\delta_3} \left[\delta_1\delta_3 ch\gamma_2\eta|z_e - z_h| + e^{\xi_2} (f_1 ch\gamma_2\eta|z_e + z_h| + f_2 sh\gamma_2\eta|z_e + z_h|) \right] \right\} \quad (5)$$

وأن

$$\delta_j = \frac{\bar{\varepsilon}_2 - \bar{\varepsilon}_j}{\bar{\varepsilon}_2 + \bar{\varepsilon}_j}, \quad j=1,3; \quad f_1 = \frac{\varepsilon_2^2 - \varepsilon_1 \cdot \varepsilon_3}{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)(\varepsilon_2 - \varepsilon_3)}; \quad f_2 = \frac{(\varepsilon_1 - \varepsilon_3) \cdot \varepsilon_2}{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)(\varepsilon_2 - \varepsilon_3)}$$

ويُعطى الشكل الصريح لطاقة الكمون الذاتي للإلكترون (c=e) وللثقب (c=h) بالصيغة:

$$U_{SA}(z_c) = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_2} \left\{ \int_0^\infty \frac{d\eta}{e^{2\xi_2} - \delta_1\delta_3} \left[(\delta_1\delta_3 + e^{\xi_2}f_1) + 2e^{\xi_2}f_1 sh^2(\gamma_2\eta z_c) + e^{\xi_2} f_2 sh(\gamma_2\eta z_c) ch(\gamma_2\eta z_c) \right] \right\} \quad (6)$$

حيث: $\gamma_k = \left(\frac{\varepsilon_k^+}{\varepsilon_k''} \right)^{1/2}$ لا تماثل العازلية الكهربائية للطبقة الرقيقة (الانزوتروبية معامل تغير الصفات الكهربائية

$$\bar{\varepsilon}_k = \sqrt{\varepsilon_k^+ \varepsilon_k''}, \quad \xi_k = \sqrt{\varepsilon_k} \eta \ell_k, \quad \ell_k = z_k - z_{k-1} \quad k=1, 2, 3 \quad \text{باختلاف الاتجاهات).}$$

التقريبات الأساسية المستخدمة في حل مسألة اكستون فان - موت

The Basic Approximations Used to Solve Wannier – Mott Exciton Problem

يلزم عند حل مسألة اكستون فان - موت استخدام التقريبات الأساسية التالية:

- أ- التقريب المستمر، نفترض أن $a_{ex} > a$ ، حيث a ثابت الشبكة، أي يمكن اعتبار الوسط مستمر.
- ب- تقريب الكتلة الفعالة.
- ت- حاجز الكمون لانتهائي عند حدود الطبقات، يُعيق انتقال حاملة الشحنة إلى الطبقة المجاورة.

طاقة ارتباط اكستون فان - موت الخفيف

Light Wannier – Mott Exciton Binding Energy

يُعتبر حل معادلة شرودنجر تحليلياً من أجل الكمون في (1) صعب جداً بسبب تعقيد صيغة الكمون (4). يمكن أن يتم حل المسألة تحليلاً في حالتين حديتين: الحالة الحدية الأولى عندما $\ell_2 \rightarrow 0$ (تسعى سماكة الطبقة التي يتشكل فيها الاكستون إلى الصفر)، يُعتبر الاكستون في هذه الحالة ثنائي البعد (2D)، وتكون الحالة الحدية الثانية عندما $\ell \rightarrow \infty$ ، يُعتبر الاكستون في هذه الحالة ثلاثي البعد (3D). يمكن في الحالة عندما تكون سماكة الطبقة $\ell_2 \leq a_{ex}$ فصل حركة الإلكترون والثقب إلى حركة في مستوي الطبقة xy (حركة عرضية)، وحركة في اتجاه المحور z العمودي على مستوي الطبقة (حركة طولية). أي أنه يمكن في هذه الحالة الحدية كتابة التابع الموجي للحالة الأساسية للاكستون بالصيغة التالية:

$$\Psi_{1s}(\rho, z_e, z_h) = C_1 \cos\left(\frac{\pi z_e}{\ell_2}\right) \cos\left(\frac{\pi z_h}{\ell_2}\right) e^{-\frac{\rho}{\lambda}} \quad (7)$$

حيث $C_1 = \frac{2}{\lambda\sqrt{\pi\ell_2}}$ ثابت الاستنظام، λ معامل التغيير.

سنركز في هذا العمل على حل معادلة شرودنجر من أجل المؤثر الهاملتوني (2)، حيث نحصل من الحل على طاقة ارتباط الاكستون، وذلك بأخذ القيمة الوسطى للمؤثر (2) على التابع الموجي الاختباري (7)، نحصل على طاقة التغيير، وبأخذ القيمة الصغرى لطاقة التغيير بالنسبة لمعامل التغيير، يتم الحصول على قيمة معامل التغيير، وبتعويض قيمة معامل التغيير التي تم الحصول عليها في عبارة الطاقة والتابع الموجي، يتم الحصول على طاقة ارتباط الاكستون، والتابع الموجي. ويمكن اعتبار التابع الموجي:

$$\psi(\rho, z_e, z_h) = \frac{2}{\lambda\sqrt{\pi\ell_2}} \cos\left(\frac{\pi n_c z_c}{\ell_2}\right) e^{-\frac{\rho}{\lambda}} ; n_c = 1, 2, 3, \dots \quad (8)$$

λ معامل التغيير، $c = 1, 2$ إلكترون وثقب على الترتيب، ℓ_2 سماكة طبقة CdTe التي يتشكل فيها الاكستون. نحصل من حل معادلة شرودنجر للمؤثر الهاملتوني (2) على التابع الموجي (8) على طاقة الاكستون الخفيف الاساسية بالصيغة التالية:

$$E_{1s}^{ex-th}(\lambda, \gamma_2, \ell_2) = \frac{\hbar^2}{2\mu_{\perp}\lambda^2} - \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0\epsilon_2\gamma_2\ell_2} \int_0^{\infty} dx \left(1 + \frac{\lambda^2}{\gamma_2^2\ell_2^2} x^2\right)^{-\frac{3}{2}} \left\{ \frac{1}{x} + \frac{x}{2(x^2 + 4\pi^2)} - \frac{8\pi^4(1 - e^{-2x})}{x^2(x^2 + 4\pi^2)^2} + \frac{32\pi^4 sh^2 x}{(e^{4x} - \delta_1\delta_2)} [\delta_1\delta_2 + e^{2x}f_1] \right\} \quad (9)$$

تمت مناقش هذه العلاقة عند دراسة طيف طاقة الحالة الاساسية لأكستون فان - موت في طبقة رقيقة من GaAs متوضعة بين طبقتين رقيقتين من $Al_xGa_{1-x}As$ [22].

طاقة ارتباط اكستون فان - موت الثقيل

Heavy Wannier – Mott Exciton Binding Energy

افترضنا إلى الآن أن الإلكترون والثقب يتحركان في مناطق على شكل قطع مكافئ غير متحللة. غير أنه في معظم الجمل المتعددة الطبقات، وكذلك في الحفر الكمونية لمواد (مثلاً CdTe - CdS) فإن عصابة التكافؤ تُعتبر متحللة، غير أنه في المستوي $\ell_2 \leq a_{ex}$ فإن انحلال عصابة التكافؤ يزول. ونظهر بالنتيجة منطقتين تحت ثانويتين، منطقة ثانوية للتقوب الخفيفة ($m_{\ell h}$)، وهذا ما تمت دراسته في الفقرة السابقة، ومنطقة ثانوية للتقوب الثقيلة (m_{hh}). إذا كان $m_{hh} \geq m_{\ell h}$ ، فإن الاكستون المشكل من إلكترون وثقب من المنطقة الثانوية للتقوب الثقيلة، يوصف كأكستون ثقيل، وأن حركة التقوب الخفيفة وكذلك التقوب الثقيلة تُكمم، وعندما تكون $m_{hh} \gg m_{\ell h}$ ، فمن الضروري الأخذ بالاعتبار أن الطاقة الكوانتية للتقوب الثقيل تحقق:

$$\frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_{hh}^* \ell_2^2} < \left| U_t(z_h = \frac{\ell_2}{2}) - U_t(z_h = 0) \right| \quad (10)$$

حيث $\frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_{hh}^* \ell_2^2}$ الطاقة الكوانتية القياسية للإلكترون، ولا يمكن في هذه الحالة تطبيق نظرية الاضطراب، لأن

$$\left| U_i(z_h = \frac{\ell_2}{2}) - U_i(z_h = 0) \right| \text{ لا يُعتبر حد اضطراب في هذه الحالة.}$$

يُعتبر الطرف اليميني في المترابحة (10) عن القيمة المطلقة للفرق بين الطاقة الكمونية للثقب عند حدود الطبقة، وعند مركزها. يمكن الحصول على $U(z_h)$ الطاقة الكمونية للثقب من أخذ القيمة الوسطى لكمون التأثير المتبادل إلكترون - ثقب $u(\vec{r}_e, \vec{r}_h)$ على التابع الموجي (8)، نحصل بالنتيجة على:

$$U(z_h) = \frac{16e^2}{\varepsilon_2 \lambda^2 \ell_2} \int_0^\infty dx \left(4 + \frac{\lambda^2}{\ell_2^2} x^2\right)^{-\frac{3}{2}} \left\{ \frac{1}{x} + \frac{x \cos\left(\frac{2\pi}{\ell_2} z_h\right)}{x^2 + 4\pi^2} - \frac{4\pi^2 e^{-\frac{x}{\ell_2}} \operatorname{ch}\left(x \frac{z_h}{\ell_2}\right)}{x(x^2 + 4\pi^2)} + \frac{8\pi^2 sh \frac{x}{2}}{x(x^2 + 4\pi^2)(e^{2x} - \delta_1 \delta_3)} \left[(\delta_1 \delta_3 + e^x f_1) sh\left(x \frac{z_h}{\ell_2}\right) + e^x f_2 sh\left(x \frac{z_h}{\ell_2}\right) \right] \right\} \quad (11)$$

نضيف إلى الطاقة الكمونية في العلاقة (11) الطاقة الكمونية الذاتية $U_{SA}(z_h)$ للثقب (6)، بعد تطبيق تقريب القطع المكافئ (اعتبار الطاقة الكمونية في العلاقة (11) على شكل قطع مكافئ، والنشر وفق ηz_h مكتفياً بالمرتبة الثانية) نحصل على الطاقة الكمونية الكلية بالصيغة:

$$U_i(\lambda, z_h) \approx U_0(\lambda, \ell_2) + k_1(\lambda, \ell_2) z_h^2 \quad (12)$$

حيث

$$U_0(\lambda, \gamma_2, \ell_2) = -\frac{16e}{4\pi \varepsilon_0 \varepsilon_2 \gamma_2 \ell_2} F_1(\lambda, \gamma_2, \ell_2); \quad (13)$$

$$k_1(\lambda, \gamma_2, \ell_2) = \frac{8\pi e^2}{\varepsilon_0 \gamma_2 \varepsilon_2 \ell_2^3} \int_0^\infty dx \left(4 + \frac{\lambda^2}{\ell_2^2} x^2\right)^{-\frac{3}{2}} \left\{ \frac{x}{x^2 + 4\pi^2} + \frac{x e^{-\frac{x}{\ell_2}}}{x^2 + 4\pi^2} - (\delta_1 \delta_3 + e^x f_1) \frac{2x \operatorname{sh} \frac{x}{2}}{(e^{2x} - \delta_1 \delta_3)(x^2 + 4\pi^2)} \right\} \quad (14)$$

$$F_1(\lambda, \gamma_2, \ell_2) = \int_0^\infty dx \left(4 + \frac{\lambda^2}{\ell_2^2} x^2\right)^{-\frac{3}{2}} \left\{ \frac{3x^2 + 8\pi^2}{4x(x^2 + 4\pi^2)} - \frac{8\pi^4(1 - e^{-x})}{x^2(x^2 + 4\pi^2)} + \frac{32\pi^4 \delta_1 \operatorname{sh}^2\left(\frac{x}{2}\right)}{x^2(x^2 + 4\pi^2)^2(e^x - \delta_1)} \right\} \quad (15)$$

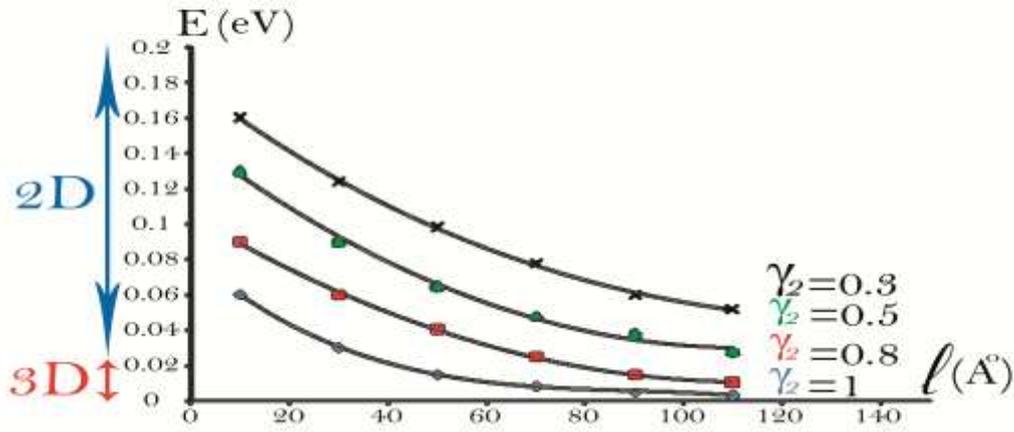
حيث تم إهمال الحد الخطي من المنشور (11) بسبب صغر الثابت f_2 ، ونحصل من حل معادلة شرودنجر من أجل الكمون (12) على طاقة التغيير لارتباط الاكستون الثقيل في حالة كون الطاقة الكوانتية صغيرة، بالصيغة التالية:

$$E_{1s}^{ex-hh}(\lambda, \gamma_2, \ell_2) = \frac{\hbar^2}{2\mu_{\perp}\lambda^2} - \frac{4e^2}{\pi\epsilon_0\epsilon_2\gamma_2\ell_2} F_1(\lambda, \ell_2) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_2} F_2(\ell_2) + \left[\frac{\hbar^2}{2m_{hh}} (k_1(\lambda, \ell_2) + k_2(\ell_2)) \right]^{1/2} \quad (16)$$

حيث

$$F_2(\ell_2) = \frac{1}{\ell_2} \int_0^{\infty} dx (e^{2x} - \delta_1\delta_3)^{-1} [\delta_1\delta_3 + e^x f_1]; \quad (17)$$

$$k_2(\ell_2) = \frac{e^2 f_1}{2\pi\epsilon_0\gamma_2\epsilon_2\ell_2^3} \int_0^{\infty} dx (e^{2x} - \delta_1\delta_3)^{-1} x^2 e^x; \quad (18)$$



الشكل (10): طاقة اكستون فان - موت بدلالة l سماكة الطبقة، والعازلية الكهربائية للطبقات

$$\epsilon_1 = 1, \quad \epsilon_2 = 6.1, \quad \epsilon_3 = 4$$

الاستنتاجات والتوصيات

الاستنتاجات

1. ينتج من الشكل (10) أن طاقة اكستون فان - موت تتناقص مع زيادة سماكة الطبقة. وتزداد مع انزوتروبية العازلية الكهربائية للطبقات.

2. يؤثر معامل انزوتروبية العازلية الكهربائية للطبقة على اكستون فان - موت في طبقة رقيقة (حفرة كمون) في

مجال واسع $E_{ex}^{3D} < E_{ex} < E_{ex}^{2D}$ ، وتكون قيمة $E_{ex}^{1s}(\gamma, \ell_2)$ في وسط لامتناحي سماكته $\ell_2 \approx 30 \text{ \AA}$ قريبة لـ

E_{ex}^{2D} (طاقة اكستون ثنائي البعد) أكثر من قربها لـ E_{ex}^{3D} (طاقة اكستون ثلاثي البعد) عندما $\gamma = 1$ ومن أجل نفس السماكة السابقة.

3. ينتج أنه عند زيادة سماكة الطبقة فإن طاقة حاملة الشحنة تتناقص، تتفق هذه النتيجة مع ظاهرة كيلدش (Keldysh) التي تبين أن طاقة التأثير المتبادل بين الشحنات تتناسب عكسياً مع زيادة سماكة الطبقة [14] ، يمكن تفسير ذلك بأن كمون كولون لحاملة الشحنة يزداد في الطبقة الرقيقة بسبب نقص ظاهرة الحجب للشحنة، أي بسبب تناقص التأثير المتبادل بين الشحنة وخيالها عند الحدود الفاصلة بسبب زيادة سماكة الطبقة، وكما ذكرنا أعلاه بسبب الحجز الكمومي الأحادي البعد لحاملة الشحنة في الطبقة الرقيقة.

التوصيات

يمكن تعميم الدراسة بحيث تشمل تشكل اكستون يكون الإلكترون في طبقة والثقب في طبقة مجاورة أخرى، وكذلك الخوض في دراسة تأثير طاقة كمون الخيال الكهربائي (الطاقة الكمونية الذاتية لتأثير الشحنة مع خيالها عبر الحاجز الكموني)، أي دراسة تأثير الطاقة الكمونية بين الإلكترون والثقب عبر الحواجز الكمونية عند حدود الطبقات المتماصة.

المراجع:

- 1-Efthimios Kaxiras , Atomic and Electronic Structure of Solids, Cambridge University Press United States of America, New York ,(2003).
- 2- Charles Kittel, Introduction to Solid state physics (Eighth Edition), USA, (2005).
- 3-Carlo Piermarocchi , Introduction to excitons and their role in photovoltaic processes , Michigan State University, East Lansing, Michigan ,(2008).
- 4- A. Kronenberger, P. Pringsheim, Z. Phys. 40, 75 (1926).
- 5- I.V. Obreimov, W.J. de Haas, Proc. Acad. Sci. Amsterdam 31, 353 (1928).
- 6- R. S. Knox, INTRODUCTION TO EXCITON PHYSICS, Rochester, New York 14627, USA.
- 7- فاهود؛ محمد. كمون كولون للإلكترون والثقب (الاكستون) في الأفلام الرقيقة، وتأثير معامل اللاتناحي للعازلية الكهربائية،، المجلد 33 رقم 2(2011)، مجلة جامعة تشرين للبحوث والدراسات العلمية.
- 8-Alexey V. Kavokin , Jeremy J. Baumberg, Guillaume Malpuech, Fabrice P. Laussy, Micro cavities , Oxford University Press,(2007).
- 9-H. Zimmermann, R.Boyn, C.Michel, P.Rudolph , Mechanism of the Temperature Dependence of Bound-Exciton Photoluminescence of CdTe Crystals, Journal of Crystal Growth ,(1990).
- 10- D'ANDREA, R. DEL SOLE and K. CHO, Exciton Quantaization in CdTe THIN Films, Osaka Univesity (1989).
- 11-Richard Corkish, Daniel S.P. Chan, and Martin A. Green , Excitons in silicon diodes and solar cells: A threeparticle theory , Journal of Applied Physics (1996).
- 12- Yong Zhang, Angelo Mascarenhas, and Satyen Deb, Effects of excitons on solar cells, Journal of Applied Physics (1998).
- 13-Thomas Kirchartz ,Generalized detailed balance theory of solar cells. Diese Dissertation ist auf den Internet seiten der Hochschulbibliothek online verfugbar (2009).
- 14- Urs Aeberhard , Simulation of nanostructure-based high-efficiencysolar cells: challenges, existing approaches andfuture directions, JOURNAL OF SELECTED TOPICS IN QUANTUM ELECTRONICS,(2013).

- 15-OumarAbsatouNiasse, MahamadouAbdouTankari, FatouDia, Nacire Mbengue Amadou Diao, Mamadou Niane, Moulaye Diagne, Bassirou Ba, Gilles Levebvre, Optimization of Electric Parameters CdS/CdTe Thin Film Solar Cell Using Dielectric Model, World Journal of Condensed Matter Physics (2016).
- 16-Effets des excitons sur le rendement quantique de la cellule solaire CdS/CdTe par le modèle de la fonction diélectrique , O.A. Niasse, B. Mbengue , B. BA , A. Ndiaye , I. Youm, Revue des Energies Renouvelables (2009).
- 17- Stefan T. Omelchenko, Yulia Tolstova, Harry A. Atwater, Nathan S. Lewis, Excitonic Effects in Emerging Photovoltaic Materials: A Case Study in Cu₂O.
- 18-T. Anderson & D. Albin, CdTe Thin Film Solar Cells and Modules Tutorial, 42nd IEEE Photovoltaics Specialists Conference - New Orleans, (2015).
- 19 - Arno Smets, Thin-Film PV Technologies (CdTe PV Technology), Delft University of Technology.
- 20- Stephan Glusch , exciton in low-dimensional semiconductor (theory, numerical model, applications), springer series in solid state sciences, (2003).
- 21- Efros A. A, excitons in Structures with quantum's yams// FTS.-1986.- V.20.- N 10.- p.1987-1997
- 22- فاهود؛ محمد. تأثير طاقة الكمون الذاتي للإلكترون والنقبة على طيف طاقة أكستون فان - موت في الجمل المتعددة الطبقات، المجلد 35، رقم 3 (2013). من مجلة جامعة تشرين للبحوث والدراسات العلمية.