الجمهوري الجزائرية الديمقراطية الشعبية
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
جامعة الشهيد حمة لخضر_ الوادي
كلية العلوم الدقيقة _قسم الفيزياء

رقم الترتيب:
رقم التسلسل:
المجال: علوم المادة
التخصص: فيزياء إشعاع وطاقة

مذكرة تخرج مقدمة لنيل:

شهادة الماستر

العنوان:

تطبيق فيزياء الليزر الشديد على المواد المكثفة

من إعداد: الطالبة جميلي منال

نوقشت يوم: 2026\06\07

أمام لجنة المناقشة المكونة من:

د.بوزنة فاطمة الغنبازية	أستاذ محاضر ب	رئيسا
د.أحميم رشيد	أستاذ محاضر أ	مناقشا
د. مصباح ضيف الله	أستاذ تعليم عالي	مشرفا

الموسم الجامعي: 2025\2026

إهداء

من قال أنا لها "نالها" وأنا لها إن ابت رغما عنها أتيت بها.
لم تكن الرحلة قصيرة ولا ينبغي لها أن تكون لم يكن الحلم قريبا ولا الطريق كان محفوف بالتسهيلات لكني فعلتها ونلتها .

إلى الذي زين اسمي بأجمل الألقاب، من دعمني بلا حدود وأعطاني بلا مقابل ....

من علمني أن الدنيا كفاح وسلاحه العلم والمعرفة داعمي الأول في مسيرتي و سندي وقوتي وملاذي بعد الله .... إلى فخري واعتزازي

أبي الغالي

إلى من جعل الله الجنة تحت أقدامها واحتضنني قلبها قبل يدها
وسهلت لي الشدائد بدعائها إلى القلب الحنون والشمعة التي كانت لي في الليالي المظلمات

سر قوتي ونجاحي
امي الغالية

إلى ضلعي الثابت وأمان ايامي

الى من شددت عضدي بهم فكانوا لي ينابيع ارتوي منها إلى خيرة أيامي وصوفتها

إلى قرة عيني اخوتي واخواتي

لكل من كان عونا وسنداً في هذا الطريق.... للأصدقاء الأوفياء ورفقاء السنين

الى أصحاب الشدائد والأزمات

أهديكم هذا الإنجاز وثمرة نجاحي الذي لطالما تمنيته

ها أنا اليوم أكملت وأتممت أول ثمراته بفضله سبحانه و تعالى فالحمد لله على ما وهبني

ابنتكم منال

شكر و عرفان

بسم الله الرحمن الرحيم

الحمد لله الذي بنعمته تتم الصالحات، والصلاة والسلام على أشرف المرسلين.

في ختام هذا العمل، لا يسعني إلا أن أتقدم بخالص الشكر وعظيم الامتنان لكل من كان له أثر في إنجاز هذه المذكرة.

أتوجه بجزيل الشكر والتقدير إلى أستاذي المشرف الأستاذ مصباح ضيف الله على إشرافه القيّم، وتوجيهاته العلمية الدقيقة، وصبره ومتابعته المستمرة طوال فترة إعداد هذا العمل، والتي كان لها بالغ الأثر في إخراجه في صورته النهائية.

كما أتقدم بخالص الشكر والتقدير إلى أعضاء لجنة المناقشة الموقرين، الأستاذ رشيد احميم والأستاذة بوزنة فاطمة، على تفضلهما بقبول مناقشة هذه المذكرة، وعلى ما سيقدمانه من ملاحظات وتوجيهات علمية قيّمة تسهم في إثراء هذا العمل والارتقاء به.

ولا يفوتني أن أخص بالشكر الأستاذ فرحات رحومة، أستاذ المنهجية، على دعمه وتوجيهاته السديدة التي ساعدت بشكل كبير في تحسين الإطار المنهجي لهذا البحث وتنظيمه.

كما أتقدم بجزيل الشكر إلى جميع أساتذتي الأفاضل الذين كان لهم الفضل في تكويني العلمي طيلة مشواري الدراسي، بما قدموه من علم ونصح وتوجيه.

وأعبر عن امتناني العميق لعائلتي الكريمة، التي كانت السند والدعم الدائم لي، ووفرت لي كل الظروف الملائمة لإتمام هذا العمل.

كما أتقدم بالشكر إلى الطالبة شفاء قادي على مساعدتها وتعاونها ودعمها خلال إنجاز هذا العمل، فلها مني خالص التقدير والامتنان.

كما أشكر زملائي وأصدقائي على دعمهم وتشجيعهم المستمر.

وفي الأخير، أسأل الله أن يجعل هذا العمل المتواضع نافعًا ومباركًا، وأن يكون إضافة علمية في مجاله، والله ولي التوفيق.

الفهرس

قائمة المصطلحات العلمية **viii**

المقدمة العامة **1**

1 مدخل إلى فيزياء تفاعل الليزر الشديد مع المواد الصلبة **5**

1.1 تمهيد 5
2.1 نظرية بلوخ 5
3.1 الربط الحكم 8
4.1 إتصال وطور وإنحناء بيري 12
5.1 توليد التوافقيات العالية HHG 18
6.1 خلاصة 22

2 تطبيق نظرية الحقول القوية على نماذج طوبولوجية أحادية البعد **24**

1.2 تمهيد 24
2.2 نموذج-سو-شريفر-هيغر "SSH model" 24
3.2 إقتران سلسلة SSH بحقل الليزر في تقريب ثنائي القطب 29
4.2 نموذج رايس ميلي "Rice-Mele model" 31
5.2 الخصائص الطوبولوجية لنموذج رايس-ميلي (Rice-Mele Model) . . 33
6.2 إقتران نموذج Rice-Mele بحقل الليزر في تقريب ثنائي القطب . . . 34
7.2 خلاصة 36

3 تطبيق نظرية الحقول القوية على نموذج طوبولوجي ثنائي البعد **37**

1.3 تمهيد: 37
2.3 نموذج هالدين 38
3.3 إقتران شبكة هالدين بحقل الليزر في تقريب ثنائي القطب 43
4.3 تطبيق نموذج هالدين على نيتريد البورون السداسي (hBN) 44
5.3 إقتران شبكة hBN بحقل ليزري قوي 45
6.3 خلاصة 47

4 النتائج والمناقشة **48**
1.4 تمهيد 48
2.4 مناقشة نتائج التطبيق في بعد واحد 48
3.4 مناقشة نتائج التطبيق في بعدين 56
4.4 خلاصة 63

الخلاصة العامة **64**

الملحق **66**
1. اتفاقيات بلوخ ومواقع داخل الخلية 66
2. طور بيري واتفاقيات بلوخ 67
3. نتائج اخرى 70

المراجع **75**

قائمة الأشكال

1.1 رسم توضيحي لدالة بلوخ 7
2.1 مخطط نموذج الخطوات الثلاثة لتوليد التوافقيات العالية [5]. 19
3.1 مسارات الإلكترونات وطاقات إعادة التصادم في نموذج الخطوات الثلاثة. 21
1.2 مخطط يوضح نموذج SSH. 25
2.2 بنية نطاقات الطاقة لنموذج SSH 27
3.2 نبضة الليزر $\mathbf{A(t)}$ بدلالة الزمن t, ... 31
1.3 شبكة هالدين على بنية سداسية مكوّنة من ذرتين A وB. 38
2.3 البنية الحزمية لنموذج هالدين عند ثلاث قيم مختلفة لمعامل القفز من الرتبة الثانية t_2 42
1.4 طور بيري γ/π كدالة في الكمون الموضعي u_0 لنموذج رايس-ميلي (Rice-Mele) 49
2.4 أطياف التوافقيات العالية HHG 51
3.4 التوافقيات العالية من الرتبة 2 إلى 25 بدلالة الكمون الموضعي u_0. . . 53
4.4 المسارات وأطياف توليد التوافقيات العالية HHG 56
6.4 المسارات وأطياف توليد التوافقيات العالية HHG 57
8.4 أطياف التوافقيات العالية HHG 61
9 علاقات التشتت في نموذج SSH، 68
10 طيف توليد التوافقيات العالية كدالة لسعة الحقل الليزري A_0 لنموذج رايس-ميلي. 70
11 Harmonic-order-1 71
12 Harmonic-order-2 71
13 Harmonic-order-3 72
14 Harmonic-order-4 72
15 Harmonic-order-5 72
16 Harmonic-order-10 72
17 Harmonic-order-11 73
18 Harmonic-order-12 73

73 . . . . . Harmonic-order-15 19
73 . . . . . Harmonic-order-17 20
74 . . . . . Harmonic-order-18 21
74 . . . . . Harmonic-order-19 22
74 . . . . . Harmonic-order-22 23
74 . . . . . Harmonic-order-25 24

قائمة الجداول

1.1 قيم زمن الولادة t_b وزمن إعادة التصادم t_r وطاقة إعادة التصادم E_{coll}/U_p. 22

قائمة المصطلحات العلمية

فيزياء الآتوثانية	*Attosecond physics*
فيزياء الليزر الشديد	*Strong field laser physics*
فيزياء المواد المكثفة	*Condensed Matter Physics*
نموذج الربط المحكم	*Tight – Binding Model*
إتصال بيري	*Berry connections*
طور بيري	*Berry phase*
إنحناء بيري	*Berry curvature*
طاقات المواقع	*site energies*
انتقال	*hopping*
التحويلات المعيارية	*Gauge Transformations*
التأين النفقي	*Tunnel ionization*
استبدال بيرلز	*Peierls substitution*
سلسلة متثنية	*dimerized chain*
تناظر الانعكاس	*inversion symmetry*
حالات الحافة	*Edge states*
نظرية التسارع	*acceleration theorem*
تقريب ثنائي القطب الكهربائي	*dipole approximation*
الترابط بين الحزم	*interband coherence*

الاستجابة غير الخطية	*Nonlinear Response*
توليد التوافقيات العالية	*High – Harmonic Generation*
البصريات غير الخطية	*Nonlinear Optics*
الحقل الكهربائي الليزري	*Laser Electric Field*
التيار داخل الحزمة	*intraband current*
التيار بين الحزمة	*interband current*
الحالة البديهية	*Trivial case*
الحالة غير البديهية	*Non – trivial case*
المواد الحجمية	*Bulk Materials*
نبضة ليزرية	*Laser Pulse*
نظرية بلوخ	*Bloch's Theorem*
دالة بلوخ	*Bloch Function*
حالة بلوخ	*Bloch State*
شعاع الموجة	*Wave Vector*
فضاء الشعاع الموجي	*Reciprocal Space*
منطقة بريلوين الأولى	*First Brillouin Zone*
الشبكة البلورية	*Crystal Lattice*
الكمون الدوري	*Periodic Potential*
البنية الإلكترونية	*Electronic Structure*
البنية الحزمية	*Band Structure*
حزمة التكافؤ	*Valence Band*

حزمة التوصيل	*Conduction Band*
فجوة الطاقة	*Band Gap*
الانتقال البيني للحزم	*Interband Transition*
التيار داخل الحزمة	*Intraband Current*
التيار بين الحزم	*Interband Current*
الترابط	*Coherence*
أقرب جار	*Nearest Neighbor*
استبدال بيرلز	*Peierls Substitution*
الطور الهندسي	*Geometric Phase*
الخصائص الهندسية	*Geometric Properties*
الخصائص الطوبولوجية	*Topological Properties*
الانتقال الطوبولوجي	*Topological Transition*
العازل الطوبولوجي	*Topological Insulator*
حالات الحافة	*Edge States*
كسر التناظر	*Symmetry Breaking*
تقريب ثنائي القطب الكهربائي	*Dipole Approximation*
الديناميكيات الإلكترونية	*Electron Dynamics*
الاستقطاب الكهربائي	*Electric Polarization*
المجال الكهرومغناطيسي	*Electromagnetic Field*

رتبة التوافقي	$Harmonic\ Order$
قطع التوافقيات	$Harmonic\ Cutoff$
تحويل فوريه	$Fourier\ Transform\ (FFT)$
المواد ثنائية البعد	$Two-Dimensional\ Materials$
المواد أحادية البعد	$One-Dimensional\ Materials$

المقدمة العامة

المقدمة العامة

شهدت الفيزياء الحديثة خلال العقود الأخيرة تطورًا كبيرًا بفضل التقدم المتسارع في تقنيات الليزر فائق الشدة وفائق القصر، حيث أصبح من الممكن توليد نبضات ليزرية ذات شدات مرتفعة وأزمنة قصيرة للغاية تصل إلى مجال الأتوثانية (10^{-18} s). وقد أدى هذا التطور إلى ظهور مجال علمي حديث يُعرف بفيزياء الأتوثانية (Attosecond Physics)، والذي يهدف إلى دراسة حركة الإلكترونات داخل المادة على المقاييس الزمنية الطبيعية لديناميكيتها، مما أتاح إمكانية تتبع الظواهر الإلكترونية فائقة السرعة بدقة غير مسبوقة. وتُعد هذه القفزة العلمية من أهم الإنجازات في مجال التفاعل بين الضوء والمادة، لما لها من دور أساسي في فهم العمليات غير الخطية التي تحدث تحت تأثير الحقول الكهرومغناطيسية القوية [1].

إرتبط تطور فيزياء الأتوثانية ارتباطًا وثيقًا بظاهرة توليد التوافقيات العليا (High-Order Harmonic Generation, HHG)، التي تُعتبر من أبرز الظواهر غير الخطية الناتجة عن تفاعل الليزر الشديد مع المادة، ففي الأنظمة الذرية والغازية، يتم تفسير هذه الظاهرة بواسطة نموذج الخطوات الثلاث، الذي يقوم على تأين الإلكترون بواسطة المجال الليزري، ثم تسارعه حرا بفعل الحقل، قبل أن يعيد الاتحاد مع الذرة مطلقًا فوتونات ذات طاقات مرتفعة [2]، وقد سمحت هذه الظاهرة بتوليد نبضات أتوثانية فتحت المجال أمام دراسة الديناميكا الإلكترونية فائقة السرعة، كما أسهمت في تطوير تطبيقات عديدة في البصريات غير الخطية ودراسة ديناميكا الإلكترونات على سلم الأزمنة فائقة القصر.

مع التطور المستمر في تقنيات الليزر والمواد النانوية، إنتقل الاهتمام من دراسة التوافقيات العليا في الغازات إلى دراستها داخل المواد الصلبة، وذلك لما تتميز به الأنظمة البلورية من بنية إلكترونية غنية وإمكانات تطبيقية واسعة في مجال الإلكترونيات والبصريات فائقة السرعة. ففي المواد الصلبة، لا تتحرك الإلكترونات بحرية كما هو الحال في الذرات المعزولة، بل تتأثر بالبنية الدورية للشبكة البلورية وبالحزم الطاقوية الناتجة عنها، مما يؤدي إلى ظهور

ديناميكا إلكترونية أكثر تعقيدًا تحت تأثير الحقول الليزرية القوية. وقد أدى ذلك إلى نشوء مجال بحثي واسع يُعرف بفيزياء الحقول القوية في المواد الصلبة (Strong-Field Physics in Solids)، الذي يهتم بدراسة استجابة المواد البلورية للحقول الكهرومغناطيسية الشديدة [3].

إن دراسة تفاعل المواد الصلبة مع الحقول الليزرية القوية تُعد مسألة معقدة من الناحية النظرية والحسابية، نظرًا لأن المواد الصلبة تُعد أنظمة متعددة الجسيمات (Many-Body System)، حيث تتفاعل أعداد كبيرة من الإلكترونات فيما بينها ومع البنية البلورية بصورة متزامنة [5,4]. ومن أجل وصف هذه التفاعلات بدقة عالية، تُستخدم عادةً نظرية تابعي الكثافة المتعلقة بالزمن (Time-Dependent Density Functional Theory, TDDFT)، والتي تسمح بأخذ التأثيرات الإلكترونية المتبادلة بين الجسيمات ومساهمات البنية الحزمية الإلكترونية، إضافةً إلى حدود التبادل والارتباط (Exchange-Correlation Terms). غير أن هذا النوع من النمذجة يتطلب موارد حسابية ضخمة نظرًا لتعقيده العددي الكبير، وغالبًا ما يستدعي استخدام حواسيب فائقة الأداء (Supercomputers)، خاصة عند دراسة الأنظمة البلورية تحت تأثير الحقول الشديدة وفائقة القصر [5,4].

للتغلب على هذه الصعوبات الحسابية، يتم في العديد من الدراسات اعتماد نماذج تقريبية فعالة تحتفظ بالفيزياء الأساسية للظاهرة مع تقليل التكلفة الحسابية. تعتمد هذه الدراسة على وصف البنية الإلكترونية للأنظمة البلورية باستخدام نظرية بلوخ وتقريب الربط المحكم (Tight-Binding Approximation)، مع حل معادلة شرودنغر المتعلقة بالزمن (Time-Dependent Schrödinger Equation, TDSE)، وذلك بهدف دراسة ديناميكا الإلكترونات وتوليد التوافقيات العليا في الأنظمة المدروسة بكفاءة عددية مع الحفاظ على وصف فيزيائي ملائم للتأثيرات الأساسية المرتبطة بالبنية الإلكترونية والطوبولوجية [4].

تكمن أهمية هذا المجال في كونه يطرح إشكالية علمية أساسية تتمثل في عرض طريقة نظرية بديلة عن تجربة مطيافية التدقيق الزاوي لإصدار الإلكترونات الضوئية Angle-resolved photoemission spectroscopy (ARPES) في دراسة البنية الإلكترونية والخصائص الماكروسكوبية للمادة الصلبة تعتمد على تسليط ليزر عالي الشدة وقصير النبض.

في هذا السياق، تُعتبر النماذج الطوبولوجية من أهم الأدوات النظرية المستخدمة لوصف الأنظمة البلورية الحديثة، حيث تسمح بدراسة تأثير الخصائص الماكروسكوبية على حركة الإلكترونات وعلى الخصائص الإلكترونية والبصرية للمواد، ومن بين هذه النماذج يبرز نموذج Su-Schrieffer-Heeger (SSH)، الذي يُعد من أشهر النماذج أحادية

البعد المستخدمة في دراسة الأنظمة الطوبولوجية والانتقالات الإلكترونية داخل السلاسل الدورية [6]، ويتميز هذا النموذج بقدرته على وصف الحالات الحديّة والطبيعة الطوبولوجية للأنظمة ذات الروابط المتناوبة، مما جعله نموذجًا مرجعيًا في دراسة الخصائص الإلكترونية للمواد منخفضة الأبعاد.

يُعد نموذج Rice-Mele امتدادًا لنموذج منSSH خلال إدخال عدم تناظر إضافي في الكمونات والروابط، الأمر الذي يسمح بدراسة تأثير الاستقطاب والبنية غير المتماثلة على ديناميكا الإلكترونات والاستجابة غير الخطية للمادة [7]، وقد استُخدم هذا النموذج في العديد من الدراسات المتعلقة بالتأثيرات الطوبولوجية والنقل الإلكتروني في الأنظمة أحادية البعد.

وفي سياق الدراسات السابقة المتعلقة بالأنظمة أحادية البعد، تناولت الدراسة التالية [8] تحليل أطياف التوافقيات العليا في مادة البولي أسيتيلين باستخدام نموذج Su-Schrieffer-Heeger (SSH)، حيث تم إبراز دور البنية الإلكترونية والطوبولوجية للنظام في تحديد طبيعة الاستجابة غير الخطية للمادة تحت تأثير الليزر الشديد، وقد ساهمت هذه الأعمال في إبراز أهمية النماذج أحادية البعد في فهم ديناميكا الإلكترونات داخل المواد الصلبة، أما في الأنظمة ثنائية البعد، فقد إزداد الاهتمام في السنوات الأخيرة بالمواد الطوبولوجية لما تتميز به من خصائص إلكترونية غير إعتيادية مرتبطة بالبنية الطوبولوجية للحزم الطاقوية، ومن أبرز النماذج المستخدمة في هذا المجال نموذج هالدين (Haldane Model)، الذي قدم وصفًا نظريًا لتأثير هول الكمومي دون الحاجة إلى مجال مغناطيسي خارجي [9]. ويُعد هذا النموذج من أهم النماذج الطوبولوجية ثنائية البعد، حيث يسمح بدراسة تأثير الأطوار الطوبولوجية على ديناميكا الإلكترونات وعلى الخواص البصرية غير الخطية للمواد.

يسمح تطبيق نموذج هالدين على مواد حقيقية مثل نتريد البورون السداسي (hBN) بإجراء دراسات مقارنة بين النماذج النظرية والأنظمة الفيزيائية الواقعية، خاصة أن هذه المادة تمتلك بنية سداسية ثنائية البعد مشابهة للغرافين، لكنها تتميز بوجود فجوة طاقوية ناتجة عن اختلاف الذرتين المكونتين للشبكتين الفرعيتين. وتُعد هذه الخصائص مناسبة لدراسة البنية الإلكترونية والطوبولوجية للمواد.

على الرغم من تعدد الدراسات المتعلقة بالأنظمة الطوبولوجية وتوليد التوافقيات العليا، إلا أن المقارنة المنهجية المباشرة بين تأثير البعد الواحد والبعدين على ديناميكا الإلكترونات وعلى أطياف التوافقيات العليا تحت نفس شروط الليزر لا تزال محدودة، كما أن تأثير البنية الطوبولوجية وعدم تناظر الكمون على الاستجابة غير الخطية للأنظمة منخفضة الأبعاد لم

يُدرس بصورة شاملة في إطار موحد يجمع بين الأنظمة أحادية وثنائية البعد.

انطلاقًا من ذلك، تتمثل إشكالية هذه الدراسة في فهم العلاقة بين البنية الإلكترونية والطوبولوجية للأنظمة البلورية منخفضة الأبعاد وبين ديناميكا الإلكترونات وتوليد التوافقيات العليا تحت تأثير الحقول الليزرية القوية، مع تحديد دور البعد الهندسي والطبيعة الطوبولوجية للنظام في تشكيل خصائص الإشعاع المنبعث وإمكانية استخدامه لاستكشاف خصائص المادة الصلبة. ومن هنا تأتي أهمية هذه الدراسة، التي تهدف إلى تحليل ديناميكا الإلكترونات وتوليد التوافقيات العليا في أنظمة مختلفة الأبعاد والبنى الطوبولوجية، مع إجراء دراسة مقارنة تسمح بفهم تأثير البعد والبنية الإلكترونية والطوبولوجية من خصائص الإشعاع المنبعث تحت تأثير الليزر الشديد.

لتحقيق هذه الأهداف، تم الاعتماد على الحل العددي لمعادلة شرودنغر المتعلقة بالزمن (Time-Dependent Schrödinger Equation, TDSE) في إطار تقريب الربط المحكم (Tight-Binding Approximation)، من أجل دراسة استجابة الأنظمة المدروسة تحت تأثير نبضة ليزرية قوية وتحليل الخصائص البنيوية والطوبولوجية من خلال دراسة ديناميكا الإلكترونات وأطياف التوافقيات العليا.

تم تقسيم هذه المذكرة إلى أربعة فصول رئيسية. خُصص الفصل الأول للإطار النظري، حيث تم التطرق إلى نظرية بلوخ، وتقريب الربط المحكم، ومقادير بيري، بالإضافة إلى نموذج الخطوات الثلاث المستخدم في تفسير ظاهرة توليد التوافقيات العليا.

أما الفصل الثاني فقد خُصص لدراسة الأنظمة أحادية البعد، حيث تم تطبيق النماذج النظرية على نموذجي SSH وRice-Mele وتحليل الخصائص البنيوية والطوبولوجية إنطلاقا من ديناميكا الإلكترونات والاستجابة غير الخطية للمادة. يتناول الفصل الثالث دراسة الأنظمة ثنائية البعد من خلال دراسة نموذج هالدين وتطبيقه على مادة نتريد البورون السداسي (hBN) بهدف إجراء دراسة مقارنة وتحليل البنية الإلكترونية والطوبولوجية من التوافقيات العليا.

خُصص الفصل الرابع والأخير لعرض النتائج المتحصل عليها ومناقشتها وتحليل تأثير الأبعاد وفهم البنية الإلكترونية والطوبولوجية للأنظمة المدروسة من ديناميكا الإلكترونات وخصائص الإشعاع المنبعث تحت تأثير الليزر الشديد.

الفصل الأول:

مدخل إلى فيزياء تفاعل الليزر

التسديد مع المواد الصلبة

الفصل 1

مدخل إلى فيزياء تفاعل الليزر الشديد مع المواد الصلبة

1.1 تمهيد

يمُثل فهم سلوك الإلكترونات في المواد الصلبة حجر الزاوية في فيزياء المادة المكثفة، وهو أمر بالغ الأهمية عند دراسة تفاعل هذه المواد مع حقول الليزر الشديدة، لا سيما في سياق الظواهر اللاخطية مثل توليد التوافقيات العالية (HHG) ، الذي يوفر وسيلة فعالة لاستكشاف الديناميكيات الإلكترونية على مقاييس زمنية فائقة القِصر. في هذا الفصل، تُوضع الأسس النظرية اللازمة لوصف الحالات الإلكترونية في البلورات المثالية، التي تتميز بوجود كمون دوري ناتج عن الترتيب المنتظم للذرات في الشبكة البلورية.

يبدأ الفصل بعرض نظرية بلوخ بوصفها الإطار الأساسي لوصف الإلكترونات في الأنظمة الدورية. يلي ذلك الإنتقال إلى نموذج الربط المحكم كأداة عملية لبناء الحالات الإلكترونية. يُختتم الفصل بإشتقاق المفاهيم الهندسية الكمية المرتبطة بالتطور الزمني للحالات الإلكترونية تحت تأثير المجالات الخارجية، والتي تُعد ضرورية لفهم إستجابة المادة للحقول الضوئية الشديدة والظواهر اللاخطية المرتبطة بها.

2.1 نظرية بلوخ

تتميّز فيزياء الحالة الصلبة، بوجود كمون دوري ناتج عن البنية البلورية للمادة، على عكس الطور الغازي [11,10] . يُعبَّر رياضيًا عن دورية الكمون بالعلاقة:

$$V(\mathbf{r}+\mathbf{a}_j)=V(\mathbf{r})، \quad j=1,2,3. \tag{1.1}$$

حيث $\mathbf{a}_j$ تمثل أشعة الشبكة الأولية في فضاء موضع ثلاثي الأبعاد، ويمكن تعميم هذه الصياغة بسهولة إلى أنظمة ذات أبعاد أقل أو أكثر [10] .

في نظام الوحدات الذرية ($\hbar = 4\pi\varepsilon_0 = m_e = |e| = 1$)، يُعطى هاملتوني الإلكترون في البلورة (في غياب أي حقل خارجي) بالعلاقة:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2} + V(\mathbf{r}). \tag{2.1}$$

نظراً لدورية الكمون، فإن الهاملتوني $\hat{H}$ يتبادل مع مؤثرات الإزاحة الشبكية[1] [11,10]:

$$\hat{T}_j = \hat{T}(\mathbf{a}_j) = e^{\mathbf{i}\mathbf{p}\cdot\mathbf{a}_j}, \quad j = 1,2,3 \tag{3.1}$$

كما يتبادل مع جميع مؤثرات الإزاحة الموافقة لأشعة الشبكة العامة ($\hat{T}_{n_1n_2n_3}$) [11] حيث:

$$\mathbf{R}_{n_1n_2n_3} = \sum_{j=1}^{3} n_j\mathbf{a}_j, \quad n_j \in \mathbb{Z}. \tag{4.1}$$

وهو شعاع شبكة. علاوة على ذلك، جميع مؤثرات الإزاحة تتبادل فيما بينها، وبالتالي، يجب أن يكون هناك مجموعة أشعة ذاتية مشتركة للهاملتوني $\hat{H}$ وجميع مؤثرات الإزاحة الشبكية $\hat{T}_j$.

تُعرّف أشعة الشبكة العكسية $\mathbf{b}_l$ حيث $l = 1,2,3$ [11] و

$$\mathbf{a}_j \cdot \mathbf{b}_l = 2\pi\,\delta_{jl}، \tag{5.1}$$

إذا كانت الدالة $\phi(\mathbf{r})$ تمثل حالة ذاتية لمؤثر الإزاحة $\hat{T}_j$، فإنها تحقق العلاقة [10]:

$$\hat{T}_j\,\phi(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}+\mathbf{a}_j) = C_j\,\phi(\mathbf{r}) = e^{\mathrm{i}2\pi\theta_j}\,\phi(\mathbf{r}), \tag{6.1}$$

يمكن للثابت C_j أن يكون مجرد معامل طور بالصيغة $e^{\mathrm{i}2\pi\theta_j}$، لأن تطبيق مؤثر الإزاحة لا يغير من شرط التنظيم. علاوة على ذلك، يكفي الأخذ في الإعتبار القيم θ_j ضمن المجال $[0,1[$ أو $[-1/2,1/2[$ نظراً لدورية معامل الطور، وهو ما يُعرّف منطقة بريلوين الأولى[2] [12,10]. بناءً على ذلك، تُعرَّف الدالة الموجة التالية:

$$u(\mathbf{r}) = e^{-\mathbf{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\,\phi(\mathbf{r}), \quad \mathbf{k} = \sum_{l=1}^{3}\theta_l\mathbf{b}_l. \tag{7.1}$$

[1] مؤثرات الإزاحة الشبكية $\hat{T}_j$: هي مؤثرات تصف انتقال الإلكترونات بين المواقع الذرية في الشبكة البلورية

[2] منطقة بريلوين الأولى (First Brillouin Zone): هي الخلية الأولية في الفضاء العكسي (فضاء الأشعة الموجية) وتحتوي جميع قيم $\mathbf{k}$ في الشبكة الدورية

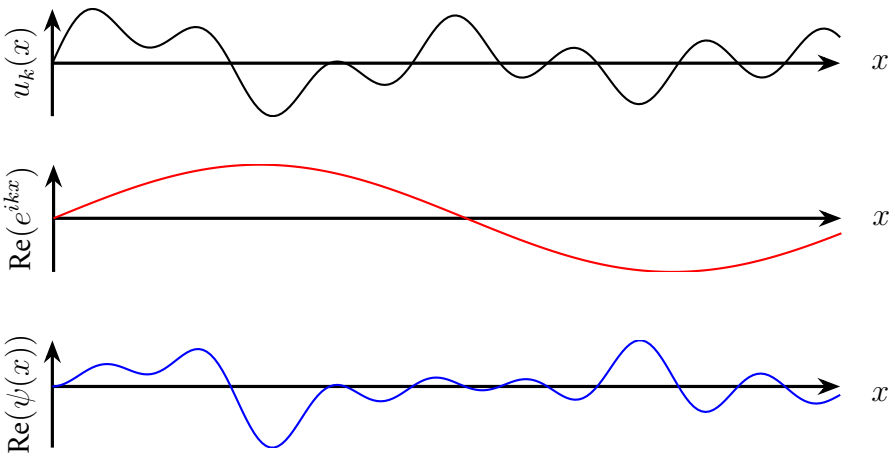
يُلاحَظ تأثير مؤثر الإزاحة $\hat{T}_j$ عليها كما يلي [10]

$$\begin{aligned}\hat{T}_j\, u(\mathbf{r}) &= u(\mathbf{r}+\mathbf{a}_j) = e^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{a}_j)}\,\phi(\mathbf{r}+\mathbf{a}_j)\\ &= e^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\, e^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_j}\, e^{\mathrm{i}2\pi\theta_j}\,\phi(\mathbf{r})\\ &= e^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\,\phi(\mathbf{r})\\ &= u(\mathbf{r}),\end{aligned} \tag{8.1}$$

حيث تم استخدام العلاقة (5.1). يُلاحظ أن الدالة $u(\mathbf{r})$ دورية بالنسبة للشبكة البلورية؛ أي أنها تكرر قيمتها في كل خلية أولية مُمتدة بواسطة أشعة الشبكة $\mathbf{a}_j$. علاوةً على ذلك، فهي لا تعتمد على الدفع الخطي للشبكة $\mathbf{k}$. في المقابل، فإن الدوال $\phi(\mathbf{r})$ المُعرَّفة في العلاقة (6.1) تعتمد على $\mathbf{k}$، حيث تُكتب بالصيغة:

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\, u(\mathbf{r})، \quad u(\mathbf{r}+\mathbf{a}_j) = u(\mathbf{r}). \tag{9.1}$$

تُعرف هذه الدوال بـ موجات بلوخ، والتي تتكون من موجات مستوية من الشكل $e^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$، مُعدلة بدالة دورية بالنسبة للشبكة البلورية $u(\mathbf{r})$ [11].



شكل 1.1: رسم توضيحي لدالة بلوخ

$\phi_{\mathbf{k}}(x) = e^{\mathrm{i}\mathbf{k}x}u_{\mathbf{k}}(x)$.

لقد تم حتى الآن حساب الدوال الذاتية المشتركة لمؤثرات الإزاحة $\hat{T}_j$، ولكن الهدف هو الحصول على مجموعة من الدوال الذاتية المشتركة $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ لكل من $\hat{T}_j$ والهاملتوني $\hat{H}$. لذلك، تُعوض الدالة $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ في معادلة شرودنغر المستقلة عن الزمن، فينتج:

$$E\,\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \hat{H}\,\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2} + V(\mathbf{r})\right]\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \tag{10.1}$$

وباستخدام العلاقة (9.1) والمؤثر $\hat{\mathbf{p}} = -\mathrm{i}\nabla$، نحصل على:

$$E\,u(\mathbf{r}) = \left[\frac{(\hat{\mathbf{p}}+\mathbf{k})^2}{2} + V(\mathbf{r})\right] u(\mathbf{r}) = \hat{H}_{\mathbf{k}}\,u(\mathbf{r}).$$

يُطلق على الهاملتوني المعتمد على الشعاع $\mathbf{k}$ اسم هاملتوني بلوخ [12,10] . عند حل معادلة شرودنغر هذه لقيمة محددة من $\mathbf{k}$، يتم الحصول على قيم ذاتية للطاقة $E_{n\mathbf{k}}$ ودوال ذاتية $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$، حيث $n = 0, 1, 2, 3, \ldots$. لذلك، يُعاد كتابة المعادلة بالشكل:

$$E_{n\mathbf{k}}\,u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \left[\frac{(\hat{\mathbf{p}}+\mathbf{k})^2}{2} + V(\mathbf{r})\right] u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \hat{H}_{\mathbf{k}}\,u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \tag{11.1}$$

وبذلك تم إثبات نظرية بلوخ. يتمتع حل معادلة شرودنغر (10.1) ببنية موجات بلوخ:

$$\phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\,u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \qquad u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{a}_j) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \tag{12.1}$$

عند تمثيل $E_{n\mathbf{k}}$ مقابل الشعاع $\mathbf{k}$ على طول اتجاهات مُختارة في منطقة بريلوين الأولى، نحصل على بنية الحزم [13,10]، حيث يُعرِّف المؤشر n الحزم المختلفة.

وعليه يمكن تعريف نظرية بلوخ على أنها نظرية كمية في البلورات الدورية تسمح بكتابة الدالة الموجية للإلكترونات كجداء لموجة مستوية ودالة دورية لها نفس دورية الشبكة البلورية مما يسمح بتفسير سلوك اللإكترونات وإنتقالها داخل المواد الصلبة .

3.1 الربط الحكم

إنطلاقًا من وصف مستمر، يتم الحصول على هاميلتوني شبكي باستخدام تقريب الربط المحكم (Tight-Binding) كما يلي:

$$\phi_{R\alpha}(\mathbf{r}) = \varphi_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \boldsymbol{\tau}_\alpha), \qquad \alpha = 1, 2, \ldots, M \tag{13.1}$$

هنا، يمثّل الشعاع $\mathbf{R} = \mathbf{R}_{n_1 n_2 n_3} = \sum_j n_j \mathbf{a}_j$ شعاعاً شبكيًا يشير إلى إحدى الخلايا الأولية في البلورة، حيث إن $\mathbf{a}_j$ هي أشعة الشبكة الأولية وn_j أعداد صحيحة. يرمز α إلى المدارات M من الدوال ϕ_α الموجودة داخل كل خلية أولية، بينما تحدد الأشعة $\boldsymbol{\tau}_\alpha$ مواضع هذه المدارات داخل الخلية الواحدة ويُعد نموذج الربط المحكم أحد الأساليب التقريبية الأساسية لدراسة البنية الإلكترونية في البلورات [10,4]. بإفتراض أن :

$$\langle \phi_{\mathbf{R}\alpha} | \phi_{\mathbf{R}'\beta} \rangle = \delta_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}\,\delta_{\alpha\beta} \tag{14.1}$$

أي يجب أن تكون المدارات متعامدة طبيعياً سواء داخل خلية الوحدة أو عبر خلايا الوحدة. ينتج من التعريف (13.1) مباشرة أن:

$$\phi_{\mathbf{R}\alpha}(\mathbf{r}-\mathbf{R}') = \phi_{\mathbf{R}+\mathbf{R}',\alpha}(\mathbf{r}) \tag{15.1}$$

وبشكل خاص، تحقق الدوال الموضعية الشرط الدوري الشبكي التالي: $\phi_{\mathbf{R}\alpha}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = \phi_{0\alpha}(\mathbf{r})$ وكذلك يمكن كتابة العلاقة المكافئة $\phi_{0\alpha}(\mathbf{r}-\mathbf{R}) = \phi_{\mathbf{R}\alpha}(\mathbf{r})$.
يمكن كتابة مؤثر الهاملتوني $\hat{H}$ على الشكل:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{R},\alpha} |\phi_{\mathbf{R}\alpha}\rangle\langle\phi_{\mathbf{R}\alpha}|\, \hat{H} \sum_{\mathbf{R}',\beta} |\phi_{\mathbf{R}'\beta}\rangle\langle\phi_{\mathbf{R}'\beta}|. \tag{16.1}$$

وهي الصياغة النموذجية لنموذج الربط المحكم في فضاء المواضع [4]، حيث تمثل الدوال $\phi_{\mathbf{R}\alpha}$ مدارات موضعية متمركزة في الخلية الواقعة عند المتجه الشبكي $\mathbf{R}$، بينما يشير الرمزان α وβ إلى المدارات المختلفة داخل الخلية الأولية. و بسبب التناظر الإنسحابي المتقطع لمؤثر الهاملتوني $\hat{H}$، فإن عنصر المصفوفة $\langle\phi_{\mathbf{R}\alpha}|\hat{H}|\phi_{\mathbf{R}'\beta}\rangle$ لا يمكن أن يعتمد إلا على المسافة النسبية بين الخليتين، أي على الشعاع $\Delta\mathbf{R} = \mathbf{R}' - \mathbf{R}$ وبالتالي يمكن كتابة عنصر المصفوفة على الشكل:

$$\langle\phi_{\mathbf{R}\alpha}|\hat{H}|\phi_{\mathbf{R}'\beta}\rangle = \langle\phi_{\mathbf{R}\alpha}|\hat{H}|\phi_{\Delta\mathbf{R}+\mathbf{R},\beta}\rangle = \langle\phi_{0\alpha}|\hat{H}|\phi_{\Delta\mathbf{R}\beta}\rangle = H_{\alpha\beta}(\Delta\mathbf{R}),$$

أي أن عنصر الهاملتوني بين المدار α في الخلية $\mathbf{R}$ والمدار β في الخلية $\mathbf{R}'$ يعتمد فقط على شعاع الإزاحة النسبية $\Delta\mathbf{R}$، ويُرمز له بـ $H_{\alpha\beta}(\Delta\mathbf{R})$. كما أن الشعاع $\Delta\mathbf{R}$ هو بدوره شعاع شبكي بالنسبة إلى الخلية المرجعية $\mathbf{R} = 0$، وعند أخذ المرافق المركب تُستنتج العلاقة التالية:

$$\begin{aligned} H^*_{\alpha\beta}(\Delta\mathbf{R}) = \langle\phi_{\mathbf{R}'\beta}|\hat{H}|\phi_{\mathbf{R}\alpha}\rangle &= \langle\phi_{\Delta\mathbf{R}+\mathbf{R},\beta}|\hat{H}|\phi_{\mathbf{R}\alpha}\rangle \\ = \langle\phi_{\Delta\mathbf{R}\beta}|\hat{H}|\phi_{0\alpha}\rangle &= \langle\phi_{0\beta}|\hat{H}|\phi_{-\Delta\mathbf{R}\alpha}\rangle \\ = H_{\beta\alpha}(-\Delta\mathbf{R}). & \end{aligned} \tag{17.1}$$

يُمكن الآن كتابة الهاملتوني على الشكل:

$$\hat{H} = \sum_{\Delta\mathbf{R}} \sum_{\alpha\beta} H_{\alpha\beta}(\Delta\mathbf{R}) \sum_{\mathbf{R}} |\phi_{\mathbf{R}\alpha}\rangle\langle\phi_{\Delta\mathbf{R}+\mathbf{R},\beta}| \tag{18.1}$$

أي، يُعبّر عن الهاملتوني على شكل مجموع على الإنتقالات (hoppings) من الخلية $\mathbf{R}+\Delta\mathbf{R}$ والمدار β إلى الخلية $\mathbf{R}$ والمدار α، حيث يُوزّن كل إنتقال بعنصر المصفوفة $H_{\alpha\beta}(\Delta\mathbf{R})$.
وبعد ذلك، يُفترض شكل شبيه بدوال بلوخ (Bloch-like ansatz):

$$|\phi_{\mathbf{k}\alpha}\rangle = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}+\tau_\alpha)} |\phi_{\mathbf{R}\alpha}\rangle \tag{19.1}$$

يمكن كتابة الدالة الموضعية المرتبطة بالمدار α في الخلية $\mathbf{R}$ على شكل تكامل على منطقة بريلوين الأولى:

$$|\phi_{\mathbf{R}\alpha}\rangle = \frac{V_{\text{cell}}}{(2\pi)^3}\int_{\text{BZ}} \mathrm{d}^3\mathbf{k}\, e^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}+\tau_\alpha)}|\phi_{\mathbf{k}\alpha}\rangle, \tag{20.1}$$

حيث:

- V_{cell} حجم الخلية الأولية،
- التكامل على كامل منطقة بريلوين الأولى (BZ) ،
- $|\phi_{\mathbf{k}\alpha}\rangle$ هي دالة بلوخ المرتبطة بالمدار α،
- $\mathbf{R}+\tau_\alpha$ هو موقع المدار داخل الشبكة.

من الممكن إستخدام صياغة أبسط وأكثر انتشاراً لبناء حالات بلوخ، حيث تُكتب الحالات على الشكل $|\phi_{k\alpha}\rangle = \sum_R e^{ik\cdot R}|\phi_{\mathbf{R}\alpha}\rangle$ إلا أن هذه الصياغة لا تتضمن بشكل تلقائي تأثير التيارات داخل الخلية التي يمكن أن تسهم في عملية توليد التوافقيات الضوئية لاحقا. تجدر الإشارة إلى أن هذا البناء يُمثل ما يُعرف بـ الإصطلاح الأول (Convention I) في المرجع [14] (الجزء 2.2.3).
بتطبيق علاقة التعامد ($\sum_{\mathbf{R}} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}} = \frac{(2\pi)^3}{V_{\text{cell}}}\delta^{(3)}(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$)يتم الحصول على :

$$\langle\phi_{\mathbf{k}\alpha} \mid \phi_{\mathbf{k}'\beta}\rangle = \frac{(2\pi)^3}{V_{\text{cell}}}\,\delta^{(3)}(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\,\delta_{\alpha\beta}، \tag{21.1}$$

مما يُعطي :

$$\begin{aligned}\langle\phi_{\mathbf{k}\alpha}|\hat{H}|\phi_{\mathbf{k}'\beta}\rangle &= \sum_{\mathbf{R}'} e^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}'+\tau_\alpha)}\langle\phi_{\mathbf{R}'\alpha}|\sum_{\Delta\mathbf{R}}\sum_{\alpha'\beta'} H_{\alpha'\beta'}(\Delta\mathbf{R})\sum_{\mathbf{R}}|\phi_{\mathbf{R}\alpha'}\rangle\langle\phi_{\Delta\mathbf{R}+\mathbf{R},\beta'}|\sum_{\mathbf{R}''} e^{\mathrm{i}\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{R}''+\tau_\beta)}|\phi_{\mathbf{R}''\beta}\rangle \\ &= \sum_{\mathbf{R}}\sum_{\Delta\mathbf{R}} e^{-\mathrm{i}(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}}\, e^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\tau_\alpha}\, H_{\alpha\beta}(\Delta\mathbf{R})\, e^{\mathrm{i}\mathbf{k}'\cdot\Delta\mathbf{R}}\, e^{\mathrm{i}\mathbf{k}'\cdot\tau_\beta} \\ &= \frac{(2\pi)^3}{V_{\text{cell}}}\,\delta^{(3)}(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\sum_{\Delta\mathbf{R}} H_{\alpha\beta}(\Delta\mathbf{R})\, e^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot(\Delta\mathbf{R}+\tau_\beta-\tau_\alpha)}،\end{aligned} \tag{22.1}$$

وبالتالي فإن الهاملتوني في فضاء $\mathbf{k}$ (والمدارات) يُكتب:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{V_{\text{cell}}}{(2\pi)^3}\int_{\text{BZ}} \mathrm{d}^3\mathbf{k} \sum_{\alpha} |\phi_{\mathbf{k}\alpha}\rangle\langle\phi_{\mathbf{k}\alpha}|\hat{H}|V_{\text{cell}}\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{\text{BZ}} \mathrm{d}^3\mathbf{k}' \sum_{\beta} |\phi_{\mathbf{k}'\beta}\rangle\langle\phi_{\mathbf{k}'\beta}| \\ &= \frac{V_{\text{cell}}}{(2\pi)^3}\int_{\text{BZ}} \mathrm{d}^3\mathbf{k} \sum_{\alpha\beta}\sum_{\Delta\mathbf{R}} H_{\alpha\beta}(\Delta\mathbf{R}) e^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot(\Delta\mathbf{R}+\tau_\beta-\tau_\alpha)} |\phi_{\mathbf{k}\alpha}\rangle\langle\phi_{\mathbf{k}\beta}| \quad , \\ &= \frac{V_{\text{cell}}}{(2\pi)^3}\int_{\text{BZ}} \mathrm{d}^3\mathbf{k} \sum_{\alpha\beta} H_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) |\phi_{\mathbf{k}\alpha}\rangle\langle\phi_{\mathbf{k}\beta}|،\end{aligned} \tag{23.1}$$

حيث

$$H_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \sum_{\Delta\mathbf{R}} H_{\alpha\beta}(\Delta\mathbf{R})\, e^{i\mathbf{k}\cdot(\Delta\mathbf{R}+\boldsymbol{\tau}_\beta-\boldsymbol{\tau}_\alpha)} \tag{24.1}$$

وهو هاملتوني بلوخ في نموذج الربط المحكم [4].

يُلاحظ من المعادلة (22.1) أن الهاملتوني قطري في فضاء الأشعة الموجية (الدفع الخطي) $\mathbf{k}$ وهو الدافع الرئيسي للعمل مع الشعاع الموجي الشبكي $\mathbf{k}$ بدلا من فضاء المواضع. يؤثر هاملتوني بلوخ $H_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ عند قيمة معينة لـ $\mathbf{k}$ في فضاء هيلبرت بعده $M \times M$ وهو صغير جداً مقارنة بالهاملتوني الأصلي $\hat{H}$، خاصة إذ كان عدد المدارات لكل خلية أولية M يُمكن أن يضلّ صغيراً. تُعطي القيم الذاتية $E_{n\mathbf{k}}$ لـ $H_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ لكل $\mathbf{k}$ داخل منطقة بريلوين الأولى بنية الحزم، التي تتكون، بشكل عام، من $n = 1, 2, \ldots, M$ من الحزم.

يُمكن كتابة الحالات الذاتية كنشر [10,4] كما يلي:

$$|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle = \sum_{\alpha} C_{\alpha}^{n\mathbf{k}} |\phi_{\mathbf{k}\alpha}\rangle \tag{25.1}$$

حيث n هو دليل الحزمة. يُطبق شرط التنظيم $\sum_\alpha C_\alpha^{n\mathbf{k}} = 1$ لضمان تحقق:

$$\langle\psi_{n\mathbf{k}'}|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle = \frac{(2\pi)^3}{V_{\text{cell}}}\delta^{(3)}(\mathbf{k}-\mathbf{k}'). \tag{26.1}$$

عند تعويض هذا في معادلة شرودنغر

$$E_{n\mathbf{k}}\,|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle = \hat{H}\,|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle \tag{27.1}$$

مع الهاملتوني المعطى في المعادلة (23.1) وبالإعتماد على المعادلة (21.1) يظهر أن:

$$\begin{aligned}E_{n\mathbf{k}}\sum_{\gamma} C_{\gamma}^{n\mathbf{k}}\,|\phi_{\mathbf{k}\gamma}\rangle &= \frac{V_{\text{cell}}}{(2\pi)^3}\int_{\text{BZ}} \mathrm{d}^3\mathbf{k}' \sum_{\alpha'\beta'} H_{\alpha'\beta'}(\mathbf{k}')\,|\phi_{\mathbf{k}'\alpha'}\rangle\,\langle\phi_{\mathbf{k}'\beta'}|\sum_{\gamma} C_{\gamma}^{n\mathbf{k}}\,|\phi_{\mathbf{k}\gamma}\rangle \\ &= \sum_{\alpha'\gamma} H_{\alpha'\gamma}(\mathbf{k})\,|\phi_{\mathbf{k}\alpha'}\rangle\,C_{\gamma}^{n\mathbf{k}}\end{aligned} \tag{28.1}$$

بالضرب في $\langle\phi_{\mathbf{k}\alpha}|$ يساراً نجد :

$$E_{n\mathbf{k}}\, C_{\alpha}^{n\mathbf{k}} = \sum_{\gamma} H_{\alpha\gamma}(\mathbf{k})\, C_{\gamma}^{n\mathbf{k}} \tag{29.1}$$

وهو ما يمكن الترميز له مصفوفيا على النحو التالي:

$$E_{n\mathbf{k}}\, \mathbf{C}_{n\mathbf{k}} = H(\mathbf{k})\, \mathbf{C}_{n\mathbf{k}} \tag{30.1}$$

بالمقارنة مع المعادلتين (10.1) و(11.1)، يُمكن اعتبار الحالة الذاتية $|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle$ في نموذج الربط المحكم مكافئة لموجة بلوخ $\phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ في الحالة المستمرة، بينما تمثل $\mathbf{C}^{n\mathbf{k}}$ الجزء الدوري $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ في فضاء الموضع. هذا البناء يتوافق مع ما يُعرف بالاصطلاح الأول (Convention I) كما ورد في المرجع [14] الجزء 2.2.3 .

بإختصار, يُعد نموذج الربط المحكم (Tight-Binding Model) تقريبًا نظريًا في فيزياء الحالة الصلبة يُستخدم لوصف البنية الإلكترونية في البلورات، انطلاقًا من فرضية أن الإلكترونات تكون متموضعة أساسًا حول المواقع الذرية، وأن تداخل الدوال الموجية بين المواقع المتجاورة ضعيف نسبيًا. تُبنى في هذا الإطار الحالة الإلكترونية كتركيب خطي لمدارات ذرية متموضعة، حيث تُمثل العناصر القطرية لمؤثر الهاميلتوني طاقات المواقع (site energies)، بينما تُمثل العناصر غير القطرية معاملات الانتقال أو القفز (hopping integrals) بين المواقع المختلفة, وبإستغلال التناظر الإنسحابي في الشبكة البلورية، تُصاغ المسألة في فضاء الشعاع الموجي $\mathbf{k}$، فتتحول إلى مسألة قيم ذاتية مصفوفية من الشكل $H(\mathbf{k})C_{n\mathbf{k}} = E_{n\mathbf{k}}C_{n\mathbf{k}}$، مما يسمح بإستخراج نطاقات الطاقة الإلكترونية $E_{n\mathbf{k}}$. يُعد هذا النموذج مناسبًا خصوصًا للأنظمة التي تكون فيها الإلكترونات مرتبطة نسبيًا بين المواقع الذرية، ويُستعمل على نطاق واسع في توصيف أشباه الموصلات والمواد ذات الخصائص الطوبولوجية.

4.1 إتصال وطور وإنحناء بيري

إن الأساس المنهجي لاستنباط كميات بيري يقتضي البدء من معادلة شرودنغر المتعلقة بالزمن كمعادلة حركة للنظام الكمومي. يرتبط النظام بمؤثر خارجي وفق مبدأ الارتباط الأدنى $\hat{\mathbf{p}} \longrightarrow \hat{\mathbf{p}} + \mathbf{A}(t)$, حيث يُمثل $\mathbf{A}(t)$ الكمون الشعاعي في تقريب ثنائي الأقطاب الكهربائي,

وعندئذٍ تأخُذُ معادلة شرودنغر المتعلقة بالزمن الشكل:

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\,\psi(\mathbf{r},t)=\left\{\frac{\left(\hat{\mathbf{p}}+\mathbf{A}(t)\right)^{2}}{2}+V(\mathbf{r})\right\}\psi(\mathbf{r},t),\qquad V(\mathbf{r}+\mathbf{a}_j)=V(\mathbf{r}). \tag{31.1}$$

يُؤدي نشر الدالة الموجية $\psi(\mathbf{r},t)=\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r},t)=\sum_n \alpha_{n\mathbf{k}}(t)\,\phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ إلى الحصول على مجموعة من المعادلات التفاضلية العادية المرتبطة لمعاملات النشر $\alpha_{n\mathbf{k}}(t)$، ويقتصر الإرتباط في هذه المعادلات على دليل الحزمة n فقط.

يبقى شعاع الموجة الشبكي $\mathbf{k}$ عددًا كميًا جيدًا، لأن هاملتوني النظام (31.1) يظل ثابتًا تحت تأثير إنتقالات الشبكة $\mathbf{a}_j$.

غير أنه عندما يكون المؤثر الخارجي ـ المُمثَّل بالكمون الشعاعي $\mathbf{A}(t)$ ـ متغيرًا ببطء زمنيًا، فإن النشر المباشر على أساس دوال بلوخ $\phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ لا يكون مفيداً جداً ، سواء من الناحية المفاهيمية أو من حيث الكفاءة العددية. لذلك يُفضَّل الإنطلاق من التقريب الأدياباتيكي [3] [10] ، أي من حلول معادلة شرودنغر شبه-الساكنة.

$$E_{n\mathbf{k}_0}(t)\,\bar{\psi}_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r},t)=\left\{\frac{\left(\hat{\mathbf{p}}+\mathbf{A}(t)\right)^{2}}{2}+V(\mathbf{r})\right\}\bar{\psi}_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r},t), \tag{32.1}$$

حيث يرمز n و $\mathbf{k}_0$ ،على التوالي، إلى دليل الحزمة الإبتدائي في غياب الحقل، وإلى شعاع الموجة الشبكي الإبتدائي، وبإفتراض حل شبيه بدوال بلوخ:

$$\bar{\psi}_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r},t)=e^{i\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r}}\,u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r},t). \tag{33.1}$$

يتم الحصول على:

$$E_{n\mathbf{k}_0}(t)\,u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r},t)=\left\{\frac{\left(\hat{\mathbf{p}}+\mathbf{k}_0+\mathbf{A}(t)\right)^{2}}{2}+V(\mathbf{r})\right\}u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r},t). \tag{34.1}$$

مقارنةً بالمعادلة (11.1) يتضح أنه يمكن كتابة هذه المعادلة على الشكل:

$$E_{n\mathbf{k(t)}}\,u_{n\mathbf{k(t)}}(\mathbf{r})=\left\{\frac{\left[\hat{\mathbf{p}}+\mathbf{k}(t)\right]^{2}}{2}+V(\mathbf{r})\right\}u_{n\mathbf{k(t)}}(\mathbf{r}), \tag{35.1}$$

يُؤدي الإقتران بمؤثر خارجي عبر الكمون الشعاعي $\mathbf{A}(t)$ إلى إزاحة شعاع الموجة الشبكي

[3] التقريب الأدياباتيكي هو الحالة التي يتغير فيها المؤثر الخارجي ببطء شديد في الزمن، فيظل النظام قريبًا من حالته الذاتية اللحظية دون حدوث أي إنتقال بين المستويات

(الدفع الخطي للشبكة) وفق العلاقة $\mathbf{k}(t) = \mathbf{k}_0 + \mathbf{A}(t)$، وهي ما يُعرف بنظرية التسارع[4]. في هذا الإطار، يمكن كتابة حل معادلة شرودنغر شبه الساكنة (32.1) كما يلي:

$$\bar{\psi}_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r},t) = e^{\mathrm{i}\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r}}\, u_{n\mathbf{k}(t)}(\mathbf{r}) = e^{-\mathrm{i}\mathbf{A}(t)\cdot\mathbf{r}}\, \phi_{n\mathbf{k}(t)}(\mathbf{r}), \qquad \mathbf{k}(t) = \mathbf{k}_0 + \mathbf{A}(t). \tag{36.1}$$

بنشر حل المعادلة (31.1) على هذه الحلول شبه الثابتة عند قيمة معينة لـ $\mathbf{k}_0$ [14] يتم الحصول على:

$$\psi(\mathbf{r},t) = \sum_n \alpha_{n\mathbf{k}_0}(t)\ \ \bar{\psi}_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r},t) = \sum_n \alpha_{n\mathbf{k}_0}(t)\, e^{i\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r}}\, u_{n\mathbf{k}(t)}(\mathbf{r}). \tag{37.1}$$

يُعطي الطرف الأيسر من المعادلة(31.1):

$$\mathrm{i}e^{\mathrm{i}\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r}} \sum_n \left[\dot{\alpha}_{n\mathbf{k}_0}(t) u_{n\mathbf{k}(t)}(\mathbf{r}) + \alpha_{n\mathbf{k}_0}(t)\dot{u}_{n\mathbf{k}(t)}(\mathbf{r})\right] \tag{38.1}$$

وطرفها الأيمن

$$\begin{aligned}\sum_n \alpha_{n\mathbf{k}_0}(t) \left\{\frac{[\hat{\mathbf{p}} + \mathbf{A}(t)]^2}{2} + V(\mathbf{r})\right\} \bar{\psi}_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r},t) &= \sum_n \alpha_{n\mathbf{k}_0}(t) E_{n\mathbf{k}_0}(t) \bar{\psi}_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r},t) \\ &= e^{i\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r}} \sum_n \alpha_{n\mathbf{k}_0}(t) E_{n\mathbf{k}_0}(t) u_{n\mathbf{k}(t)}(\mathbf{r})\end{aligned} \tag{39.1}$$

لذلك وبضرب الطرفين من اليسار في $u^*_{m\mathbf{k}(t)}(\mathbf{r})$ والمكاملة على خلية أولية ومن خلال شرط التنظيم:

$$\int_{\text{cell}} \mathrm{d}^3 r |u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2 = \int_{\text{cell}} \mathrm{d}^3 r |\phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2 = 1 \tag{40.1}$$

و شرط التعامد $(\int_{\text{cell}} \mathrm{d}^3 r\ u^*_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) u_{m\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = 0, \quad m \neq n)$ نحصل على :

$$\mathrm{i}\dot{\alpha}_{m\mathbf{k}_0}(t) + \mathrm{i}\sum_n \alpha_{n\mathbf{k}_0}(t) \int_{\text{cell}} \mathrm{d}^3 r u^*_{m\mathbf{k}(t)}(\mathbf{r}) \dot{u}_{n\mathbf{k}(t)}(\mathbf{r}) = \alpha_{m\mathbf{k}_0}(t) E_{m\mathbf{k}_0}(t). \tag{41.1}$$

مع

$$\left\langle u_{m\mathbf{k}(t)} \middle| \dot{u}_{n\mathbf{k}(t)} \right\rangle = \int_{\text{cell}} \mathrm{d}^3 r u^*_{m\mathbf{k}(t)} \dot{u}_{n\mathbf{k}(t)} \tag{42.1}$$

نحصل على معادلة الحركة للمعاملات $\alpha_{m\mathbf{k}_0}(t)$:

$$\mathrm{i}\dot{\alpha}_{m\mathbf{k}_0}(t) = E_{m\mathbf{k}_0}(t)\alpha_{m\mathbf{k}_0}(t) - \mathrm{i}\sum_n \left\langle u_{m\mathbf{k}(\mathbf{t})} \middle| \dot{u}_{n\mathbf{k}(\mathbf{t})} \right\rangle \alpha_{n\mathbf{k}_0}(t). \tag{43.1}$$

[4]تنص نظرية التسارع على أن الحقل الكهربائي الخارجي يُحدث تغيُّراً منتظماً في متجه الموجة الشبكي للإلكترون.

يُمكن التخلص من الحد الأول في الجانب الأيمن بإستخدام التعويض :

$$\alpha_{m\mathbf{k}_0}(t) = \beta_{m\mathbf{k}_0}(t)e^{-\mathrm{i}\int^t E_{m\mathbf{k}_0}(t')dt'} \tag{44.1}$$

مما يُؤدي إلى:

$$\mathrm{i}\dot{\beta}_{m\mathbf{k}_0}(t) = -\sum_n \mathrm{i}\left\langle u_{m\mathbf{k}(t)}\middle|\dot{u}_{n\mathbf{k}(t)}\right\rangle \beta_{m\mathbf{k}_0}(t)e^{-\mathrm{i}\int^t\left[E_{n\mathbf{k}_0}(t')-E_{m\mathbf{k}_0}(t')\right]dt'}, \tag{45.1}$$

علاوةً على ذلك، في حال كان الشعاع $\mathbf{k}$ متغيراً مستمراً (كما هو الحال في المواد المجمية)، وكانت الدوال $u_{n\mathbf{k}}$ قابلة للاشتقاق بالنسبة إلى $\mathbf{k}$، يمكن كتابة:

$$\langle u_{m\mathbf{k(t)}}|\dot{u}_{n\mathbf{k(t)}}\rangle = \mathrm{i}\dot{\mathbf{k}}(t)\cdot\langle u_{m\mathbf{k}} \mid \nabla_{\mathbf{k}}u_{n\mathbf{k}}\rangle\Big|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}(t)} \tag{46.1}$$

حيث $\dot{\mathbf{k}}(t) = \dot{\mathbf{A}}(t) = -\mathbf{E}(t)$, مع $\mathbf{E}(t)$ هو الحقل الكهربائي.

$$\langle u_{m\mathbf{k(t)}} \mid \dot{u}_{n\mathbf{k(t)}}\rangle = -\mathrm{i}\mathbf{E}(t)\cdot\langle u_{m\mathbf{k}}|\nabla_{\mathbf{k}}u_{n\mathbf{k}}\rangle\Big|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}(t)} \tag{47.1}$$

وبالتالي

$$\dot{\beta}_{m\mathbf{k}_0}(t) = \sum_n \mathbf{E}(t)\cdot\langle u_{m\mathbf{k}}|\nabla_{\mathbf{k}}u_{n\mathbf{k}}\rangle_{\mathbf{k}=\mathbf{k}(t)}\,\beta_{n\mathbf{k}_0}(t)\,e^{-\mathrm{i}\int^t\left[E_{n\mathbf{k}_0}(t')-E_{m\mathbf{k}_0}(t')\right]dt'} \tag{48.1}$$

إلى جانب المؤثر الخارجي $\mathbf{E}(t)$، فإن العبارة $\langle u_{mk}|\nabla_k u_{nk}\rangle\Big|_{k=k(t)}$ يُمثل بوضوح الجزء الأساسي الذي يتحكم في حركة الإلكترون داخل الشبكة.

وهو مثال على إتصال بيري (Berry connection)، ويشكل الأساس لجميع التأثيرات الطوبولوجية التي سيتم مناقشتها لاحقاً. يُعرَّف إتصال بيري على النحو العام [16] كالتالي:

$$\mathcal{A}_{mn}(\mathbf{k}) = \langle u_{m\mathbf{k}}|\mathrm{i}\nabla_{\mathbf{k}}u_{n\mathbf{k}}\rangle \tag{49.1}$$

بحيث:

$$\mathrm{i}\dot{\beta}_{m\mathbf{k}_0}(t) = \mathbf{E}(t)\cdot\sum_n \mathcal{A}_{mn}\big(\mathbf{k}(t)\big)\beta_{n\mathbf{k}_0}(t)\exp\left[-i\int_{t_0}^{t}\left(E_{n\mathbf{k}_0}(t') - E_{m\mathbf{k}_0}(t')\right)\mathrm{d}t'\right]. \tag{50.1}$$

لا تمثل العبارة (48.1) أداة فعالة للحساب العددي لاتصال بيري. لأن الدالة $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ تُستخرج عادةً كأشع ذاتية ناتجة عن حل عددي لصيغة منفصلة للمعادلة (11.1). وبما أن الأشعة الذاتية المنظمة لا تُحدَّدُ إلَّا بمعامل طوري، فإن هذا الطور قد يتذبذب عشوائياً

بتغير $\mathbf{k}$ [14]، مما يجعل الإشتقاق بالنسبة لـ $\nabla_{\mathbf{k}}$ غير ممكن. لتجاوز هذه المعضلة، يمكن الاستعانة بما يلي:

$$\begin{aligned} E_{n\mathbf{k}} \langle u_{m\mathbf{k}} | \mathrm{i}\nabla_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}} \rangle &= \big\langle u_{m\mathbf{k}} \big| \mathrm{i}\nabla_{\mathbf{k}} \big(E_{n\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}}\big) \big\rangle - \langle u_{m\mathbf{k}} | \mathrm{i}(\nabla_{\mathbf{k}} E_{n\mathbf{k}}) u_{n\mathbf{k}} \rangle \\ &= \Big\langle u_{m\mathbf{k}} \Big| \mathrm{i}\nabla_{\mathbf{k}} \big(\hat{H}_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}}\big) \Big\rangle - \mathrm{i}\nabla_{\mathbf{k}} E_{n\mathbf{k}}\, \delta_{mn} \\ &= \Big\langle u_{m\mathbf{k}} \Big| \mathrm{i}(\nabla_{\mathbf{k}} \hat{H}_{\mathbf{k}}) u_{n\mathbf{k}} \Big\rangle + \Big\langle \hat{H}_{\mathbf{k}} u_{m\mathbf{k}} \Big| \mathrm{i}\nabla_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}} \Big\rangle - \mathrm{i}\nabla_{\mathbf{k}} E_{n\mathbf{k}}\, \delta_{mn} \\ &= \Big\langle u_{m\mathbf{k}} \Big| \mathrm{i}(\nabla_{\mathbf{k}} \hat{H}_{\mathbf{k}}) u_{n\mathbf{k}} \Big\rangle + E_{m\mathbf{k}} \langle u_{m\mathbf{k}} | \mathrm{i}\nabla_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}} \rangle - \mathrm{i}\nabla_{\mathbf{k}} E_{n\mathbf{k}}\, \delta_{mn}. \end{aligned} \tag{51.1}$$

وبالتالي :

$$\langle u_{m\mathbf{k}} | \mathrm{i}\nabla_{\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle = \frac{\langle u_{m\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} \hat{H}_{\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle}{E_{n\mathbf{k}} - E_{m\mathbf{k}}} \qquad \text{من أجل } n \neq m \tag{52.1}$$

بإفتراض عدم وجود انحلال بحيث $E_{m\mathbf{k}} \neq E_{n\mathbf{k}}$ لكل $n \neq m$:

$$\mathrm{i}\dot{\beta}_{mk_0}(t) = \mathbf{E}(t) \cdot \left[\mathcal{A}_{mm}(\mathbf{k}(t)) \beta_{mk_0}(t) + \sum_{n \neq m} \mathcal{A}_{mn}(\mathbf{k}(t)) \beta_{nk_0}(t) e^{-\mathrm{i}\int^t [E_{nk_0}(t') - E_{mk_0}(t')] dt'} \right] \tag{53.1}$$

مع التعويض:

$$\beta_{m\mathbf{k}_0}(t) = \eta_{m\mathbf{k}_0}(t)\, e^{\mathrm{i}\gamma_{m\mathbf{k}_0}(t)} \tag{54.1}$$

حيث:

$$\gamma_{m\mathbf{k}_0}(t) = -\int_0^t \mathbf{E}(t') \cdot \mathcal{A}_{mm}(\mathbf{k}(t'))\, dt' = \int_0^t \dot{\mathbf{k}}(t') \cdot \mathcal{A}_{mm}(\mathbf{k}(t'))\, dt' = \int_{\mathbf{k}_0}^{\mathbf{k}(t)} d\mathbf{k} \cdot \mathcal{A}_{mm}(\mathbf{k}) \tag{55.1}$$

هو طور بيري (Berry phase)، تُكتب معادلة الحركة للدوال $\eta_{m\mathbf{k}_0}(t)$ كالتالي:

$$\mathrm{i}\dot{\eta}_{m\mathbf{k}_0}(t) = \mathbf{E}(t) \cdot \sum_{n \neq m} \mathcal{A}_{mn}(\mathbf{k}(t))\, \eta_{n\mathbf{k}_0}(t)\, e^{-\mathrm{i}\int_t^t [E_{n\mathbf{k}_0}(t') - E_{m\mathbf{k}_0}(t')] dt'}\, e^{\mathrm{i}[\gamma_{n\mathbf{k}_0}(t) - \gamma_{m\mathbf{k}_0}(t)]} \tag{56.1}$$

يُلاحظ أن طور بيري حقيقي لأن $\langle u_{\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} \rangle$ تخيلي صرف، لذلك يمكن كتابة طور بيري أيضاً على النحو التالي:

$$\gamma_{m\mathbf{k}_0}(t) = -\operatorname{Im} \int_{\mathbf{k}_0}^{\mathbf{k}(t)} \mathrm{d}\mathbf{k} \cdot \langle u_{m\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} u_{m\mathbf{k}} \rangle \tag{57.1}$$

هل يحمل طور بيري $\gamma_{m\mathbf{k}_0}$ دلالة فيزيائية أصيلة، أم أنه مجرد معامل طور يُمكن إزالته بتحويل معياري مناسب؟ تُعرَّف الدوال $u_{n\mathbf{k}}$ بموجب المعادلة (11.1) وتُنظَّم وفق المعادلة

(40.1)، إلَّا أن هاتين المعادلتين لا تحدِّدَان طور هذه الدوال بشكل فريد، إذ يبقى هناك طور كيفي يُمكن أن يعتمد على شعاع الموجة $\mathbf{k}$ (أو على الزمن t، وهو أمر نستبعده هنا). هذه الحرِّية في اختيار الطور تسمح لنا بإجراء تحويلات معيارية[5] [14] من الشكل:

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u'_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{-\mathrm{i}\chi(\mathbf{k})} \tag{58.1}$$

حيث $\chi(\mathbf{k})$ دالة حقيقية قابلة للاشتقاق. يتم حذف دليل الحزمة هنا لأن التحليل يقتصر على حزمة طاقة واحدة، وليس على انتقالات بين حزم مختلفة. عندئذ يُكتب:

$$\mathcal{A}(\mathbf{k}) = \langle u'_{\mathbf{k}} \mid \mathrm{i}\nabla_{\mathbf{k}} \mid u'_{\mathbf{k}} \rangle + \nabla_{\mathbf{k}}\chi(\mathbf{k}) = \mathcal{A}'(\mathbf{k}) + \nabla_{\mathbf{k}}\chi(\mathbf{k}) \tag{59.1}$$

و

$$\gamma_{\mathbf{k}_0}(t) = \gamma'_{\mathbf{k}_0}(t) + \chi(\mathbf{k}(t)) - \chi(\mathbf{k}_0) \tag{60.1}$$

مما يبيّن أن طور بيري ليس كمية ثابتة معيارياً. فلكل زمن t، يُمكن دائماً إيجاد دالة $\chi(\mathbf{k})$ تجعل $\gamma_{m\mathbf{k}_0}$ يساوي صفراً (أو أي قيمة حقيقية أخرى). غير أنه، عند زمن T حيث $k(T) = k_0$، ونظراً لشرط أن تكون الدوال الذاتية أحادية القيمة[6]،
أي $u_{\mathbf{k}(T)}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$ و كذلك $u'_{\mathbf{k}(T)}(\mathbf{r}) = u'_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$ يجب أن تُحقق دالة المعيار: $\chi(\mathbf{k}(T)) - \chi(\mathbf{k}_0) = 2\pi m \quad (m \in \mathbb{Z})$ وعليه، فإن طور بيري:

$$\gamma_{\mathbf{k}_0}(T) := \gamma_{\mathbf{k}_0} = \oint_{\mathbf{k}_0} \mathrm{d}\mathbf{k} \cdot \mathcal{A}(\mathbf{k}) \tag{61.1}$$

حيث يشير $\oint_{\mathbf{k}_0}$ إلى التكامل على طول مسار مغلق يبدأ وينتهي عند $\mathbf{k}_0$، لا يمكن إلغاؤه بتحويل معياري إلا إذا كان مضاعفاً صحيحاً للعدد 2π(وفي هذه الحالة لا يؤثر على الدالة الموجية). من ناحية أخرى، إذا لم يكن طور بيري مضاعفاً صحيحاً ل2π، فإنه يصبح كمية ثابتة معيارياً للمسارات المغلقة في فضاء $\mathbf{k}$، بمعنى أنه لا يتغيَّر إلا بمقدار عدد صحيح من 2π. باستخدام نظرية ستوكس، يمكن أيضاً كتابة:

$$\gamma_{\mathbf{k}_0} = \iint_S \mathrm{d}\mathbf{n} \cdot (\nabla_{\mathbf{k}} \times \mathcal{A}(\mathbf{k})) \tag{62.1}$$

حيث يتم التكامل على السطح S المحددة بالمسار المغلق الذي يبدأ وينتهي عند $\mathbf{k}_0$ و$\mathbf{n}$ هو الشعاع الناظم للسطح. نظراً للسلوك تحت التحويلات المعيارية (58.1) يمكن اعتبار أن

[5] هي تغيير الطور الإختياري للدوال الموجية دون تغيير الخصائص الفيزيائية للنظام
[6] هنا يقصد بها ان تكون دورية في الفضاء $\mathbf{k}$

اتصال بيري ككمون شعاعي في فضاء $\mathbf{k}$, عندئذ يعرّف ما يسمى بإنحناء بيري (Berry curvqture):

$$\mathcal{B}(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} \times \mathcal{A}(\mathbf{k}) \tag{63.1}$$

الذي يشبه الحقل المغناطيسي في فضاء $\mathbf{k}$.كما هو الحال في فضاء الموضع, فإن الكمون الشعاعي ليس ثابتا معياريا ,ولكن تكامله عبر مسار مغلق والحقل المغناطيسي المرتبط به ثابتان.

كيف يمكن حساب انحناء بيري الثابت معيارياً دون الحاجة الى حساب $\langle u_{n\mathbf{k}}|\mathrm{i}\nabla_{\mathbf{k}}u_{n\mathbf{k}}\rangle$ (غير مُعرَّف تعريفاً جيّداً)بشكل صريح؟ لم تقدم المعادلة (51.1) نتيجة للحالة التي تكون فيها $n = m$.عند إعادة الكتابة (باستخدام الجمع, ترميز ليفي ـ سيفيتا ϵ_{ijl} مع حذف جميع وسائط $\mathbf{k}$ والترميزات)

$$\mathcal{B}_i = \epsilon_{ijl}\partial_j\mathcal{A}_l = \epsilon_{ijl}\partial_j\langle u|\mathrm{i}\partial_l u\rangle = \epsilon_{ijl}\left(\langle\partial_j u|\mathrm{i}\partial_l u\rangle + \langle u|\mathrm{i}\partial_j\partial_l u\rangle\right) = \epsilon_{ijl}\langle\partial_j u|\mathrm{i}\partial_l u\rangle \tag{64.1}$$

يُلاحظ أنه يمكن كتابة طور بيري بالصيغة :

$$\gamma_{\mathbf{k}_0} = \iint_S \mathrm{d}\mathbf{n}\cdot[\langle\nabla_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}|\times|\mathrm{i}\nabla_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}\rangle] = -\,\mathrm{Im}\left(\iint_S \mathrm{d}\mathbf{n}\cdot[\langle\nabla_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}|\times|\nabla_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}\rangle]\right) \tag{65.1}$$

بإدخال مؤثر الوحدة وبإجراء حساب مشابه للمعادلة (51.1) يتم الحصول على :

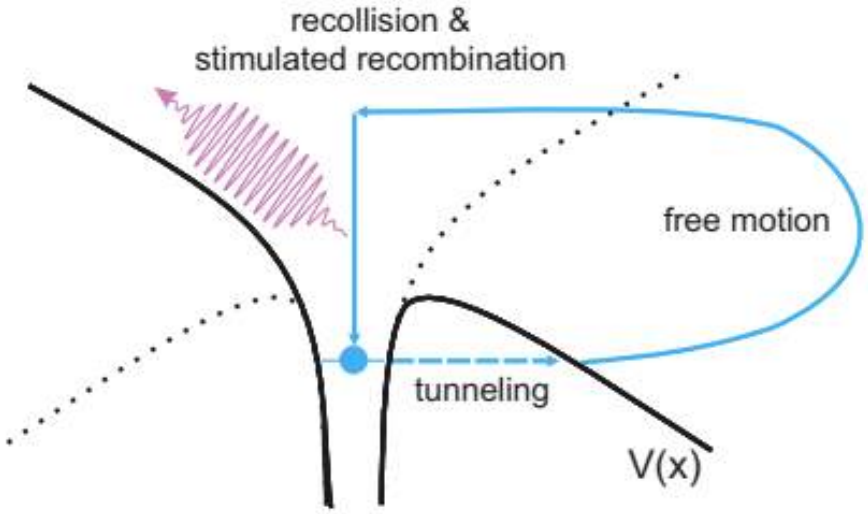
$$\gamma_m(\mathbf{k}_0) = -\iint_S \mathrm{d}\mathbf{n}\cdot\mathrm{Im}\sum_{n\neq m}\frac{\langle u_{m\mathbf{k}}|(\nabla_{\mathbf{k}}\hat{H}_{\mathbf{k}})|u_{n\mathbf{k}}\rangle\times\langle u_{n\mathbf{k}}|(\nabla_{\mathbf{k}}\hat{H}_{\mathbf{k}})|u_{m\mathbf{k}}\rangle}{(E_{n\mathbf{k}}-E_{m\mathbf{k}})^2}. \tag{66.1}$$

5.1 توليد التوافقيات العالية HHG

يُمكن فهم HHG من الذرات في حقول ليزر قوية من خلال ما يسمى بنموذج الخطوات الثلاثة الذي إبتكره العالم بول كوركوم (Paul Corkum) [2]. في المرحلة الأولى، يتأين الإلكترون نفقياً تحت تأثير حقل الليزر، وفي المرحلة الثانية، يتسارع الإلكترون الحر في حقل لليزر. أما في المرحلة الثالثة، فعند إعادة تصادمه مع الأيون، يحدث إعادة إرتباط محفز يعود خلالها الإلكترون إلى حالته الإلكترونية الإبتدائية ويصدر الطاقة التي إكتسبها، أنظر الشكل (2.1). طاقة الفوتون للضوء المنبعث تعطى تقريبا بالطاقة الحركية للإلكترون عند لحظة إعادة التصادم، وذلك في حال إهمال كمون التأين.

إن أحداث إعادة التصادم التي تحدث ضمن نصف دورة واحدة لحقل الليزر تؤدي إلى

إنبعاث نبضات إشعاعية فائقة القصر في نطاق الآتوثانية. إن تكرارها الدوري في كل دورة من الليزر يؤدي إلى تشكل HHG (وبالنسبة لدالة دورية بتردد زاوي ω، فإن تحليل فورييه يبين أن المركبات الطيفية غير المنعدمة لا تظهر إلا عند مضاعفات هذا التردد). الفاصل الطاقي بين التوافقيات يعطى مباشرة بواسطة التردد الزاوي لليزر، أي وفق العلاقة: $\Delta E = \hbar\omega$. ومع ذلك، فإن أنصاف الدورات الموجبة والسالبة للحقل الليزري تنتج نفس نبضات الأوتوثانية، لكن الحقل المنبعث يكون معكوساً (إشارة معاكسة). إن تناظر الإنعكاس هذا في الإستجابة لا يسمح إلا بظهور التوافقيات الفردية فقط في الطيف،ويُلاحظ أن التوافقيات الزوجية تظهر بمجرد كسر هذا التناظر، على سبيل المثال، عند وجود حقل خارجي ساكن إضافي أو عند تطبيق حقل ليزري ثنائي اللون [5,2].



شكل 2.1: مخطط نموذج الخطوات الثلاثة لتوليد التوافقيات العالية [5].

نعتمد في وصف هذه العملية على نموذج كلاسيكي مبسط يعرف هذا النموذج بإسم (simple man's model). لذلك، نعتبر إلكتروناً ذو شحنة q و كتلة m يتحرر من الذرة (يولد) عند نقطة الأصل بواسطة التأين النفقي (tunnel ionization) عند زمن الولادة t_b مع شروط إبتدائية $(x_b = 0 \ ,\dot{x}_b = 0)$. بعد التحرر، يخضع الإلكترون لحركة كلاسيكية تحت تأثير حقل الليزر الخارجي

$$E(t) = E_0 \cos(\omega t) \tag{67.1}$$

وذلك ضمن تقريب ثنائي القطب، مع إهمال كل من الحقل المغناطيسي و كمون الذرة. يمكن إيجاد الحركة الكلاسكية الناتجة عن طريق مكاملة معادلة نيوتن

$$\ddot{x}(t) = \frac{qE_0}{m}\cos(\omega t) \tag{68.1}$$

$$\dot{x}(t) = \frac{qE_0}{m\omega}\left[\sin(\omega t) - \sin(\omega t_b)\right] + \dot{x}_b \tag{69.1}$$

$$x(t) = \frac{qE_0}{m\omega^2}\left[-\cos(\omega t) + \cos(\omega t_b) - \omega\sin(\omega t_b)(t - t_b)\right] + x_b \tag{70.1}$$

مع

$$a_{\text{quiv}} = \frac{qE_0}{m}, \qquad v_{\text{quiv}} = \frac{qE_0}{m\omega}, \qquad x_{\text{quiv}} = \frac{qE_0}{m\omega^2} \tag{71.1}$$

مع الإشارة إلى تسارع الإهتزاز (quiver acceleration) و سرعة الإهتزاز (quiver velocity) وسعة الإهتزاز (quiver amplitude) على أنها مقادير مميزة تصف مقياس الحركة. بالإضافة إلى ذلك، من المهم تعريف مقياس للطاقة من خلال إدخال كمون الإرتجاج ponderomotive potential (U_P) والذي يُعرف على أنه متوسط الطاقة الحركية للإلكترون، محسوبة على دورة زمنية واحدة للحقل، وذلك للحركة الإهتزازية البحتة في غياب الإنجراف وفقا للعلاقة التالية:

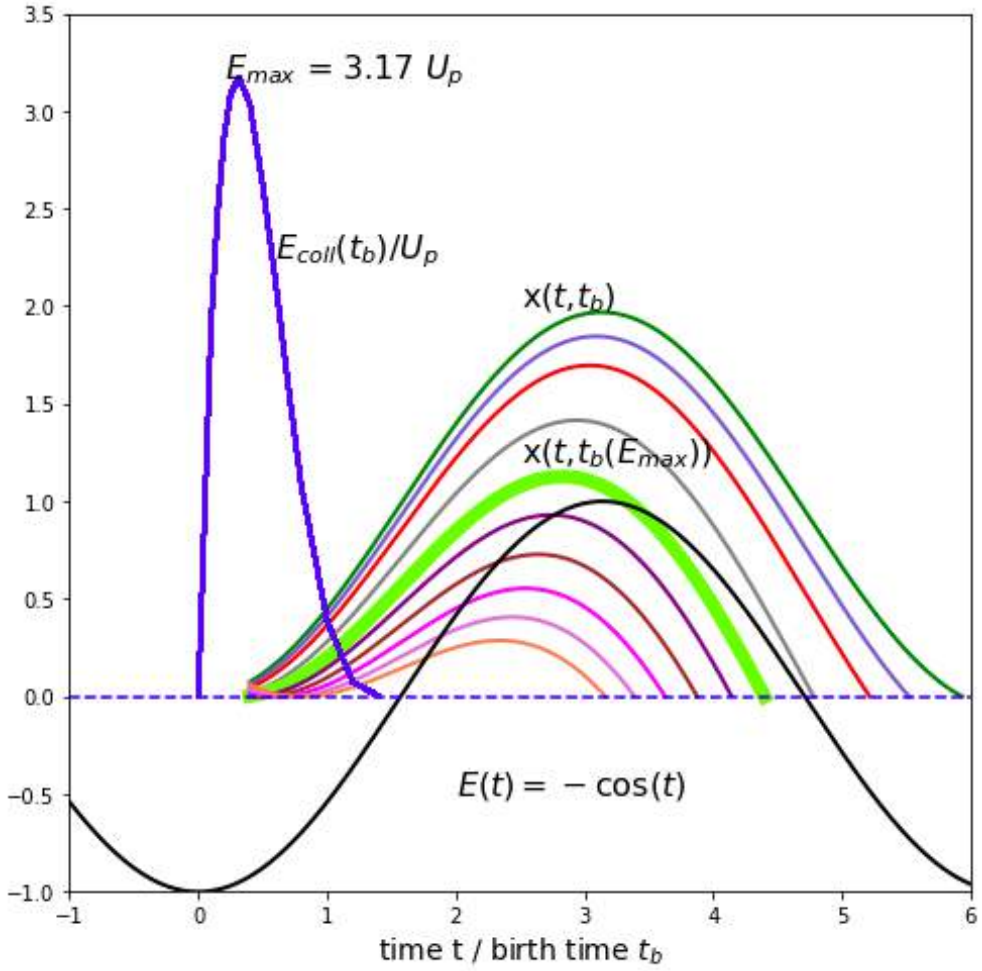
$$U_p = \langle E_{\text{quiv}}\rangle = \frac{m}{2}v_{\text{quiv}}^2\left\langle \sin^2(\omega t)\right\rangle = \frac{1}{4}mv_{\text{quiv}}^2 = \frac{q^2E_0^2}{4m\omega^2} \tag{72.1}$$

ينبغي التنبيه إلى أن المسألة الأصلية تصبح مساوية لمسألة بدون أبعاد إذا إخترنا المتغيرات $a_{\text{quiv}} = v_{\text{quiv}} = x_{\text{quiv}} = 1$ وذلك من خلال إختيار القيم $m = 1$ و $q = -1$ و $E_0 = 1$ و $\omega = 1$. في هذه الحالة تكون $U_p = 1/4$.

لزمن ولادة معين t_b، فإن زمن العودة t_r يعطى بالعلاقة التالية:

$$-\cos(t_r) + \cos(t_b) - \sin(t_b)(t_r - t_b) = 0 = x(t_r), \tag{73.1}$$

مما يؤدي إلى مسألة عددية لإيجاد الجذور بهدف تحديد $t_r(t_b)$ [5].



شكل 3.1: مسارات الإلكترونات وطاقات إعادة التصادم في نموذج الخطوات الثلاثة.

نعرف طاقة العودة عند زمن ولادة معين t_b وفق العلاقة التالية:

$$E_{coll}(t_b) = \frac{v(t_r(t_b))^2}{2}. \tag{74.1}$$

تم عرض طاقات إعادة التصادم (باللون الأزرق) والمسارات التي يتنبأ بها هذا النموح البسيط في الشكل (3.1). تبلغ طاقة إعادة التصادم العظمى $3.17U_p$ وتحدث عند زمن ولادة $t_b = 0.3134$ و زمن إعادة تصادم $t_r = 4.3991$ كما هو موضح بالمسار السميك باللون الأخضر. المسارات التي تولد في زمن أبكر يكون إصطدامها في أزمنة متأخرة (المسارات الطويلة)، في حين أن الولادة في وقت متأخر تؤدي إلى زمن إعادة تصادم أبكر (المسارات القصيرة).

زمن الولادة t_b	زمن إعادة التصادم t_r	طاقة إعادة التصادم E_{coll}/U_p
$[-1,-0.2]$	لا يوجد زمن إعادة التصادم	لا توجد طاقة إعادة التصادم
0	6.283185	0
0.2	4.782174	2.862672
0.4	4.145098	3.039224
0.6	3.627628	2.126792
0.8	3.164845	1.082692
1.0	2.732355	0.389670

جدول 1.1: قيم زمن الولادة t_b وزمن إعادة التصادم t_r وطاقة إعادة التصادم E_{coll}/U_p.

6.1 خلاصة

قدم هذا الفصل البنية النظرية لوصف الإلكترونات في البلورات الدورية، متتبعًا مسارًا تصاعديًا من المبادئ الأساسية إلى المفاهيم المتقدمة. تمت صياغة نظرية بلوخ، حيث أن الدوال الموجية للإلكترونات تأخذ شكل موجات بلوخ $\phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$، و تُشكل دورية الكمون $V(\mathbf{r})$ الشرط الأساسي لهذه البنية. في سياق نموذج الربط المحكم، تم تحويل المسألة من فضاء الموضع إلى فضاء $\mathbf{k}$، مما أفضى إلى هاملتوني بلوخ $H_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ الذي يُمكِّن من إستخراج بنية الحزم $E_{n\mathbf{k}}$ والحالات الذاتية الموافقة.

تتجلّى الأهمية المركزية لهذا الفصل في الإنتقال من الوصف الثابت إلى الوصف الديناميكي عند إعتبار حقول خارجية متعلقة بالزمن. لقد أظهر تحليل معادلة شرودنغر المتعلقة بالزمن، وبإفتراض تغيُّر بطيء للحقل الخارجي (وفق نظرية التسارع $\mathbf{k}(t)=\mathbf{k}_0+\mathbf{A}(t)$)، أن ديناميكا الإلكترونات لا تحكمها طاقات الحزم $E_{n\mathbf{k}}$ فحسب، بل أيضًا كميات هندسية ناشئة عن بنية الدوال الموجية في فضاء الدفع الخطي $\mathbf{k}$. تم اشتقاق اتصال بيري $\mathcal{A}_{mn}(\mathbf{k})$ كعنصر إقتران أساسي يَظهر في معادلات الحركة، كما تم تعريف طور بيري $\gamma_{m\mathbf{k}_0}$ كنتيجة تراكمية لهذا الإتصال على مسار مغلق، وهو كمية قابلة للقياس ترتبط بانحناء بيري $\mathcal{B}(\mathbf{k})$ عبر نظرية ستوكْس.

تُشكل هذه النتائج الإطار النظري الذي سيُعتمد عليه في الفصول التالية لتحليل الظواهر اللاخطية، مثل توليد التوافقيات العالية، حيث يمكن تفسير هذه الظاهرة من خلال ديناميكيات الإلكترونات تحت تأثير الحقول القوية، بما في ذلك عمليات التأين، التسارع، وإعادة الارتباط كما يصفها نموذج الخطوات الثلاثة. وفي هذا السياق، تلعب

الخصائص الهندسية للحزم الإلكترونية، وخاصة إتصال وانحناء بيري، دورًا حاسمًا في تحديد إستجابة المادة وبنية الطيف التوافقي الناتج.

الفصل الثاني:

تطبيق نظرية الحقول القوية على

نماذج طوبولوجية أحادية البعد

الفصل 2
تطبيق نظرية الحقول القوية على نماذج طوبولوجية أحادية البعد

1.2 تمهيد

بعد عرض الإطار النظري العام لوصف الحالات الإلكترونية في الأنظمة الدورية ومناقشة المفاهيم الهندسية المرتبطة بها، ينتقل هذا الفصل إلى دراسة نماذج أحادية البعد التي تشكل أرضية أساسية لفهم الظواهر الطوبولوجية في المواد الصلبة. يُشكِّل تقريب الربط المحكم إطارًا مناسبًا لصياغة هاملتوني فعال يلتقط الخصائص الأساسية للبنية الحزمية، مع الحفاظ على بساطة رياضية تتيح تحليلًا دقيقًا للخواص الطيفية والهندسية.

يركز الفصل على نموذجين مرجعيين في بعد واحد: نموذج Su–Schrieffer–Heeger (SSH) بصفته مثالًا أساسيًا للعازل الطوبولوجي أحادي البعد، ونموذج Rice–Mele الذي يعمّم هذه الصياغة بإدخال لا تناظر في البنية الشبكية والطاقية. يُبرز هذان النموذجان العلاقة بين البنية المجهرية لمعاملات الإنتقال والخواص الطوبولوجية للحزم الإلكترونية.

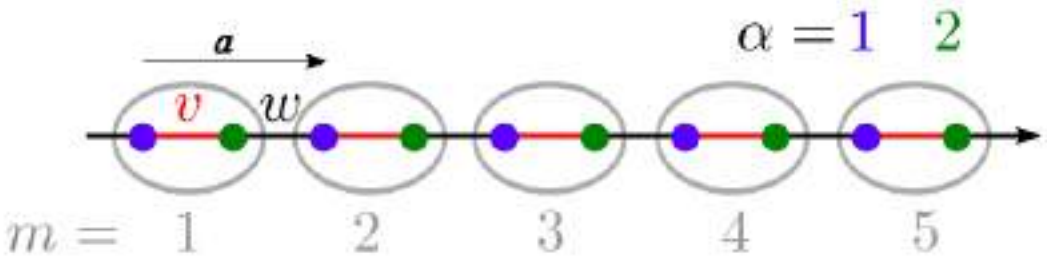
2.2 نموذج-سو-شريفر-هيغر "SSH model"

يُمثّل نموذج SSH حركة الإلكترونات على سلسلة أحادية البعد. إن هاميلتوني الربط المحكم (المعادلة 18.1) لسلسلة SSH يأخذ بعين الاعتبار مدارين فقط في كل خلية وحدة، كما يقتصر على نوعين من عمليات القفز: القفز داخل الخلية ($\Delta \mathbf{R} = 0$) والقفز إلى الجار الأقرب

$(\Delta\mathbf{R} = \mathbf{a}_1)$، بسعتي إنتقال v و w على التوالي ويكتب الهاملتوني على النحو التالي [15]:

$$\hat{H} = \sum_m \left(v\,|m,2\rangle\langle m,1| + w\,|m+1,2\rangle\langle m,2| + h\cdot c\right), \qquad v,w \in \mathbb{C} \tag{1.2}$$

بغرض تبسيط الترميز يُكتب المتجه $|\phi_{\mathbf{R}\alpha}\rangle$ بالشكل $|m,\alpha\rangle$ حيث m هو مؤشر الخلية ويمثل الموضع $\mathbf{R} = m\mathbf{a_1}$, و$\alpha$ هو مؤشر مدار الخلية حيث: $\alpha = 1,2$ [16,15].



شكل 1.2: مخطط يوضح نموذج SSH.

(ا) الدوائر الزرقاء والخضراء تمثل مواقع متميزة داخل النظام، يحتوي كل منها على حالة واحدة ويتم تجميعها ضمن خلية الوحدة. سعات القفز متناوبة: القفز داخل الخلية v (الخطوط الحمراء) يختلف عن القفز بين الخلايا w (الخطوط السوداء).

نظير المعادلة (19.1) هو:

$$|k,\alpha\rangle = \sum_n e^{ina\mathbf{k}}|n,\alpha\rangle, \qquad \alpha = 1,2 \tag{2.2}$$

يُلاحظ أنه تم إفتراض $\tau_\alpha = \mathbf{0}$ في المعادلة (2.2). يمثّل هذا ما يُعرف بافتراض بلوخ المبسّط، حيث يتم إهمال الإزاحة داخل الخلية $\tau_\alpha = \mathbf{0}$. يُستعمل هذا الافتراض أحيانًا في الأدبيات، ويتوافق مع ما يسمى بالاتفاقية الثانية (Convention II) كما ورد في المرجع [14]، القسم 2.2.3.(ولمزيد من التفاصيل حول الاتفاقيتين والفرق بينهما يمكن الرجوع إلى الملحق 1.).

غير أن إهمال $\tau_\alpha = \mathbf{0}$ قد يؤدي إلى تعقيد حساب السرعة أو التيار الصحيحين المسؤولين عن توليد التوافقيات العالية، إذ لن يكون أيٌّ منهما متناسبًا بشكل مباشر مع القيمة المتوقعة للمؤثر $\nabla_{\mathbf{k}}H(\mathbf{k})$.

لذلك، وبدلاً من المعادلة (2.2)، يتم اعتماد افتراض بلوخ الأكثر دقة الذي يأخذ بعين الاعتبار الموضع داخل الخلية، ويتوافق هذا الاختيار مع ما يُعرف بالاتفاقية الأولى (Convention I) في المرجع نفسه، حيث تصبح الحالة:

$$|\mathbf{k},\alpha\rangle = \sum_n e^{\mathrm{i}(n+(\alpha-1)/2)a\mathbf{k}}|n,\alpha\rangle, \qquad \alpha = 1,2 \tag{3.2}$$

(n هنا يجري على الخلايا الأولية للشبكة لا يمثل رتبة النطاق)، وعندئذ تصبح المعادلة (25.1):

$$|\pm,\mathbf{k}\rangle = \sum_{\alpha} C_{\alpha}^{\pm}(\mathbf{k})|k,\alpha\rangle = \sum_{n,\alpha} C_{\alpha}^{\pm}(k)e^{\mathrm{i}(n+(\alpha-1)/2)a\mathbf{k}}|n,\alpha\rangle. \tag{4.2}$$

نفترض أن سلسلة أحادية البعد ذات خلية وحدة تحتوي على موقعين ذريين مع قفزتين مختلفتين، بحيث تكون مواضع الذرات داخل الخلية مثلاً $\tau_1 = 0$ و $\tau_2 = a/2$. في هذا التمثيل تلعب معاملات $C_{\alpha}^{\pm}(k)$ دور دوال بلوخ $\phi_{nk}(r)$، حيث يقابل مؤشر النطاق n القيمتين $\pm$، بينما يقابل الموضع داخل الخلية r المؤشر α، يعطي تطبيق الهاميلتونيان $\hat{H}$:

$$\begin{aligned}
\hat{H}\,|\pm,\mathbf{k}\rangle &= \sum_{n,m,\alpha}\Big[v\,|m,2\rangle\,\langle m,1| + w\,|m+1,1\rangle\,\langle m,2| + h.c.\Big]C_{\alpha}^{\pm}(\mathbf{k})e^{\mathrm{i}\left(n+\frac{\alpha-1}{2}\right)a\mathbf{k}}\,|n,\alpha\rangle \\
&= \sum_{m}\Big[v\,C_1^{\pm}(\mathbf{k})e^{imak}\,|m,2\rangle + w\,C_2^{\pm}(\mathbf{k})e^{\mathrm{i}(m+1/2)a\mathbf{k}}\,|m+1,1\rangle \\
&\quad + v^*\,C_2^{\pm}(\mathbf{k})e^{\mathrm{i}(m+1/2)a\mathbf{k}}\,|m,1\rangle + w^*\,C_1^{\pm}(\mathbf{k})e^{\mathrm{i}(m+1)a\mathbf{k}}\,|m,2\rangle\Big] \\
&= \sum_{m} e^{ima\mathbf{k}}\Big[C_1^{\pm}(\mathbf{k})\left(v + w^*e^{\mathrm{i}ak}\right)|m,2\rangle + C_2^{\pm}(\mathbf{k})\left(v^*e^{\mathrm{i}a\mathbf{k}/2} + we^{-\mathrm{i}a\mathbf{k}/2}\right)|m,1\rangle\Big]
\end{aligned} \tag{5.2}$$

وبالتالي، تصبح معادلة شرودينغر (27.1) متوافقة مع:

$$\begin{aligned}
&E_{\pm}(\mathbf{k})\sum_{n}\Big[C_1^{\pm}(\mathbf{k})e^{ina\mathbf{k}}\,|n,1\rangle + C_2^{\pm}(\mathbf{k})e^{\mathrm{i}(n+1/2)a\mathbf{k}}\,|n,2\rangle\Big] \\
&\quad = \sum_{m} e^{ima\mathbf{k}}\Big[C_1^{\pm}(\mathbf{k})\left(v + w^*e^{\mathrm{i}a\mathbf{k}}\right)|m,2\rangle + C_2^{\pm}(\mathbf{k})\left(v^*e^{\mathrm{i}a\mathbf{k}/2} + we^{-\mathrm{i}a\mathbf{k}/2}\right)|m,1\rangle\Big]
\end{aligned}$$

وبتعويض قيمة $\alpha = 1,2$ نحصل على:

$$\begin{aligned}
&E_{\pm}(\mathbf{k})\sum_{n}\left(C_1^{\pm}(\mathbf{k})e^{ina\mathbf{k}}|n,1\rangle + C_2^{\pm}(\mathbf{k})e^{\mathrm{i}(n+1/2)a\mathbf{k}}|n,2\rangle\right) \\
&\qquad = \sum_{m} e^{ima\mathbf{k}}\Big[C_1^{\pm}(\mathbf{k})\left(v + w^*e^{\mathrm{i}a\mathbf{k}}\right)|m,2\rangle + C_2^{\pm}(\mathbf{k})\left(v^*e^{\mathrm{i}ak\mathbf{k}/2} + we^{-\mathrm{i}a\mathbf{k}}\right)|m,1\rangle\Big].
\end{aligned}$$

و نضرب العبارة بـ $\langle m'|$ و $\langle 1|$ أو $\langle 2|$ من اليسار

$$\begin{aligned}
E_{\pm}(\mathbf{k})\,C_1^{\pm}(\mathbf{k})\,e^{imak} &= e^{ima\mathbf{k}}\,C_2^{\pm}(\mathbf{k})\left(v^*e^{\mathrm{i}a\mathbf{k}/2} + we^{-\mathrm{i}a\mathbf{k}/2}\right), \\
E_{\pm}(\mathbf{k})\,C_2^{\pm}(\mathbf{k})\,e^{\mathrm{i}(m+1/2)a\mathbf{k}} &= e^{ima\mathbf{k}}\,C_1^{\pm}(\mathbf{k})\left(v + w^*e^{\mathrm{i}a\mathbf{k}}\right).
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
E_{\pm}(\mathbf{k})\,C_1^{\pm}(\mathbf{k}) &= C_2^{\pm}(\mathbf{k})\left(v^*e^{\mathrm{i}a\mathbf{k}/2} + we^{-\mathrm{i}a\mathbf{k}/2}\right), \\
E_{\pm}(\mathbf{k})\,C_2^{\pm}(\mathbf{k}) &= C_1^{\pm}(\mathbf{k})\left(ve^{-\mathrm{i}a\mathbf{k}/2} + w^*e^{\mathrm{i}a\mathbf{k}/2}\right).
\end{aligned}$$

$$E_{\pm}(k)\begin{pmatrix} C_1^{\pm}(\mathbf{k}) \\ C_2^{\pm}(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & v^* e^{\mathrm{i}a\mathbf{k}/2} + we^{-\mathrm{i}a\mathbf{k}/2} \\ ve^{-\mathrm{i}a\mathbf{k}/2} + w^* e^{\mathrm{i}a\mathbf{k}/2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1^{\pm}(\mathbf{k}) \\ C_2^{\pm}(\mathbf{k}) \end{pmatrix}.$$

أو بالترميز المصفوفي:

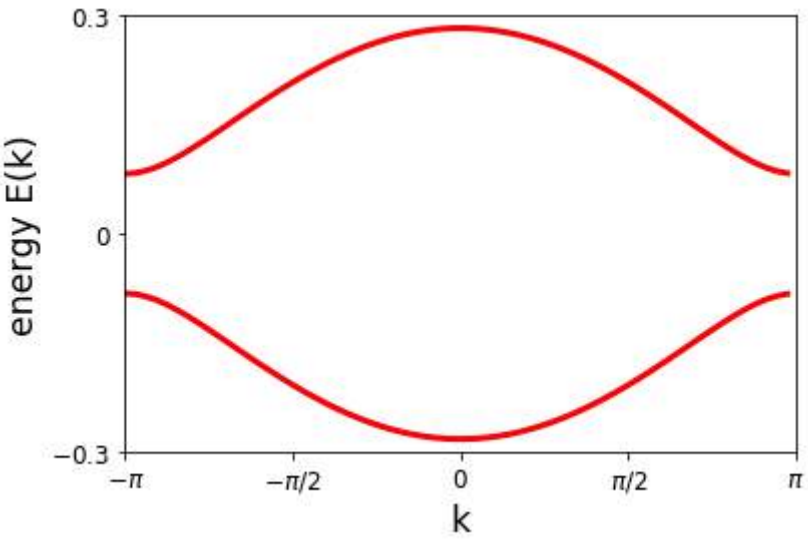
$$E_{\pm}(\mathbf{k})\,\mathbf{C}_{\pm}(\mathbf{k}) = \mathbf{H}(\mathbf{k})\,\mathbf{C}_{\pm}(\mathbf{k}), \tag{6.2}$$

حيث أنّ $\mathbf{C}^{\pm}(\mathbf{k}) = \left(C_1^{\pm}(\mathbf{k}), C_2^{\pm}(\mathbf{k})\right)^{\top}$، ويأخذ هاملتوني بلوخ ذو الربط المحكم الشكل التالي:

$$\mathbf{H}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & s^*(\mathbf{k}) \\ s(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix}, \qquad s(\mathbf{k}) = ve^{-\mathrm{i}a\mathbf{k}/2} + w^* e^{\mathrm{i}a\mathbf{k}/2}.$$

وتكون القيم الذاتية كما يلي:

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm\sqrt{s(\mathbf{k})s^*(\mathbf{k})} \tag{7.2}$$



شكل 2.2: بنية نطاقات الطاقة لنموذج SSH

(ا) عند $a = 1$ و $v = -0.1827$ و $w = -0.1003$.

ويُمَثل النطاقان بـ $n = \pm$ لنموذج SSH، والأشعة الذاتية الممكنة المنظمة تأخذ الشكل:

$$\mathbf{C}_{\pm}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ \dfrac{E_{\pm}(\mathbf{k})}{s^*(\mathbf{k})} \end{pmatrix}. \tag{8.2}$$

حيث نلاحظ أن $\mathbf{C}_{\pm}(\mathbf{k} = -\pi/a) \neq \mathbf{C}_{\pm}(\mathbf{k} = \pi/a)$ [15--17].

يُعطى اتصال بيري للنطاقين $\pm$ بـ:

$$
\begin{aligned}
\mathcal{A}_{\pm\pm}(\mathbf{k}) = \mathbf{C}^{\dagger}_{\pm}(\mathbf{k}) \cdot \mathrm{i}\partial_k \mathbf{C}_{\pm}(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2}\left(1, \frac{E_{\pm}(\mathbf{k})}{s(\mathbf{k})}\right) i\partial_k \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{E_{\pm}(\mathbf{k})}{s^*(\mathbf{k})} \end{pmatrix} \\
&= \frac{\mathrm{i}}{2}\left(1, \frac{E_{\pm}(\mathbf{k})}{s(\mathbf{k})}\right) \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{s^*(\mathbf{k})\partial_k E_{\pm}(\mathbf{k}) - E_{\pm}(\mathbf{k})\partial_k s^*(\mathbf{k})}{(s^*(\mathbf{k}))^2} \end{pmatrix} \\
&= \frac{\mathrm{i}}{2}\left(1, \frac{E_{\pm}(\mathbf{k})}{s(\mathbf{k})}\right) \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{\partial_k s(\mathbf{k})(s^*(\mathbf{k}))^2 - s(\mathbf{k})s^*(\mathbf{k})\partial_k s^*(\mathbf{k})}{2E_{\pm}(s^*(\mathbf{k}))^2} \end{pmatrix} \\
&= \frac{\mathrm{i}}{4} \frac{\partial_k s(\mathbf{k})(s^*(\mathbf{k}))^2 - s(\mathbf{k})s^*(\mathbf{k})\partial_k s^*(\mathbf{k})}{s(\mathbf{k})(s^*(\mathbf{k}))^2} \\
&= \frac{\mathrm{i}}{4}\left(\frac{\partial_k s(\mathbf{k})}{s(\mathbf{k})} - \frac{\partial_k s^*(\mathbf{k})}{s^*(\mathbf{k})}\right) = \frac{\mathrm{i}}{4}\,\partial_k \left(\ln s(\mathbf{k}) - \ln s^*(\mathbf{k})\right) \\
&= \frac{\mathrm{i}}{4}\,\partial_k \ln\left(\frac{s(\mathbf{k})}{s^*(\mathbf{k})}\right)
\end{aligned}
\tag{9.2}
$$

بإجراء تكامل إتصال بيري على المنطقة الأولى لبريلوين نحصل على طور بيري [15]

$$
\gamma_{\pm} = \frac{\mathrm{i}}{4} \ln\left(\frac{s(\mathbf{k})}{s^*(\mathbf{k})}\right)\Bigg|_{-\pi/a}^{\pi/a} \tag{10.2}
$$

إن طور بيري هو طور هندسي تكتسبه الدالة الموجية الكمومية عند تطورها بشكل أديباتيكي عبر فضاء المُعلَّمات، مثل شعاع الموجة $\mathbf{k}$ في البلورات. يختلف هذا الطور عن الطور الديناميكي لأنه لا يعتمد على الطاقة أو الزمن، بل على الشكل الهندسي لمسار الحالة الكمومية أثناء إنتقالها في فضاء الحالات. لذلك فهو يعكس خصائص غير محلية (كلية) للنظام مرتبطة ببنيته الطوبولوجية أكثر من ارتباطه بتفاصيله المحلية.

يظهر في الأنظمة الدورية، مثل البلورات أحادية البعد، طور بيري عند تتبع الحالة الذاتية عبر منطقة بريلوين الأولى، حيث يمكن أن تكتسب الدالة الموجية مساهمة طورية ناتجة عن البنية الهندسية لفضاء الدوال الذاتية. تكون هذه المساهمة حساسة لطريقة تعريف دوال بلوخ (Bloch functions)، أي ما يسمى بالـ convention المستخدم في بناء الحالات.

تم في هذا العمل اعتماد الاتفاقية الأولى (Convention I) ، لأنها تحافظ على تمثيل صريح لموضع الإلكترون داخل الخلية الأولية، مما يجعل إتصال بيري يعكس بشكل مباشر البنية الموضعية للنظام. في المقابل، تفرض الاتفاقية الثانية دورية دوال بلوخ في الفضاء المتبادل، وهو ما يعيد توزيع المساهمة الطورية بين الجزء الداخلي للخلية وحدودها، ويجعل التفسير الهندسي أقل شفافية في سياق تحليل الموضع.

مع ذلك، فإن هذا الاختيار لا يغير الخواص الطوبولوجية الفيزيائية الأساسية، بل يؤثر فقط على طريقة تقسيم المساهمة الطورية بين الأجزاء المختلفة للدالة الموجية. ولهذا السبب

تُعرض التفاصيل التقنية المرتبطة بالمقارنة بين الاتفاقيتين وكيفية انتقال الطور بينهما في الملحق.2).

3.2 إقتران سلسلة SSH بحقل الليزر في تقريب ثنائي القطب

يمكن البرهنة على أن مبدأ " الارتباط الأدنى" المعروف $\hat{\mathbf{p}} \to \hat{\mathbf{p}} + \mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ والمستعمل لوصف اقتران الإلكترون بحقل خارجي ممثل بكمون شعاعي $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ في الحالة المستمرة، يقابله في نموذج الربط المحكم تعديلٌ في عناصر القفز (hopping elements) بحيث تعكس تأثير هذا الحقل الخارجي.

$$|m',\alpha'\rangle\langle m,\alpha| \longrightarrow \exp\left[-\mathrm{i}\,\frac{(\boldsymbol{r}_{m'\alpha'}-\boldsymbol{r}_{m\alpha})\cdot(\boldsymbol{A}_{m'\alpha'}(t)+\boldsymbol{A}_{m\alpha}(t))}{2}\right]|m',\alpha'\rangle\langle m,\alpha| \quad (11.2)$$

حيث $\mathbf{r}_{m'\alpha'}-\mathbf{r}_{m\alpha}$ هو شعاع مسافة القفز، و $\mathbf{A}_{m\alpha}(t)$ هو الكمون الشعاعي عند الموضع $\mathbf{r}_{m\alpha}$. يُعرف هذا الإستبدال الوارد في المعادلة (11.2) بإستبدال بيرلز (Peierls substitution)، وعند توفر هاملتوني الربط المحكم مثل (1.2)، فإننا نمتلك بعض المرونة في ربطه بالإحداثيات الحقيقية في فضاء المواقع.

عادةً ما يُستخدم نموذج SSH لوصف سلسلة متثنية (dimerized chain). انطلاقًا من توزيع منتظم للذرات بفاصل $a/2$، تُزاح هذه الذرات تناوبًا بمقدار صغير δ نحو اليمين واليسار، مما يؤدي إلى مضاعفة الخلية البدائية ليصبح طولها a. طالما أن $\delta \ll a$، يمكننا تقريب $\boldsymbol{r}_{m1}-\boldsymbol{r}_{m2} \simeq \boldsymbol{r}_{m+1,1}-\boldsymbol{r}_{m2} \simeq a/2$. إضافة إلى ذلك، في إطار تقريب ثنائي القطب، يصبح الكمون الشعاعي مستقلاً عن الموضع، أي $A_{m\alpha}(t)=A(t)$. وبذلك يُكتب الهاملتوني المعتمد على الزمن على الشكل التالي:

$$\hat{H}(t)=\sum_m\Big(v(t)\,|m,2\rangle\langle m,1|+w(t)\,|m+1,1\rangle\langle m,2|+\mathrm{h.c.}\Big) \quad (12.2)$$

حيث سعات القفز المتعلقة بالزمن تكون من الشكل:

$$v(t)=ve^{-\mathrm{i}a\mathbf{A}(\mathbf{t})/2}, \qquad w(t)=we^{-\mathrm{i}a\mathbf{A}(\mathbf{t})/2} \quad (13.2)$$

نستخدم الآن الفرضية (3.2) في حالة التعلق الزمني

$$|\Psi(k,t)\rangle=\sum_\alpha C_\alpha(k,t)|k,\alpha\rangle=\sum_{n\alpha}C_\alpha(k,t)e^{\mathrm{i}(n+(\alpha-1)/2)ak}|n,\alpha\rangle, \quad (14.2)$$

وتُعوض في معادلة شرودينغر المتعلقة بالزمن

$$\mathrm{i}\partial_t|\,|\Psi(t)\rangle = \hat{H}(t)\,|\Psi(t)\rangle \tag{15.2}$$

يُكتب الجانب الأيسر من المعادلة على النحو التالي:

$$\mathrm{i}\sum_{n\alpha}\dot{C}_\alpha(k,t)e^{\mathrm{i}(n+(\alpha-1)/2)ak}|n,\alpha\rangle \tag{16.2}$$

والطرف الأيمن مماثلًا لما ورد في المعادلة (5.2)، مع الإختلاف في أن المعاملات C و v و w تصبح دوالًا في الزمن

$$\sum_m e^{imak}\left[C_1(k,t)\left(v(t)+w^*(t)e^{\mathrm{i}ak}\right)|m,2\rangle + C_2(k,t)\left(v^*(t)e^{\mathrm{i}ak/2}+w(t)e^{-\mathrm{i}ak/2}\right)|m,1\rangle\right] \tag{17.2}$$

وبالتالي

$$\mathrm{i}\begin{pmatrix}\dot{C}_1(k,t)\\ \dot{C}_2(k,t)\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0 & v^*e^{\mathrm{i}a(k+A(t))/2}+we^{-\mathrm{i}a(k+A(t))/2}\\ ve^{-\mathrm{i}a(k+A(t))/2}+w^*e^{\mathrm{i}a(k+A(t))/2} & 0\end{pmatrix} \times\begin{pmatrix}C_1(k,t)\\ C_2(k,t)\end{pmatrix}$$

أو بالترميز المصفوفي

$$\mathrm{i}\dot{\mathbf{C}}(\mathbf{k},t) = \mathbf{H}(\mathbf{k},t)\mathbf{C}(\mathbf{k},t) \tag{18.2}$$

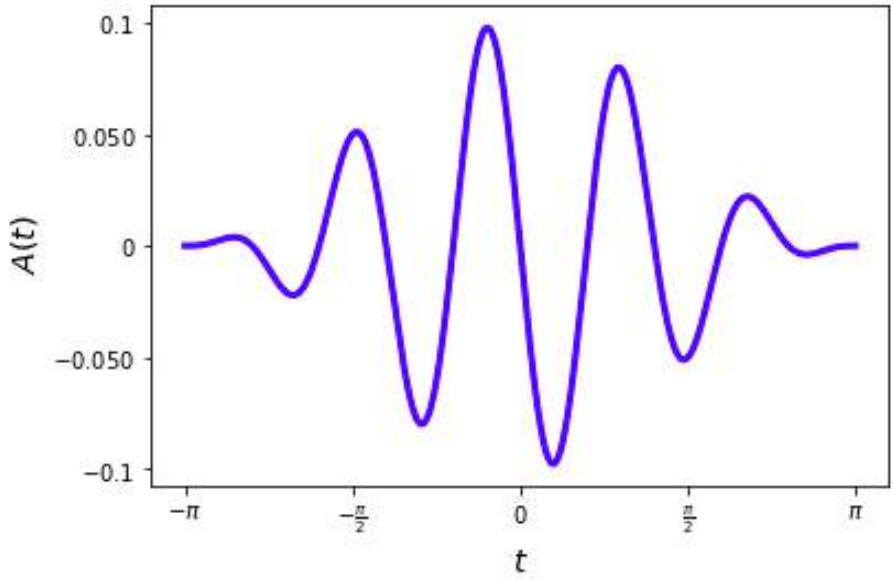
حيث

$$\mathbf{H}(\mathbf{k},t) = \begin{pmatrix}0 & s^*(\mathbf{k},t)\\ s(\mathbf{k},t) & 0\end{pmatrix}, \qquad s(\mathbf{k},t) = s[\mathbf{k}+\mathbf{A}(\mathbf{t})]. \tag{19.2}$$

في إطار تقريب ثنائي القطب، يتم اقتران النظام بحقل الليزر من خلال تعويض كمية الحركة البلورية للإلكترون في البلورة $\mathbf{k}$ بكمية حركة زمنية $\mathbf{k}(\mathbf{t}) = \mathbf{k}+\mathbf{A}(\mathbf{t})$ ضمن هاملتوني بلوخ، حيث يمثّل $\mathbf{A}(\mathbf{t})$ الكمون الشعاعي:

$$\mathbf{A}(\mathbf{t}) = \mathbf{A_0}\sin^2\left(\frac{\omega t}{2n_{cyc}}\right)\sin\omega t \tag{20.2}$$

حيث $\mathbf{A_0}$ هي سعة حقل الليزر و ω هو التردد الزاوي و n_{cyc} هي عدد دورات الليزر



شكل 3.2: نبضة الليزر $\mathbf{A(t)}$ بدلالة الزمن t,
(ا) حيث $n_{cyc} = 5$ و $A_0 = 0.1$ و $\omega = 0.0075$.

بفرض الشرط الابتدائي $C(\mathbf{k}, 0) = C_{\pm}(\mathbf{k})$، يمكن تتبّع تطور حالة بلوخ $C_{\pm}(\mathbf{k})$ تحت تأثير الحقل الليزري. وتمثل المعادلة (18.2) نظامًا من معادلتين تفاضليتين عاديتين مترابطتين، يمكن حلهما عدديًا بسهولة. وبالتالي، يمكن حساب القيمة المتوقعة للسرعة كما يلي:

$$v(\mathbf{k}, t) = \mathbf{C}^{\dagger}(\mathbf{k}, t)\partial_{\mathbf{k}}\mathbf{H}(\mathbf{k}(t))\mathbf{C}(\mathbf{k}, t) \tag{21.2}$$

بعد ذلك، نقوم بإجراء تكامل على $\mathbf{k}$ ضمن منطقة بريلوان الأولى من أجل جمع مساهمات جميع الإلكترونات المختلفة.

$$v(t) = \frac{V_{cell}}{2\pi}\int_{\mathrm{BZ}} \mathbf{dk}\, v(\mathbf{k}, t) \tag{22.2}$$

أخيرًا، يمكن الحصول على أطياف توليد التوافقيات العالية (HHG) من خلال تطبيق تحويل فوريه على التسارع $\dot{v}(t)$ [17,15,8].

4.2 نموذج رايس ميلي "Rice-Mele model"

يُمثّل نموذج Rice-Mele تعميمًا لنموذج SSH ، حيث يتم إدخال كمون موضعي متناوب بالإضافة إلى القفزات المتناوبة بين المواقع. إن هاميلتوني الربط المحكم لسلسلة Rice-Mele يأخذ بعين الاعتبار مدارين فقط في كل خلية وحدة، كما يقتصر على نوعين من عمليات

القفز: القفز داخل الخلية $(\Delta\mathbf{R}=0)$ والقفز إلى الجار التالي $(\Delta\mathbf{R}=\mathbf{a}_1)$، بسعتي انتقال v و w على التوالي، بالإضافة إلى كمون موضعي u، ويكتب الهاملتوني على النحو التالي [16,7]:

$$\hat{H}=\sum_m \left(v\,|m,2\rangle\langle m,1|+w\,|m+1,1\rangle\langle m,2|+h.c.\right)+u\sum_m\left(|m,1\rangle\langle m,1|-|m,2\rangle\langle m,2|\right) \tag{23.2}$$

بغرض تبسيط الترميز يكتب المتجه $|\phi_{\mathbf{R}\alpha}\rangle$ بالشكل $|m,\alpha\rangle$ حيث m هو مؤشر الخلية ويمثل الموضع $\mathbf{R}=m\mathbf{a_1}$, وα هو مؤشر مدار الخلية حيث: $\alpha=1,2$.

نستخدم نفس فرضية بلوخ المعتمدة سابقًا:

$$|k,\alpha\rangle=\sum_n e^{\mathrm{i}(n+(\alpha-1)/2)ak}|n,\alpha\rangle,\qquad \alpha=1,2 \tag{24.2}$$

وعندئذ تُصبح الحالة:

$$|\pm,k\rangle=\sum_\alpha C_\alpha^{\pm}(k)|k,\alpha\rangle=\sum_{n,\alpha}C_\alpha^{\pm}(k)e^{\mathrm{i}(n+(\alpha-1)/2)ak}|n,\alpha\rangle. \tag{25.2}$$

عند تطبيق الهاميلتونيان $\hat{H}$ على هذه الحالة وإتباع نفس نهج الاشتقاقات السابقة (كما في نموذج SSH) نحصل على :

$$E_\pm(k)\begin{pmatrix}C_1^{\pm}(k)\\C_2^{\pm}(k)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}u & v^*e^{\mathrm{i}ak/2}+we^{-\mathrm{i}ak/2}\\ ve^{-\mathrm{i}ak/2}+w^*e^{\mathrm{i}ak/2} & -u\end{pmatrix}\begin{pmatrix}C_1^{\pm}(k)\\C_2^{\pm}(k)\end{pmatrix} \tag{26.2}$$

أو بالترميز المصفوفي:

$$E_\pm(k)\,\mathbf{C}_\pm(\mathbf{k})=\mathbf{H}(\mathbf{k})\,\mathbf{C}_\pm(\mathbf{k}), \tag{27.2}$$

حيث

$$\mathbf{H}(\mathbf{k})=\begin{pmatrix}u & s^*(\mathbf{k})\\ s(\mathbf{k}) & -u\end{pmatrix},\qquad s(\mathbf{k})=ve^{-\mathrm{i}a\mathbf{k}/2}+w^*e^{\mathrm{i}a\mathbf{k}/2}. \tag{28.2}$$

وتكون القيم الذاتية للطاقة كما يلي :

$$E_\pm(\mathbf{k})=\pm\sqrt{s(\mathbf{k})s^*(\mathbf{k})+u^2} \tag{29.2}$$

الأشعة الذاتية المنظمة تأخذ الشكل:

$$\mathbf{C}_\pm(\mathbf{k})=\sqrt{\frac{E_\pm(\mathbf{k})+u}{2E_\pm(\mathbf{k})}}\begin{pmatrix}1\\ \dfrac{E_\pm(\mathbf{k})-u}{s^*(\mathbf{k})}\end{pmatrix}. \tag{30.2}$$

نلاحظ أن نموذج Rice-Mele يختلف عن نموذج SSH بوجود الحد القطري u، والذي يؤدي إلى كسر تناظر الانعكاس، مما يغير الخصائص الطوبولوجية للنظام [16].

5.2 الخصائص الطوبولوجية لنموذج رايس-ميلي (Rice-Mele Model)

يُعد نموذج رايس-ميلي تعميمًا لنموذج SSH، حيث يتم كسر تناظر الانعكاس (inversion symmetry) من خلال إدخال جهد موضعي u بين الموقعين داخل الخلية، بالإضافة إلى القفزات غير المتساوية. في فضاء الموجة، يُعطى هاملتوني بلوخ بالعلاقة (28.2)

$$\mathbf{H}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} u & s^*(\mathbf{k}) \\ s(\mathbf{k}) & -u \end{pmatrix}, \qquad s(\mathbf{k}) = ve^{-\mathrm{i}a\mathbf{k}/2} + w^* e^{\mathrm{i}a\mathbf{k}/2}.$$

يُعرّف طور بيري كما يلي:

$$\gamma_\pm = \mathrm{i}\int_{-\pi/a}^{\pi/a} \langle u_\mathbf{k} | \partial_\mathbf{k} u_\mathbf{k} \rangle \, \mathrm{d}\mathbf{k}. \tag{31.2}$$

باستخدام الأشعة الذاتية المُتحصّل عليها سابقًا(30.2)، يُمكن كتابة إتصال بيري على النحو التالي:

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}_{\pm\pm}(\mathbf{k}) &= \mathrm{i}\mathbf{C}_\pm^\dagger(\mathbf{k}) \cdot \partial_\mathbf{k}\mathbf{C}_\pm(\mathbf{k}) \qquad (32.2)\\
&= \frac{E_\pm(\mathbf{k})+u}{2E_\pm(\mathbf{k})}\left(1, \frac{E_\pm(\mathbf{k})-u}{s(\mathbf{k})}\right)\cdot \mathrm{i}\partial_\mathbf{k}\begin{pmatrix} 1 \\ \dfrac{E_\pm(\mathbf{k})-u}{s^*(\mathbf{k})} \end{pmatrix} \\
&= \frac{E_\pm(\mathbf{k})+u}{2E_\pm(\mathbf{k})}\left(1, \frac{E_\pm(\mathbf{k})-u}{s(\mathbf{k})}\right)\cdot \mathrm{i}\begin{pmatrix} 0 \\ \dfrac{s^*(\mathbf{k})\partial_\mathbf{k}E_\pm(\mathbf{k}) - (E_\pm(\mathbf{k})-u)\partial_\mathbf{k}s^*(\mathbf{k})}{(s^*(\mathbf{k}))^2} \end{pmatrix} \\
&= \frac{\mathrm{i}}{2}\frac{E_\pm(\mathbf{k})+u}{E_\pm(\mathbf{k})}\left\{\frac{E_\pm(\mathbf{k})-u}{s(\mathbf{k})}\left(\frac{s^*(\mathbf{k})\partial_\mathbf{k}E_\pm(\mathbf{k})}{(s^*(\mathbf{k}))^2} - \frac{E_\pm((\mathbf{k})-u)}{s^*(\mathbf{k}))^2}\,\partial_k s^*(\mathbf{k})\right)\right\}
\end{aligned}$$

حيث:

$$\partial_\mathbf{k}E_\pm(\mathbf{k}) = \frac{s^*(\mathbf{k})\partial_\mathbf{k}s(\mathbf{k}) + s(\mathbf{k})\partial_\mathbf{k}s^*(\mathbf{k})}{2E_\pm(\mathbf{k})}.$$

إذن:

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}_{\pm\pm}(\mathbf{k}) &= \frac{\mathrm{i}}{2}\frac{E_\pm^2-u^2}{E_\pm}\left\{\frac{1}{2E_\pm}\left(\frac{\partial_\mathbf{k}s^*(\mathbf{k})}{s^*(\mathbf{k})} + \frac{\partial_\mathbf{k}s(\mathbf{k})}{s(\mathbf{k})}\right) - \frac{E_\pm-u}{|s(\mathbf{k})|^2}\frac{\partial_\mathbf{k}s^*(\mathbf{k})}{s^*(\mathbf{k})}\right\} \\
&= \frac{\mathrm{i}}{4}\frac{|s(\mathbf{k})|^2}{E_\pm^2}\,\partial_\mathbf{k}\ln\big(|s(\mathbf{k})|^2\big) - \frac{\mathrm{i}}{2}\frac{(E_\pm-u)}{E_\pm}\,\partial_\mathbf{k}\ln(s^*(\mathbf{k})).
\end{aligned}$$

بكتابة $s(\mathbf{k}) = |s(\mathbf{k})|\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\Phi(\mathbf{k})}$ نجد:

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}_{\pm\pm}(\mathbf{k}) &= \frac{\mathrm{i}}{2}\frac{|s(\mathbf{k})|^2}{E_\pm^2}\,\partial_\mathbf{k}\ln(|s(\mathbf{k})|) - \frac{\mathrm{i}}{2}\frac{E_\pm-u}{E_\pm}\,\partial_\mathbf{k}\ln(|s(\mathbf{k})|) - \frac{1}{2}\frac{E_\pm-u}{E_\pm}\,\partial_\mathbf{k}\Phi(\mathbf{k}) \\
&= \frac{\mathrm{i}}{2}\frac{u}{E_\pm}\left(1-\frac{u}{E_\pm}\right)\partial_\mathbf{k}\ln(|s(\mathbf{k})|) - \frac{1}{2}\left(1-\frac{u}{E_\pm}\right)\partial_\mathbf{k}\Phi(\mathbf{k}),
\end{aligned}$$

ومن ثم يُحسب طور بيري عبر التكامل على منطقة بريلوين الأولى:

$$\gamma_{\pm} = \int_{\mathrm{BZ}} \mathcal{A}_{\pm\pm}(\mathbf{k})\mathrm{d}\mathbf{k} \tag{33.2}$$

بعد اشتقاق عبارة اتصال بيري المرتبط بنطاقات الطاقة في نموذج رايس-ميلي، يتبيّن أنه يعتمد بشكل صريح على شعاع الموجة البلورية $\mathbf{k}$، وذلك من خلال كل من السعة $|s(\mathbf{k})|$ والطور $\Phi(\mathbf{k})$. ويؤدي هذا الاعتماد إلى جعل حساب طور بيري على كامل منطقة بريلوان الأولى غير قابل للاشتقاق التحليلي في الحالة العامة عندما يكون الكمون الموضعي $u \neq 0$.وعليه، يتم في هذا العمل حساب طور بيري عددياً من خلال إجراء تكامل مُجزّأ على منطقة بريلوين. تُتيح هذه المقاربة العددية تتبّع تطور طور بيري بدلالة الكمون الموضعي u، كما تمكّن من توصيف الخصائص الطوبولوجية المرتبطة بالنظام [16,14].

من المفهوم أن الانتقال الطوبولوجي في نموذج رايس-ميلي يُحكم بواسطة القيم النسبية لسعتي القفز v و w ، وكذلك الكمون الموضعي المتناوب u. فعلى سبيل المثال، عندما يكون $v = w$ و $u = 0$، يخضع النظام لانتقال من طور طوبولوجي تافه إلى طور غير تافه، حيث تظهر حالات حافّة (edge states) في السلاسل المحدودة [16].

في نموذج SSH (عند $u = 0$)، يكون طور بيري مكمماً بسبب وجود تناظر الانعكاس. أما في نموذج رايس-ميلي، فإن وجود الحد u يؤدي إلى كسر هذا التناظر، وبالتالي يصبح طور بيري غير مكمم، حيث يمكنه أن يأخذ قيماً مستمرة.

يعكس هذا السلوك التغير المستمر في دوال بلوخ عند تغيير الجهد الموضعي u، وهو ما يؤدي إلى تغير تدريجي في الخصائص الطوبولوجية للنظام دون حدوث انتقال طوبولوجي طالما أن الفجوة الطاقية تبقى مفتوحة [16].

6.2 إقتران نموذج Rice-Mele بحقل الليزر في تقريب ثنائي القطب

يمكن إدخال تأثير الحقل الكهرومغناطيسي الخارجي في نموذج الربط المحكم من خلال استبدال بيرلز (Peierls substitution)، والذي يُعد النظير الشبكي لمبدأ الاستبدال الأدنى $\mathbf{p} \to \mathbf{p}+\mathbf{A}(t)$ في الأنظمة المستمرة [22,21]، ويؤدي هذا الاستبدال إلى تعديل معاملات

القفز كما في العلاقة (11.2)

$$|m',\alpha'\rangle\langle m,\alpha| \longrightarrow \exp\left[-\mathrm{i}\,\frac{(\mathbf{r}_{m'\alpha'}-\mathbf{r}_{m\alpha})\cdot(\mathbf{A}_{m'\alpha'}(t)+\mathbf{A}_{m\alpha}(t))}{2}\right]|m',\alpha'\rangle\langle m,\alpha|\,. \quad (34.2)$$

نعتبر في نموذج Rice-Mele وجود فرق طاقي داخل الخلية يُمثّل بالمعامل u، وبالتالي يُكتب الهاملتوني المعتمد على الزمن:

$$\hat{H}(t)=\sum_m\Big[u\,|m,1\rangle\langle m,1|-u\,|m,2\rangle\langle m,2|+v(t)\,|m,2\rangle\langle m,1|+w(t)\,|m+1,1\rangle\langle m,2|+\text{h.c.}\Big]. \quad (35.2)$$

في إطار تقريب ثنائي القطب، يُفترض أن الكمون الشعاعي مستقل عن الموضع:

$$\mathbf{A}_{m\alpha}(t)=\mathbf{A}(t),$$

ومع اعتبار أن مسافات القفز تُقارب $a/2$، تصبح معاملات القفز كالتالي

$$v(t)=v\,e^{-\mathrm{i}aA(t)/2}, \qquad w(t)=w\,e^{-\mathrm{i}aA(t)/2}. \quad (36.2)$$

نستعمل تمثيل بلوخ المعتمد على الزمن:

$$|\Psi(k,t)\rangle=\sum_\alpha C_\alpha(k,t)|k,\alpha\rangle=\sum_{n,\alpha}C_\alpha(k,t)e^{\mathrm{i}(n+(\alpha-1)/2)ak}|n,\alpha\rangle. \quad (37.2)$$

بإدخال هذا التمثيل في معادلة شرودينغر المعتمدة على الزمن نجد

$$\mathrm{i}\partial_t|\Psi(k,t)\rangle=\hat{H}(t)|\Psi(k,t)\rangle, \quad (38.2)$$

نحصل على المعادلة التفاضلية:

$$\mathrm{i}\,\dot{\mathbf{C}}(k,t)=\mathbf{H}(\mathbf{k},t)\,\mathbf{C}(\mathbf{k},t), \quad (39.2)$$

حيث:

$$\mathbf{H}(\mathbf{k},t)=\begin{pmatrix}u & s^*(\mathbf{k},t)\\ s(\mathbf{k},t) & -u\end{pmatrix}, \qquad s(\mathbf{k},t)=s\big(\mathbf{k}+\mathbf{A}(\mathbf{t})\big). \quad (40.2)$$

وبالتالي، في تقريب ثنائي القطب، يتم اقتران النظام مع الحقل الليزري عبر التعويض:

$$\mathbf{k}\longrightarrow\mathbf{k}(\mathbf{t})=\mathbf{k}+\mathbf{A}(\mathbf{t}), \quad (41.2)$$

وهو ما يُعرف بنظرية التسارع (acceleration theorem) [23,14].

7.2 خلاصة

في هذا الفصل، تم تقديم دراسة مفصلة للنماذج أحادية البعد ذات الخصائص الطوبولوجية، انطلاقًا من نموذج سو-شريفر-هيغر (SSH) كنموذج أساسي، وصولاً إلى نموذج Rice-Mele الأكثر عمومية. وقد سمح هذا الانتقال بإبراز الدور الحاسم لكسر تناظر الإنعكاس، المتمثل في المعامل u، في إغناء الخصائص الفيزيائية والطوبولوجية للنظام.

تم إشتقاق الهاملتوني في فضاء Bloch والحصول على القيم والأشعة الذاتية، مما مهد الطريق لتحليل الخصائص الطوبولوجية عبر طور بيري (طور زاك). وقد تبين أن هذا الطور يُشكل مؤشرًا طوبولوجيًا يُميز بين الأطوار المختلفة للنظام، ويرتبط مباشرة بوجود حالات حافة محمية طوبولوجيًا.

كما تم إدخال تأثير الحقل الليزري ضمن تقريب ثنائي القطب باستخدام استبدال بيرلز، مما أدى إلى وصف ديناميكي يعتمد على الزمن من خلال تعويض شعاع الموجة k بكمية حركة فعالة $\mathbf{k}(\mathbf{t}) = \mathbf{k} + \mathbf{A}(\mathbf{t})$. وقد أتاح هذا الإطار دراسة إستجابة النظام للحقل الخارجي، خاصة من خلال حساب السرعة والتيار، مع إبراز مساهمة طور بيري في الديناميكيات الإلكترونية.

أخيرًا، يوفر نموذج Rice-Mele مِنَصَّة مناسبة لدراسة الظواهر غير الخطية مثل توليد التوافقيات العالية، حيث تلعب الخصائص الطوبولوجية دورًا مهمًا في تحديد طبيعة الإشعاع المنبعث، وبالتالي، يشكل هذا الفصل أساسًا نظريًا ضروريًا لفهم التفاعلات بين الحقول القوية والبنى الطوبولوجية في المواد الصلبة.

انطلاقًا من هذا الإطار، سيتم في الفصل القادم دراسة الأنظمة ثنائية البعد من خلال تطبيق نظرية الحقول القوية على نموذج طوبولوجي ثنائي البعد، مما يُتيح تعميق فهم تأثير البنية الطوبولوجية والأبعاد الأعلى على إستجابة المادة للحقول الشديدة.

الفصل الثالث:

تطبيق نظرية الحقول القوية على

نموذج طوبولوجي ثنائي البعد

الفصل 3

تطبيق نظرية الحقول القوية على نموذج طوبولوجي ثنائي البعد

1.3 تمهيد:

يهدف هذا الفصل إلى دراسة ديناميك الإلكترونات في الأنظمة ثنائية البعد باستخدام نموذج هالدين، مع التركيز على استجابة هذه الأنظمة للحقول الليزرية القوية والخصائص الطوبولوجية المرتبطة بها. ويُعد نموذج هالدين من النماذج الأساسية لوصف الأنظمة الطوبولوجية على شبكة سداسية ثنائية البعد دون الحاجة إلى تطبيق مجال مغناطيسي خارجي.

في هذا النموذج، تؤخذ بعين الاعتبار انتقالات أقرب الجيران بالإضافة إلى انتقالات الجيران من الدرجة الثانية ذات الطور العقدي، والتي تؤدي إلى ظهور أطوار طوبولوجية غير تافهة وانفتاح فجوات طاقوية في البنية الإلكترونية.

سنقوم أولًا ببناء الهاملتوني في الفضاء الحقيقي ثم تحويله إلى فضاء بلوخ للحصول على تمثيل مصفوفي يسمح باستخراج البنية الطاقوية والحالات الذاتية وتحليل الخصائص الفيزيائية للنظام. بعد ذلك، ندرس ديناميك الإلكترونات تحت تأثير الحقول الليزرية القوية ضمن تقريب ثنائي القطب، مع التركيز على ظاهرة توليد التوافقيات العالية.

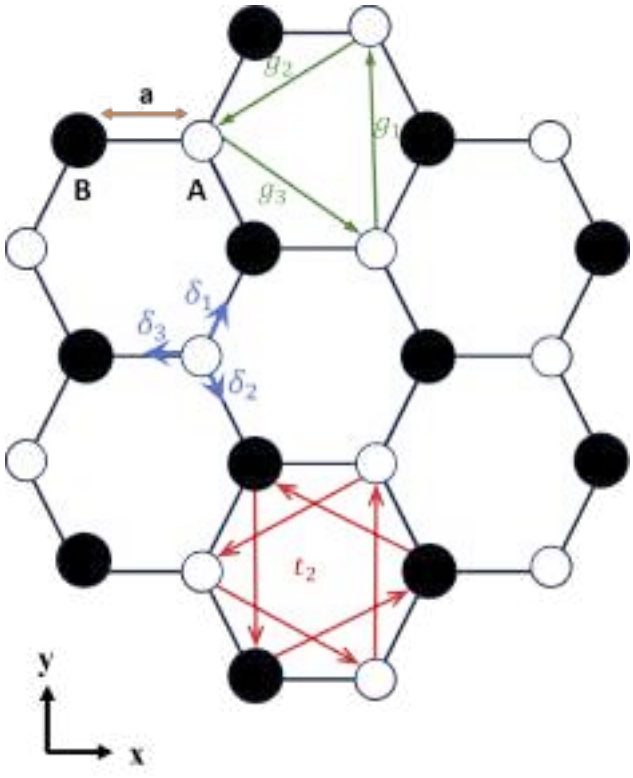
وفي النهاية، يتم تطبيق النموذج على مادة نيتريد البورون السداسي (hBN) باعتبارها نظامًا فيزيائيًا واقعيًا لدراسة الاستجابة الإلكترونية غير الخطية في المواد ثنائية البعد.

2.3 نموذج هالدين

يُعدّ نموذج هالدين من النماذج الأساسية لدراسة الخصائص الطوبولوجية في الأنظمة ثنائية البعد دون الحاجة إلى تطبيق مجال مغناطيسي خارجي [9]. يصف هذا النموذج حركة الإلكترونات على شبكة سداسية تتكون من ذرتين A و B، حيث تحتوي كل خلية وحدة على موقعين مع كمونات موضعية متعاكسة M و $-M$.

لدراسة السلوك الحجمي (bulk) ، يتم افتراض شروط دورية على النظام، مما يسمح بتطبيق مبرهنة بلوخ وإعادة صياغة الهاملتوني في فضاء الزخم على شكل مصفوفة تعتمد على متجه الموجة **k**.

يتضمن النموذج انتقالات بين أقرب الجيران بسعة t_1، إضافة إلى انتقالات بين الجيران من المرتبة الثانية بسعة t_2، والتي قد تحمل طورًا مركبًا. تلعب هذه العناصر دورًا أساسيًا في ظهور الخصائص الطوبولوجية للنطاقات الطاقية.



شكل 1.3: شبكة هالدين على بنية سداسية مكوّنة من ذرتين A وB.

(ا) تمثل الأشعة δ_i $(i = 1, 2, 3)$ أشعة أقرب الجيران بين A وB، بينما تمثل الأشعة g_i متجهات الجيران من الدرجة الثانية التي تربط مواقع داخل نفس تحت-الشبكة. هذه الأشعة مرتبطة بانتقالات t_2 ذات الطور العقدي في نموذج هالدين.

فيما يلي، نقوم باشتقاق هاملتوني نموذج هالدين انطلاقًا من الفضاء الحقيقي ثم نحوله إلى فضاء الدفع الخطي باستخدام فرضية بلوخ. يُكتب هاملتوني الربط المحكم لنموذج الهالداين في بعدين (2D) من الشكل التالي [17]:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_{mn}\Big[t_1\big(|m,n,B\rangle\langle m,n,A| + |m+1,n,B\rangle\langle m,n,A| + |m+1,n+1,B\rangle\langle m,n,A|\big)\\ &\quad + t_2\big(|m,n+1,A\rangle\langle m,n,A| + |m-1,n-1,A\rangle\langle m,n,A| + |m+1,n,A\rangle\langle m,n,A|\\ &\quad + |m-1,n,B\rangle\langle m,n,B| + |m,n-1,B\rangle\langle m,n,B| + |m+1,n+1,B\rangle\langle m,n,B|\big)\Big] + \text{h.c.}\\ &\quad + M\sum_{mn}\big(|m,n,A\rangle\langle m,n,A| - |m,n,B\rangle\langle m,n,B|\big) \qquad (1.3)\end{aligned}$$

حيث t_1 تمثل سعة القفز بين أقرب الجيران $(t_1 \in \mathbb{R})$، و t_2 هي سعة القفز بين الجيران من الدرجة الثانية $(t_2 \in \mathbb{C})$، بينما M تمثل الكمون الموضعي $(M \in \mathbb{R})$.

نكتب فرضية بلوخ (Bloch ansatz) من الشكل التالي [24]:

$$|\pm,\mathbf{k}\rangle = \sum_{mn} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(m\mathbf{g}_3+n\mathbf{g}_1)\cdot\mathbf{k}}|m,n\rangle \otimes (C_{\pm}^{A}(\mathbf{k})|A\rangle + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\delta}_3\cdot\mathbf{k}}C_{\pm}^{B}(\mathbf{k})|B\rangle). \qquad (2.3)$$

$\boldsymbol{\delta}_i$ هي أشعة الشبكة التي تربط بين أقرب الجيران (nearest neighbors) حيث:

$$\boldsymbol{\delta}_1 = \frac{a}{2}\begin{pmatrix}1\\ \sqrt{3}\end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\delta}_2 = \frac{a}{2}\begin{pmatrix}1\\ -\sqrt{3}\end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\delta}_3 = -a\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix},$$

أما $\boldsymbol{g}_i$ فهي أشعة الشبكة التي تربط بين الجيران من الدرجة الثانية (next nearest neighbors) حيث:

$$\boldsymbol{g}_1 = a\begin{pmatrix}0\\ \sqrt{3}\end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{g}_2 = -\frac{a}{2}\begin{pmatrix}3\\ \sqrt{3}\end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{g}_3 = \frac{a}{2}\begin{pmatrix}3\\ -\sqrt{3}\end{pmatrix}.$$

بتعويض فرضية بلوخ (2.3) في معادلة شرودنغر غير المتعلقة بالزمن (TISE)،

$$\hat{H}|\pm,\boldsymbol{k}\rangle = E_{\pm}|\pm,\mathbf{k}\rangle, \qquad (3.3)$$

فنحصل على:

$$\sum_{nm} t_1\Big[\big(1+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{g}_3\cdot\boldsymbol{k}}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{g}_1+\mathbf{g}_3)\cdot\mathbf{k}}\big)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\delta}_3\cdot\boldsymbol{k}}C^B_{\pm}(\boldsymbol{k})|m,n,A\rangle+\big(1+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{g}_3\cdot\mathbf{k}}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\mathbf{g}_1+\mathbf{g}_3)\cdot\boldsymbol{k}}\big)C^A_{\pm}(\boldsymbol{k})|m,n,B\rangle\Big]$$
$$\times\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m\mathbf{g}_3+n\mathbf{g}_1)\cdot\boldsymbol{k}}+\sum_{nm} t_2\Big[\big(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{g}_1\cdot\boldsymbol{k}}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{g}_3\cdot\boldsymbol{k}}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{g}_1+\mathbf{g}_3)\cdot\mathbf{k}}\big)C^A_{\pm}(\boldsymbol{k})|m,n,A\rangle+\big(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{g}_1\cdot\boldsymbol{k}}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{g}_3\cdot\boldsymbol{k}}$$
$$+\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{g}_1+\mathbf{g}_3)\cdot\boldsymbol{k}}\big)C^B_{\pm}(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_3\cdot\mathbf{k}}|m,n,B\rangle\Big]\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m\mathbf{g}_3+n\mathbf{g}_1)\cdot\boldsymbol{k}}+\sum_{nm} t_2^*\Big[\big(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{g}_1\cdot\mathbf{k}}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{g}_3\cdot\boldsymbol{k}}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\mathbf{g}_1+\mathbf{g}_3)\cdot\boldsymbol{k}}\big)C^A_{\pm}(\mathbf{k})$$
$$\times\,|m,n,A\rangle+\big(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{g}_1\cdot\mathbf{k}}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{g}_3\cdot\boldsymbol{k}}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{g}_1+\mathbf{g}_3)\cdot\boldsymbol{k}}\big)C^B_{\pm}(\mathbf{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\delta}_3\cdot\mathbf{k}}|m,n,B\rangle\Big]\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m\mathbf{g}_3+n\mathbf{g}_1)\cdot\mathbf{k}}$$
$$+\sum_{nm} M\big(C^A_{\pm}(\boldsymbol{k})|m,n,A\rangle-C^B_{\pm}(\mathbf{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_3\cdot\mathbf{k}}|m,n,B\rangle\big)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m\mathbf{g}_3+n\mathbf{g}_1)\cdot\boldsymbol{k}}$$
$$=E_{\pm}\sum_{nm}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m\mathbf{g}_3+n\mathbf{g}_1)\cdot\boldsymbol{k}}\big(C^A_{\pm}(\boldsymbol{k})|m,n,A\rangle+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\delta}_3\cdot\boldsymbol{k}}C^B_{\pm}(\boldsymbol{k})|m,n,B\rangle\big). \qquad (4.3)$$

وبضرب المعادلة (4.3) من جهة اليسار بـ $\langle m',n'|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(m'\mathbf{g}_3+n'\mathbf{g}_1)\cdot\mathbf{k}}$ نحصل على:

$$t_1\Big[\big(1+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{g}_3\cdot\mathbf{k}}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{g}_1+\mathbf{g}_3)\cdot\mathbf{k}}\big)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_3\cdot\boldsymbol{k}}C^B_{\pm}(\mathbf{k})|A\rangle+\big(1+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{g}_3\cdot\mathbf{k}}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\mathbf{g}_1+\mathbf{g}_3)\cdot\mathbf{k}}\big)C^A_{\pm}(\mathbf{k})|B\rangle\Big]$$
$$+\,t_2\Big[\big(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{g}_1\cdot\mathbf{k}}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{g}_3\cdot\mathbf{k}}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{g}_1+\mathbf{g}_3)\cdot\mathbf{k}}\big)C^A_{\pm}(\mathbf{k})|A\rangle+\big(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{g}_1\cdot\mathbf{k}}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{g}_3\cdot\mathbf{k}}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\mathbf{g}_1+\mathbf{g}_3)\cdot\mathbf{k}}\big)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_3\cdot\mathbf{k}}C^B_{\pm}(\mathbf{k})|B\rangle\Big]$$
$$+\,t_2^*\Big[\big(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{g}_1\cdot\mathbf{k}}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{g}_3\cdot\mathbf{k}}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\mathbf{g}_1+\mathbf{g}_3)\cdot\mathbf{k}}\big)C^A_{\pm}(\mathbf{k})|A\rangle+\big(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{g}_1\cdot\mathbf{k}}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{g}_3\cdot\mathbf{k}}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{g}_1+\mathbf{g}_3)\cdot\mathbf{k}}\big)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_3\cdot\mathbf{k}}C^B_{\pm}(\mathbf{k})|B\rangle\Big]$$
$$+\,M\big(C^A_{\pm}(\mathbf{k})|A\rangle-\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_3\cdot\mathbf{k}}C^B_{\pm}(\mathbf{k})|B\rangle\big)=E_{\pm}\big(C^A_{\pm}(\mathbf{k})|A\rangle+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_3\cdot\mathbf{k}}C^B_{\pm}(\mathbf{k})|B\rangle\big).$$
$$(5.3)$$

المعادلة النهائية تتكون من معادلتين مستقلتين، ويمكن فك إرتباطهما من خلال الإسقاط على فضاء هيلبرت باستخدام $\langle A|$ أو $\langle B|$ من الجهة اليسرى:

$$\langle A|: \quad t_1\big(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_3\cdot\mathbf{k}}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{g}_3+\delta_3)\cdot\mathbf{k}}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\delta_3-\mathbf{g}_2)\cdot\mathbf{k}}\big)C^B_{\pm}(\mathbf{k})+t_2\big(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{g}_1\cdot\mathbf{k}}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{g}_2\cdot\mathbf{k}}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{g}_3\cdot\mathbf{k}}\big)C^A_{\pm}(\mathbf{k})$$
$$+\,t_2^*\big(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{g}_1\cdot\mathbf{k}}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{g}_2\cdot\mathbf{k}}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{g}_3\cdot\mathbf{k}}\big)C^A_{\pm}(\mathbf{k})+MC^A_{\pm}(\mathbf{k})=E_{\pm}C^A_{\pm}(\mathbf{k}), \qquad (6.3)$$

$$\langle B|\times\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta_3\cdot\mathbf{k}}: \quad t_1\big(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta_3\cdot\mathbf{k}}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\mathbf{g}_3+\delta_3)\cdot\mathbf{k}}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{g}_2-\delta_3)\cdot\mathbf{k}}\big)C^A_{\pm}(\mathbf{k})+t_2\big(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{g}_1\cdot\mathbf{k}}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{g}_2\cdot\mathbf{k}}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{g}_3\cdot\mathbf{k}}\big)C^B_{\pm}(\mathbf{k})$$
$$+\,t_2^*\big(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{g}_1\cdot\mathbf{k}}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{g}_2\cdot\mathbf{k}}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{g}_3\cdot\mathbf{k}}\big)C^B_{\pm}(\mathbf{k})-MC^B_{\pm}(\mathbf{k})=E_{\pm}C^B_{\pm}(\mathbf{k}), \qquad (7.3)$$

يمكن تبسيط المعادلتين (6.3) و (7.3) بإستخدام علاقات الأشعة التالية [24]:

$$\mathbf{g}_3+\delta_3=\delta_2, \quad \delta_3-\mathbf{g}_2=\delta_1, \quad \mathbf{g}_1+\mathbf{g}_3=-\mathbf{g}_2 \qquad (8.3)$$

$$t_1\sum_{i=1}^{3}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_i\cdot\mathbf{k}}C^B_{\pm}(\mathbf{k})+t_2\sum_{i=1}^{3}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{g}_i\cdot\mathbf{k}}C^A_{\pm}(\mathbf{k})+t_2^*\sum_{i=1}^{3}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{g}_i\cdot\mathbf{k}}C^A_{\pm}(\mathbf{k})+MC^A_{\pm}(\mathbf{k})=E_{\pm}C^A_{\pm}(\mathbf{k}), \qquad (9.3)$$

$$t_1 \sum_{i=1}^{3} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta_i\cdot\mathbf{k}} C_{\pm}^{A}(\mathbf{k}) + t_2 \sum_{i=1}^{3} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{g}_i\cdot\mathbf{k}} C_{\pm}^{B}(\mathbf{k}) + t_2^{*} \sum_{i=1}^{3} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{g}_i\cdot\mathbf{k}} C_{\pm}^{B}(\mathbf{k}) - M C_{\pm}^{B}(\mathbf{k}) = E_{\pm} C_{\pm}^{B}(\mathbf{k}). \quad (10.3)$$

أو يمكن كتابة المعادلتين (9.3) و (10.3) بشكل مكافئ من خلال تعويض العبارة التالية:

$$\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\mathbf{g}_i\cdot\mathbf{k}} = \cos(\mathbf{g}_i\cdot\mathbf{k}) \pm \mathrm{i}\sin(\mathbf{g}_i\cdot\mathbf{k})$$

$$t_1 \sum_{i=1}^{3} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_i\cdot\mathbf{k}} C_{\pm}^{B}(\mathbf{k}) + \left[2\,\mathrm{Re}(t_2) \sum_{i=1}^{3} \cos\left(\mathbf{g}_i\cdot\mathbf{k}\right) + 2\,\mathrm{Im}(t_2) \sum_{i=1}^{3} \sin\left(\mathbf{g}_i\cdot\mathbf{k}\right) + M \right] C_{\pm}^{A}(\mathbf{k}) = E_{\pm} C_{\pm}^{A}(\mathbf{k}), \quad (11.3)$$

$$t_1 \sum_{i=1}^{3} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta_i\cdot\mathbf{k}} C_{\pm}^{A}(\mathbf{k}) + \left[2\,\mathrm{Re}(t_2) \sum_{i=1}^{3} \cos\left(\mathbf{g}_i\cdot\mathbf{k}\right) - 2\,\mathrm{Im}(t_2) \sum_{i=1}^{3} \sin\left(\mathbf{g}_i\cdot\mathbf{k}\right) - M \right] C_{\pm}^{B}(\mathbf{k}) = E_{\pm} C_{\pm}^{B}(\mathbf{k}). \quad (12.3)$$

يمكن كتابة ذلك على شكل مصفوفة

$$\mathbf{H}(\mathbf{k})\mathbf{C}_{\pm}(\mathbf{k}) = E_{\pm}(\mathbf{k})\mathbf{C}_{\pm}(\mathbf{k}), \quad (13.3)$$

حيث الشعاع هو: $\mathbf{C}_{\pm}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \mathbf{C}_{\pm}^{A} \\ \mathbf{C}_{\pm}^{B} \end{pmatrix}$، ويعرف هاميلتوني بلوخ 2×2 كمايلي:

$$\mathbf{H}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \kappa(\mathbf{k}) + \sigma(\mathbf{k}) & \tau(\boldsymbol{k}) \\ \tau^{*}(\boldsymbol{k}) & \kappa(\mathbf{k}) - \sigma(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (14.3)$$

حيث نعرف المتغيرات داخل الهاملتوني بالشكل التالي:

$$\tau(\mathbf{k}) = t_1 \sum_{i=1}^{3} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_i\cdot\mathbf{k}}, \quad (15.3)$$

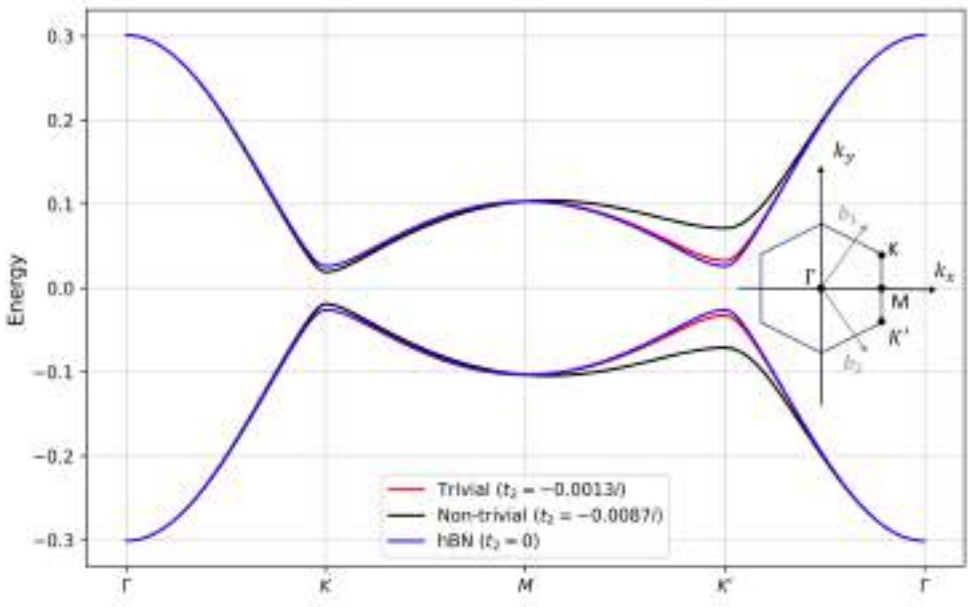
$$\kappa(\mathbf{k}) = 2\,\mathrm{Re}(t_2) \sum_{i=1}^{3} \cos\left(\mathbf{g}_i\cdot\mathbf{k}\right), \quad (16.3)$$

$$\sigma(\mathbf{k}) = M + 2\,\mathrm{Im}(t_2) \sum_{i=1}^{3} \sin\left(\mathbf{g}_i\cdot\mathbf{k}\right). \quad (17.3)$$

المعادلة (13.3) لها حلين، وتعطى طاقتا هذين الحلين كما يلي:

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \kappa(\mathbf{k}) \pm \sqrt{|\tau(\mathbf{k})|^2 + \sigma^2(\mathbf{k})}. \quad (18.3)$$

الحل ذو الطاقة الأصغر يقابل نطاق التكافؤ (−)، بينما الحل ذو الطاقة الأكبر يقابل نطاق التوصيل (+).



شكل 2.3: البنية الحزمية لنموذج هالدين عند ثلاث قيم مختلفة لمعامل القفز من الرتبة الثانية t_2

تكتب الأشعة الذاتية المنظمة كالتالي:

$$\mathbf{C}_{+}^{>}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{|\mathbf{C}^{>}|^2}} \begin{pmatrix} \sigma + \mathcal{E} \\ \tau^* \end{pmatrix}$$
$$\mathbf{C}_{-}^{>}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{|\mathbf{C}^{>}|^2}} \begin{pmatrix} -\tau \\ \sigma + \mathcal{E} \end{pmatrix} \tag{19.3}$$

و

$$\mathbf{C}_{+}^{<}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{|\mathbf{C}^{<}|^2}} \begin{pmatrix} \tau \\ -\sigma + \mathcal{E} \end{pmatrix}$$
$$\mathbf{C}_{-}^{<}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{|\mathbf{C}^{<}|^2}} \begin{pmatrix} \sigma - \mathcal{E} \\ \tau^* \end{pmatrix} \tag{20.3}$$

حيث:

$$|\mathbf{C}^{>}|^2 = 2\,\mathcal{E}(\sigma + \mathcal{E})$$
$$|\mathbf{C}^{<}|^2 = 2\,\mathcal{E}(-\sigma + \mathcal{E}) \tag{21.3}$$

$$\mathcal{E} = \sqrt{|\tau(\mathbf{k})|^2 + \sigma^2(\mathbf{k})} \tag{22.3}$$

حيث نستخدم $\mathbf{C}_{\pm}^{>}$ عندما تكون $\sigma > 0$، و $\mathbf{C}_{\pm}^{<}$ عندما تكون $\sigma < 0$. ويعد هذا التمييز القائم على إشارة σ مناسبا للتعامل عددياً في حالة $\tau \to 0$.

3.3 إقتران شبكة هالدين بحقل الليزر في تقريب ثنائي القطب

بعد الحصول على البنية الطاقوية والحالات الذاتية لنموذج هالدين في الفضاء $(\mathbf{k})$، ننتقل الآن إلى دراسة استجابة النظام تحت تأثير حقل كهرومغناطيسي خارجي. يتم ذلك بإدخال الحقل الليزري ضمن الهاملتوني باستخدام تقريب ثنائي القطب dipole approximation، مما يسمح بدراسة الديناميك الإلكتروني وتوليد التوافقيات العليا في المادة [27,26] .

في إطار تقريب ثنائي القطب، يتم إدخال تأثير الحقل الليزري عبر تعويض شعاع الموجة كما يلي: $\mathbf{k} \to \mathbf{k} + \mathbf{A}(t),$ حيث $\mathbf{A}(t)$ هو الكمون الشعاعي. يصبح الهاملتوني متعلق بالزمن من خلال التحويل:

$$\mathbf{H}(\mathbf{k}, t) = \mathbf{H}(\mathbf{k} + \mathbf{A}(t)). \tag{23.3}$$

بالاعتماد على الصيغة المستنتجة سابقًا لنموذج هالدين نكتب:

$$\mathbf{H}(\mathbf{k}, t) = \begin{pmatrix} \kappa(\mathbf{k}(t)) + \sigma(\mathbf{k}(t)) & \tau(\mathbf{k}(t)) \\ \tau^*(\mathbf{k}(t)) & \kappa(\mathbf{k}(t)) - \sigma(\mathbf{k}(t)) \end{pmatrix}. \tag{24.3}$$

نبحث عن الحل على شكل سبينور زمني:

$$\mathbf{C}(\mathbf{k}, t) = \begin{pmatrix} C_A(\mathbf{k}, t) \\ C_B(\mathbf{k}, t) \end{pmatrix}, \tag{25.3}$$

والذي يخضع لمعادلة شرودينغر المتعلقة بالزمن:

$$\mathrm{i}\,\partial_t \mathbf{C}(\mathbf{k}, t) = \mathbf{H}(\mathbf{k}, t)\mathbf{C}(\mathbf{k}, t). \tag{26.3}$$

بفرض الشرط الابتدائي $(\mathbf{C}(\mathbf{k}, 0) = \mathbf{C}_{-}(\mathbf{k}))$، يمكن تتبع تطور الحالة الإلكترونية تحت تأثير الحقل الليزري.

تُعَرَّف السرعة اللحظية في الفضاء $\mathbf{k}$ كما يلي:

$$v(\mathbf{k}, t) = \mathbf{C}^{\dagger}(\mathbf{k}, t)\, \nabla_{\mathbf{k}} \mathbf{H}(\mathbf{k}(t))\, \mathbf{C}(\mathbf{k}, t). \tag{27.3}$$

عد ذلك، نقوم بإجراء تكامل على $\mathbf{k}$ ضمن منطقة بريلوان الأولى من أجل جمع مساهمات جميع الإلكترونات المختلفة.

$$v(t) = \frac{V_{cell}}{(2\pi)^2} \int_{\mathrm{BZ}} \mathrm{d}^2\mathbf{k}\, v(\mathbf{k}, t) \tag{28.3}$$

أخيرًا، يمكن الحصول على أطياف توليد التوافقيات العالية (HHG) من خلال تطبيق تحويل فوريه على على التسارع الإلكتروني، حيث يعرف التسارع الإلكتروني على أنه المشتقة الزمنية للسرعة:

$$a(t) = \frac{d}{dt}v(t).$$

4.3 تطبيق نموذج هالدين على نيتريد البورون السداسي (hBN)

من أجل الانتقال من النموذج النظري العام إلى نظام فيزيائي واقعي، يتم تطبيق نموذج هالدين على مادة نيتريد البورون السداسي (hBN) ، التي تمتاز ببنية سداسية ثنائية الأبعاد مشابهة للغرافين، لكنها تختلف عنه بوجود ذرتين مختلفتين (BوA) في الشبكتين الفرعيتين . يؤدي هذا الاختلاف إلى كسر تناظر الشبكتين الفرعيتين، مما يُترجَم ضمن إطار نموذج الربط المحكم إلى ظهور حد كمون موضعي M يفتح فجوة طاقوية في البنية الإلكترونية [29--31].

ضمن هذا السياق، يمكن اعتبار الهاملتوني المبني سابقًا (1.3) كنموذج فعال (effective model) لوصف الإلكترونات في شبكة سداسية غير متماثلة تمثل بنية hBN . حيث تمثل معاملات القفز بين أقرب الجيران t_1 الحركة الإلكترونية بين المواقع المجاورة، بينما يمثل الحد M عدم التكافؤ بين الشبكتين الفرعيتين الناتج عن اختلاف الذرتين A و B ، وهو المسؤول عن فتح فجوة طاقوية في البنية الإلكترونية.

في هذه الدراسة يتم إهمال انتقالات الجيران من الدرجة الثانية ذات الطور العقدي، وذلك بأخذ: $t_2 = 0,$

وبالتالي يتم إهمال التأثيرات الطوبولوجية المرتبطة بكسر تناظر انعكاس الزمن، والتركيز فقط على تأثير عدم تناظر الشبكتين الفرعيتين ودوره في ديناميك الإلكترونات وتوليد التوافقيات العالية.

وبالتالي، فإن النظام المدروس يمثل شبكة سداسية غير متماثلة تصف بنية hBN ضمن تقريب الربط المحكم، حيث يكون عدم تناظر الشبكتين الفرعيتين هو العامل الأساسي المسؤول عن فتح الفجوة الطاقوية. يسمح هذا النموذج بدراسة الخصائص الحزمية (band structure) والاستجابة الإلكترونية غير الخطية للمادة تحت تأثير الحقول الليزرية القوية، خاصة ظاهرة توليد التوافقيات العالية [29--31].

في هذه الحالة، يصبح هاميلتوني بلوخ للنظام على الشكل:

$$\mathbf{H}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} M & \tau(\mathbf{k}) \\ \tau^*(\mathbf{k}) & -M \end{pmatrix}, \tag{29.3}$$

حيث يُعطى الحد غير القطري بالعلاقة:

$$\tau(\mathbf{k}) = t_1 \sum_{i=1}^{3} \mathrm{e}^{i\boldsymbol{\delta}_i \cdot \mathbf{k}}. \tag{30.3}$$

ومن ثم تصبح القيم الذاتية للطاقة:

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm\sqrt{|\tau(\mathbf{k})|^2 + M^2}. \tag{31.3}$$

ويمثل الحل E_- نطاق التكافؤ، بينما يمثل الحل E_+ نطاق التوصيل.
أما الأشعة الذاتية المنظمة المقابلة للقيم الذاتية $E_{\pm}(\mathbf{k})$، فتكتب على الشكل:

$$\mathbf{C}_+(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2\mathcal{E}(\mathcal{E}+M)}} \begin{pmatrix} \mathcal{E}+M \\ \tau^*(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \tag{32.3}$$

$$\mathbf{C}_-(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2\mathcal{E}(\mathcal{E}+M)}} \begin{pmatrix} -\tau(\mathbf{k}) \\ \mathcal{E}+M \end{pmatrix}, \tag{33.3}$$

حيث:

$$\mathcal{E} = \sqrt{|\tau(\mathbf{k})|^2 + M^2}. \tag{34.3}$$

تمثل هذه الحالات الذاتية أساس الدراسة الديناميكية للنظام تحت تأثير الحقول الليزرية القوية، حيث يتم استعمالها كشرط ابتدائي لحل معادلة شرودنغر المتعلقة بالزمن.

5.3 إقتران شبكة hBN بحقل ليزري قوي

لدراسة استجابة النظام تحت تأثير الحقول القوية، يتم تطبيق حقل ليزري خارجي ضمن تقريب ثنائي القطب (dipole approximation)، حيث يتم تضمين تأثير الحقل عبر تعويض متجه الموجة وفق مبدأ الارتباط الأدنى:

$$\mathbf{k} \to \mathbf{k} + \mathbf{A}(t), \tag{35.3}$$

حيث تمثل $\mathbf{A}(t)$ الكمون الشعاعي المرتبط بالحقل الليزري. يكتب الكمون الشعاعي للحقل الليزري على الشكل:

$$\mathbf{A}(t) = A_0 \sin(\omega_0 t) \sin^2\left(\frac{\omega_0 t}{2N_c}\right) \tag{36.3}$$

حيث تمثل A_0 شدة الحقل الليزري، و ω_0 التردد الأساسي، بينما يمثل N_c عدد الدورات الضوئية للنبضة.

وبالتالي يصبح هاميلتوني النظام متعلقًا بالزمن:

$$\mathbf{H}(\mathbf{k}, t) = \mathbf{H}(\mathbf{k} + \mathbf{A}(t)). \tag{37.3}$$

يخضع تطور الحالة الإلكترونية لمعادلة شرودنغر المتعلقة بالزمن:

$$\mathrm{i}\,\partial_t \mathbf{C}(\mathbf{k}, t) = \mathbf{H}(\mathbf{k}, t)\mathbf{C}(\mathbf{k}, t), \tag{38.3}$$

حيث يكتب السبينور الزمني على الشكل:

$$\mathbf{C}(\mathbf{k}, t) = \begin{pmatrix} C_A(\mathbf{k}, t) \\ C_B(\mathbf{k}, t) \end{pmatrix}. \tag{39.3}$$

في بداية التفاعل مع الحقل الليزري، يفترض أن الإلكترونات تشغل نطاق التكافؤ، وبالتالي يؤخذ الشرط الابتدائي:

$$\mathbf{C}(\mathbf{k}, 0) = \mathbf{C}_-(\mathbf{k}). \tag{40.3}$$

ومن ثم يتم حساب السرعة الكلية عبر التكامل على منطقة بريلوان الأولى:

$$v(t) = \frac{V_{\text{cell}}}{(2\pi)^2} \int_{\text{BZ}} d^2\mathbf{k}\, v(\mathbf{k}, t). \tag{41.3}$$

حيث:

$$v(\mathbf{k}, t) = \mathbf{C}^\dagger(\mathbf{k}, t)\, \nabla_{\mathbf{k}} \mathbf{H}(\mathbf{k}(t))\, \mathbf{C}(\mathbf{k}, t). \tag{42.3}$$

أخيرًا، يتم استخراج أطياف التوافقيات العالية من خلال تطبيق تحويل فوريه على التسارع الإلكتروني.

6.3 خلاصة

في هذا الفصل تم تقديم نموذج هالدين كإطار نظري لدراسة ديناميك الإلكترونات في الأنظمة ثنائية البعد والخصائص الطوبولوجية المرتبطة بها. انطلاقًا من هاملتوني الربط المحكم في الفضاء الحقيقي، تم الانتقال إلى فضاء بلوخ واستخراج البنية الطاقوية والحالات الذاتية للنظام.

بعد ذلك، تمت دراسة اقتران النظام بحقل ليزري قوي ضمن تقريب ثنائي القطب، مما أتاح صياغة معادلة شرودنغر المتعلقة بالزمن ووصف التطور الديناميكي للإلكترونات تحت تأثير الحقل الكهرومغناطيسي الخارجي. كما تم تقديم الإطار النظري اللازم لدراسة ظاهرة توليد التوافقيات العالية في المواد ثنائية البعد. وفي الجزء الأخير من الفصل، تم تطبيق النموذج على مادة نيتريد البورون السداسي (hBN) ، مع إهمال انتقالات الجيران من الدرجة الثانية ذات الطور العقدي $(t_2 = 0)$، من أجل التركيز على تأثير عدم تناظر الشبكتين الفرعيتين ودوره في فتح الفجوة الطاقوية والاستجابة الإلكترونية غير الخطية للمادة.

ستمثل هذه النتائج النظرية الأساس للدراسة العددية وتحليل أطياف التوافقيات العالية التي سيتم عرضها ومناقشتها في الفصل الموالي.

الفصل الرابع:

النتائج ومناقشة النتائج

الفصل 4
النتائج والمناقشة

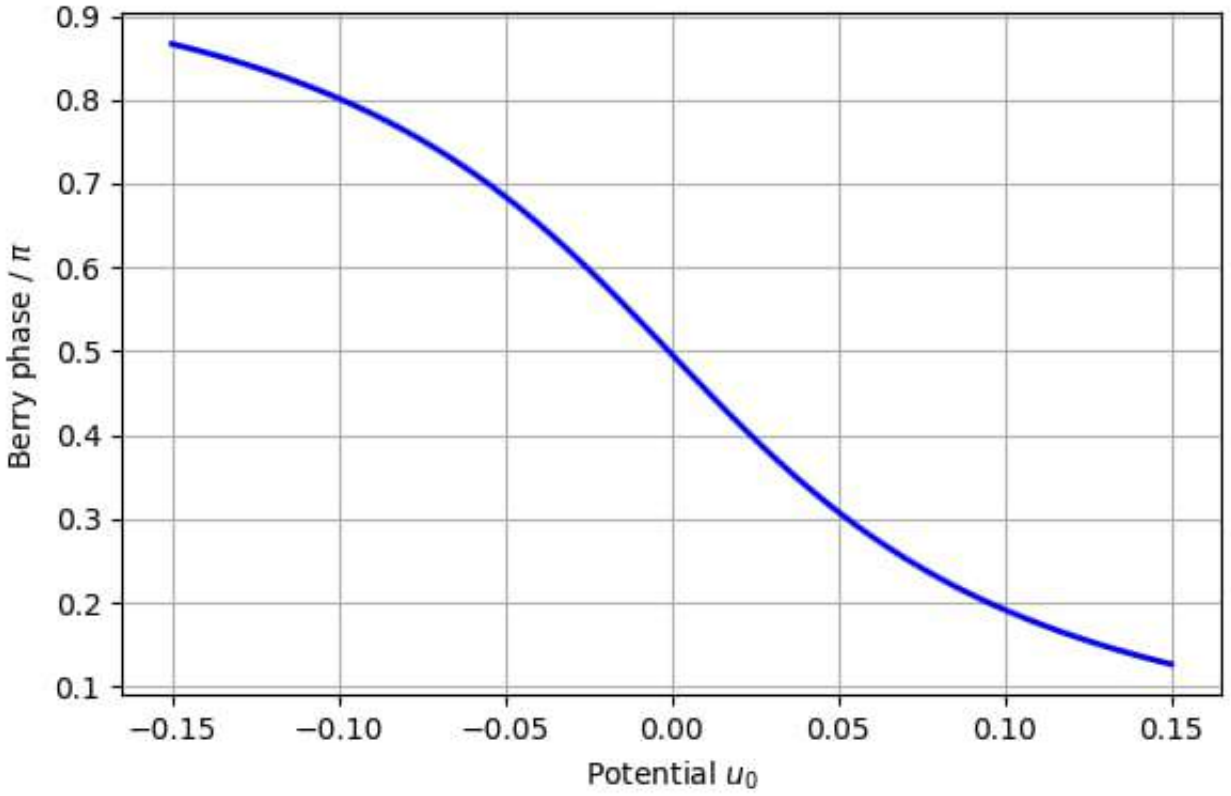
1.4 تمهيد

يُخصَّص هذا الفصل لعرض ومناقشة النتائج النهائية المتحصل عليها في هذا العمل، من خلال تقديم قراءة شاملة للسلوك الفيزيائي للنظام المدروس. ويهدف إلى تقييم مختلف النتائج العددية وربطها بالإطار النظري الذي تم تطويره في الفصول السابقة، من أجل استخلاص الصورة العامة التي تحكم استجابة النظام تحت تأثير الحقول الخارجية.

2.4 مناقشة نتائج التطبيق في بعد واحد

طور بيري

بهدف دراسة الخصائص الهندسية للحالات الإلكترونية في نموذج رايس-ميلي، قمنا بحساب طور بيري عددياً من خلال تكامل اتصال بيري على منطقة بريلوين الأولى. وقد أُنجز هذا الحساب لعدة قيم من الكمون الموضعي داخل الخلية u_0، وذلك من أجل تتبع تأثير كسر تناظر الانعكاس على تطور الطور الهندسي للنظام [28,14].



شكل 1.4: طور بيري γ/π كدالة في الكمون الموضعي u_0 لنموذج رايس-ميلي (Rice-Mele).

يبين الشكل 1.4 التطور العددي لطور بيري بدلالة الكمون الموضعي u_0. نلاحظ أن طور بيري يتغير بصورة سلسة وشبه خطية مع تغير الكمون الموضعي، مما يدل على غياب انتقال طوبولوجي حاد ضمن المجال المدروس من القيم.

ويعكس هذا التغير التدريجي في الطور الهندسي حدوث تعديل مستمر في الترابط بين الحزم (interband coherence)، والذي يتحكم في تراكم الطور أثناء ديناميكيات الإلكترون-الفجوة، ويؤثر بشكل مباشر على عملية انبعاث التوافقيات العالية [33,28,14]. كما يشير هذا السلوك إلى أن كسر تناظر الانعكاس في نموذج رايس-ميلي يؤدي إلى تغير متواصل في الخصائص الهندسية للحالات الإلكترونية دون إغلاق فجوة الطاقة، وهو ما يفسر غياب انتقال طوبولوجي فجائي ضمن المجال المدروس [25,7].

طيف التوافقيات العالية

تم حساب أطياف التوافقيات العالية (HHG) لنموذج رايس–ميلي أحادي البعد تحت تأثير حقل ليزري مستقطب خطيًا. وخلال جميع الحسابات العددية، تم تثبيت معاملات الحقل الليزري، حيث استُخدمت سعة حقل A_0 وتردد $\omega = 0.0075$، مع نبضة ليزرية ذات غلاف زمني تمتد على $n_{\text{cyc}} = 5$ دورات ضوئية [33,26].

بالنسبة لمعاملات نموذج الربط المحكم، فقد تم اختيار

$$v_0 = -0.1827, \qquad w_0 = -0.1003,$$

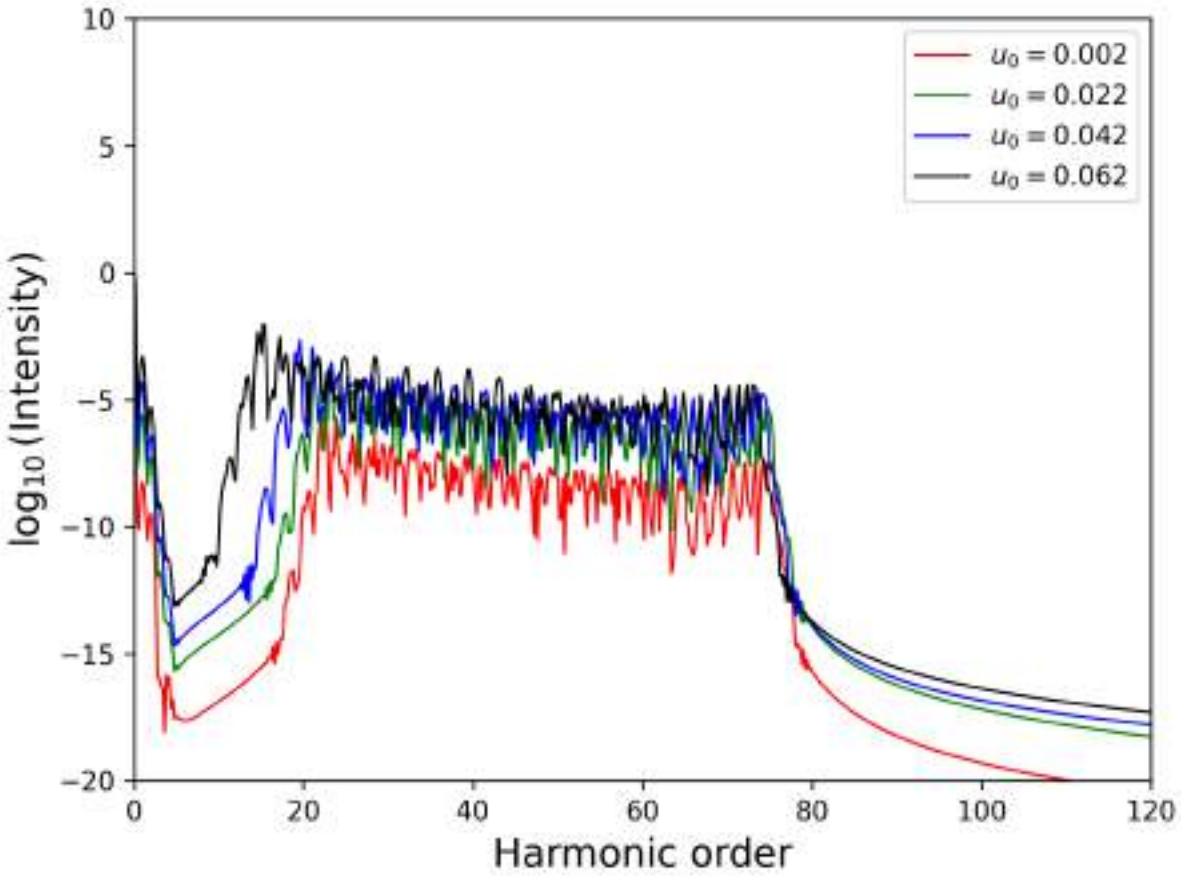
بينما تم تغيير الكمون الموضعي داخل الخلية u_0 ضمن المجال

$$u_0 \in [0.022,\ 0.028],$$

بهدف دراسة تأثيره على الاستجابة غير الخطية للنظام.

ولضمان دقة النتائج العددية، تم تقسيم منطقة بريلوين الأولى إلى شبكة منتظمة تحتوي على $N_k = 50$ نقطة في فضاء شعاع الموجة، كما استُعملت الوحدات الذرية في جميع الحسابات.

تُظهر النتائج الممثلة في الشكل 2.4ا أن طيف التوافقيات العالية يتأثر بشكل واضح بتغير الكمون الموضعي u_0، مما يدل على الدور المهم الذي تلعبه البنية الإلكترونية وكسر تناظر الانعكاس في تحديد خصائص الإشعاع التوافقي المنبعث [37,36].



شكل 2.4: أطياف التوافقيات العالية HHG

(ا) المحسوبة انطلاقًا من السرعة الكلية للإلكترونات بعد التكامل على منطقة بريلوين الأولى $[-\pi, \pi]$، وذلك لعدة قيم من الكمون الموضعي u_0.

تُظهر النتائج أن طيف التوافقيات العالية يعتمد بشكل واضح على قيمة الكمون الموضعي u_0. فعلى الرغم من أن طاقة القطع (cutoff energy) تبقى شبه ثابتة، مما يشير إلى أن التحكم الأساسي فيها يعود إلى الحقل الليزري وتشتت الحزم الطاقية [35,33,26]، إلا أن شدة التوافقيات تزداد بشكل ملحوظ مع زيادة u_0.

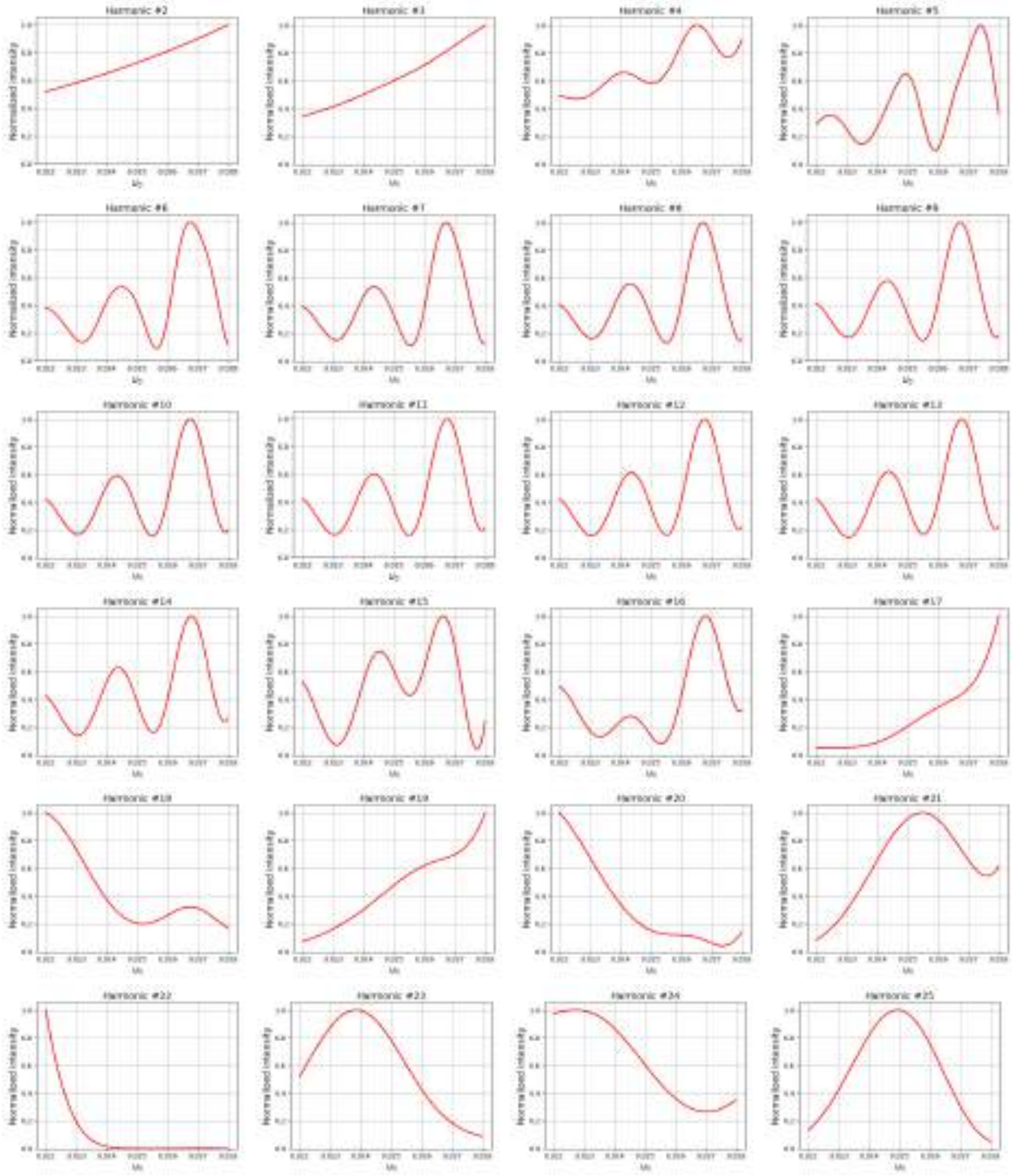
يعكس هذا السلوك الدور الذي يلعبه كسر تناظر الانعكاس في نموذج رايس-ميلي، حيث يؤدي إلى تعزيز الانتقالات ثنائية القطب بين الحزم (interband dipole transitions) وتحسين ديناميكيات الإلكترون-الفجوة [37,36]. ونتيجة لذلك، تؤدي القيم الأكبر للكمون الموضعي u_0 إلى ظهور منطقة منصة (plateau) أكثر ارتفاعًا واستقرارًا في الطيف، مما يبرز التفاعل المهم بين لا تناظر الحزم، وتأثيرات طور بيري، والانبعاث البصري غير الخطي في المواد الصلبة تحت تأثير الحقول الشديدة [33,14].

من خلال تثبيت الحقل الليزري وتغيير الكمون الموضعي u_0 فقط، يصبح بالإمكان عزل

تأثير كل من لا تناظر الحزم والطور الهندسي على عملية توليد التوافقيات العالية، كما هو موضح في الشكل 3.4. وتُظهر التوافقيات ذات الرتب المنخفضة حساسية واضحة تجاه تغير الكمون الموضعي u_0.

انطلاقًا من طيف التوافقيات العالية، نلاحظ أن زيادة u_0 تؤدي إلى تعزيز الجزء منخفض التردد من الاستجابة غير الخطية. ويظهر هذا السلوك بوضوح خاصة بالنسبة للتوافقيتين الثانية والثالثة، حيث تزداد شدتهما المعيارية بصورة شبه رتيبة مع زيادة u_0.

يمكن تفسير هذا السلوك بكون التوافقيات منخفضة الرتبة ترتبط أساسًا بتيار الحركة داخل الحزمة (intraband current). ففي تقريب الحزمتين، تنتج هذه التوافقيات عن التذبذب غير الخطي لسرعة الإلكترونات داخل الحزمة الطاقية تحت تأثير الحقل الليزري [35,33,27].



شكل 3.4: التوافقيات العالية من الرتبة 2 إلى 25 بدلالة الكمون الموضعي u_0.

يُكتب تيار الداخلي (intraband current) على الشكل [35,33]:

$$j_{\text{intra}}(t) = -e \sum_k \Big[f_+(k,t)\, v_+(k + A(t)) + f_-(k,t)\, v_-(k + A(t)) \Big],$$

حيث تمثل $f_\pm(k,t)$ الإشغال الزمني لكل من حزمة التوصيل (+) وحزمة التكافؤ (−)،

على التوالي، بينما تُعطى سرعات الحزم بالعلاقة:

$$v_{\pm}(k) = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E_{\pm}(k)}{\partial k}.$$

وبالتالي فإن التوافقيات منخفضة الرتبة ترتبط مباشرة بالتذبذب غير الخطي لسرعة الإلكترونات داخل الحزمة. كما أن المعامل u_0 يقوم بتعديل بنية الحزم الطاقية وكسر تناظر الانعكاس، مما يؤدي إلى زيادة لا تناظر حركة الإلكترونات مع ازدياد قيمته. ونتيجة لذلك، تزداد لاخطية التيار داخل الحزمة، وهو ما يفسر تعزيز التوافقيتين الثانية والثالثة H2 و H3 بشكل شبه رتيب مع زيادة u_0 [33,27].

أما بالنسبة للتوافقيات من H4 إلى ،H7 فإن السلوك لم يعد رتيبًا، إذ تقع هذه التوافقيات في منطقة انتقالية تتداخل فيها كل من المساهمات داخل الحزمة وبين الحزم. ويمكن التعبير عن شدة الانبعاث بشكل تقريبي على النحو:

$$I_N \propto \left| j_{\text{intra}}^{(N)} + j_{\text{inter}}^{(N)} \right|^2.$$

وبالتالي فإن التداخل البنّاء والهدّام بين هاتين المساهمتين يؤدي إلى ظهور قمم وحالات انخفاض في الشدة بدلالة u_0 [37,36].

تؤكد أطياف التوافقيات في الشكل 2.4ا هذا التفسير، حيث يكون العائد التوافقي ضعيفًا عند القيم الصغيرة لـ u_0، ثم يزداد مع زيادته، مما يدل على أن التيار غير الخطي يتعزز بفعل الكمون الموضعي. وعليه، فإن التوافقيات منخفضة الرتبة تعكس بشكل أساسي تعديل حركة الإلكترونات داخل الحزمة وكسر التناظر.

أما عند التوافقيات العالية، فإن الاعتماد على u_0 يصبح أكثر تعقيدًا. فبخلاف H2 و H3 اللتين تزدادان بشكل شبه رتيب، تُظهر التوافقيات الأعلى سلوكًا غير رتيب يتضمن قممًا وقيعانًا واضحة، مما يشير إلى أن آلية توليدها لا تعتمد فقط على كسر التناظر، بل أيضًا على ديناميكيات بين الحزم حساسة للطور [28,25].

كما يُلاحظ في الشكل 3.4، بالنسبة للتوافقيات من H8 إلى H16 ، تظهر شدة عظمى واضحة قرب

$$u_0 \simeq 0.0265,$$

مما يشير إلى أن هذه القيمة تمثل شرطًا أمثل لانبعاث التوافقيات العالية. عند هذه النقطة، تتضافر فجوة الطاقة، وعزم الانتقال، والطور المتراكم للإلكترون-الفجوة بطريقة تجعل عملية إعادة الاتحاد أكثر كفاءة [33,1]. ويمكن كتابة الشدة بشكل تقريبي:

$$I_N(u_0) \propto \left| j_{\text{intra}}^{(N)}(u_0) + j_{\text{inter}}^{(N)}(u_0) \right|^2.$$

بالنسبة للتوافقيات الأعلى، تصبح المساهمة بين الحزم هي المهيمنة. لذلك فإن تغييرات صغيرة في u_0 تؤدي إلى تغيّر الطور النسبي بين التيارين داخل الحزمة وبين الحزم، مما ينتج عنه تداخل بنّاء عند بعض القيم وتداخل هدّام عند قيم أخرى [37,36].

كما يُظهر سلوك H17 وH18 وH20 اختلافًا إضافيًا في آلية الانبعاث، إذ تزداد H17 بشكل واضح مع u_0، بينما تكون H18 وH20 أقوى عند القيم الصغيرة وتتراجع مع ازدياده، مما يدل على أن كل رتبة توافقية ترتبط بمساهمات صادرة من مناطق مختلفة في فضاء شعاع الموجة، وتستجيب بصورة مختلفة لبنية الحزم الطاقية.

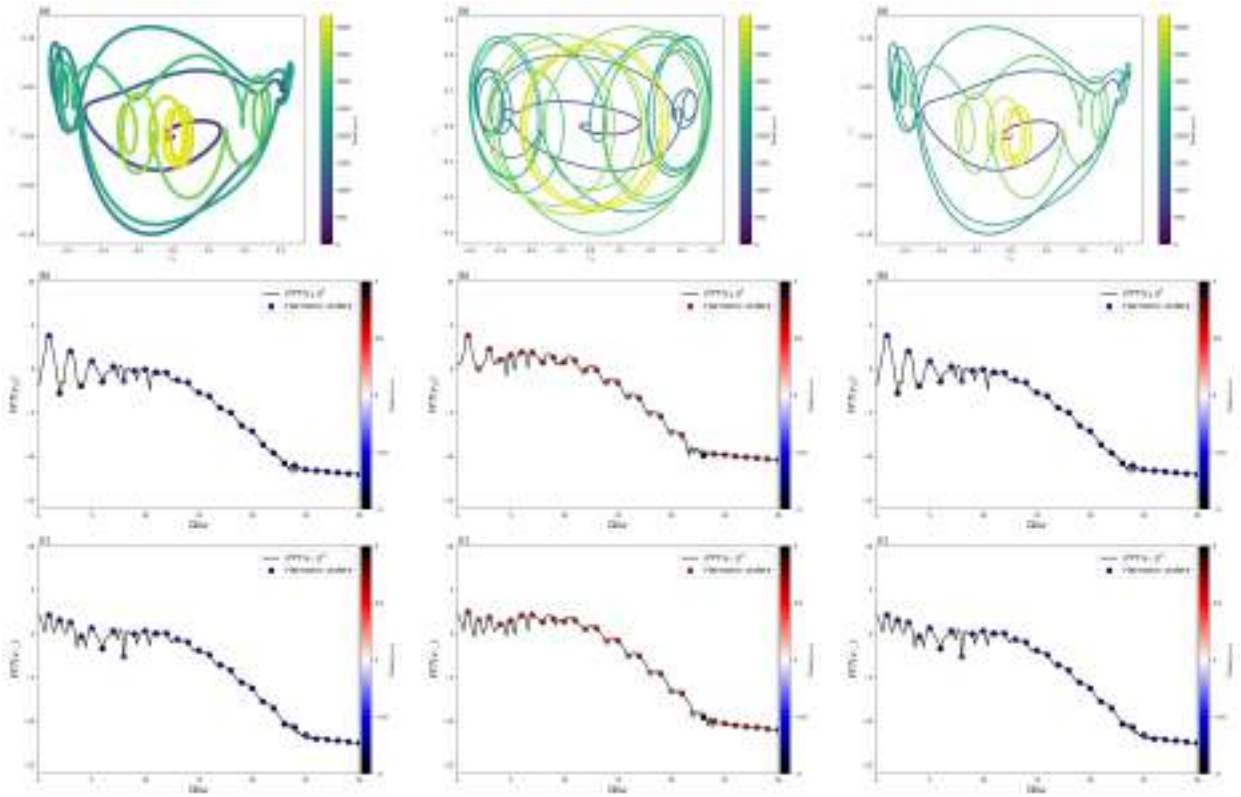
تُظهر هذه النتائج أن استجابة التوافقيات العالية في نموذج رايس–ميلي تعتمد بقوة على رتبة التوافقية، حيث لا يؤدي الكمون u_0 فقط إلى زيادة أو نقصان الشدة، بل يعيد توزيع الطاقة الطيفية عبر الرتب المختلفة من خلال تعديل فجوة الطاقة، واتصال بيري، وعزم الانتقال، والطور بين الحزم [28,14].

وأخيرًا، يكشف سلوك التوافقيات من H21 إلى H25 عن مجال تصبح فيه ديناميكيات الطور أكثر تأثيرًا، حيث لم تعد جميع الرتب تشترك في نفس القيمة المثلى لـ u_0. فالتوافقيات H21 وH23 وH25 تُظهر سلوكًا على شكل قمة عند قيم مختلفة من u_0، بينما تُظهر H22 إخمادًا شبه كامل عند $u_0 \simeq 0.024$, في حين تتناقص H24 بشكل شبه رتيب.

تشير هذه النتائج إلى أن آلية توليد التوافقيات في هذا المجال تعتمد بشكل أساسي على الانتقالات بين الحزم، حيث تصبح لكل رتبة توافقية منطقة مميزة في فضاء بريلوين وقيمة مثلى للكمون الموضعي تتحقق عندها أعلى استجابة توافقية. وبشكل عام، يعمل u_0 ليس فقط كمعامل لكسر التناظر، بل أيضًا كمعامل تحكم يعيد توزيع شدة التوافقيات عبر آليات تعتمد على الطور والتداخل الكمومي [38,28,14].

3.4 مناقشة نتائج التطبيق في بعدين

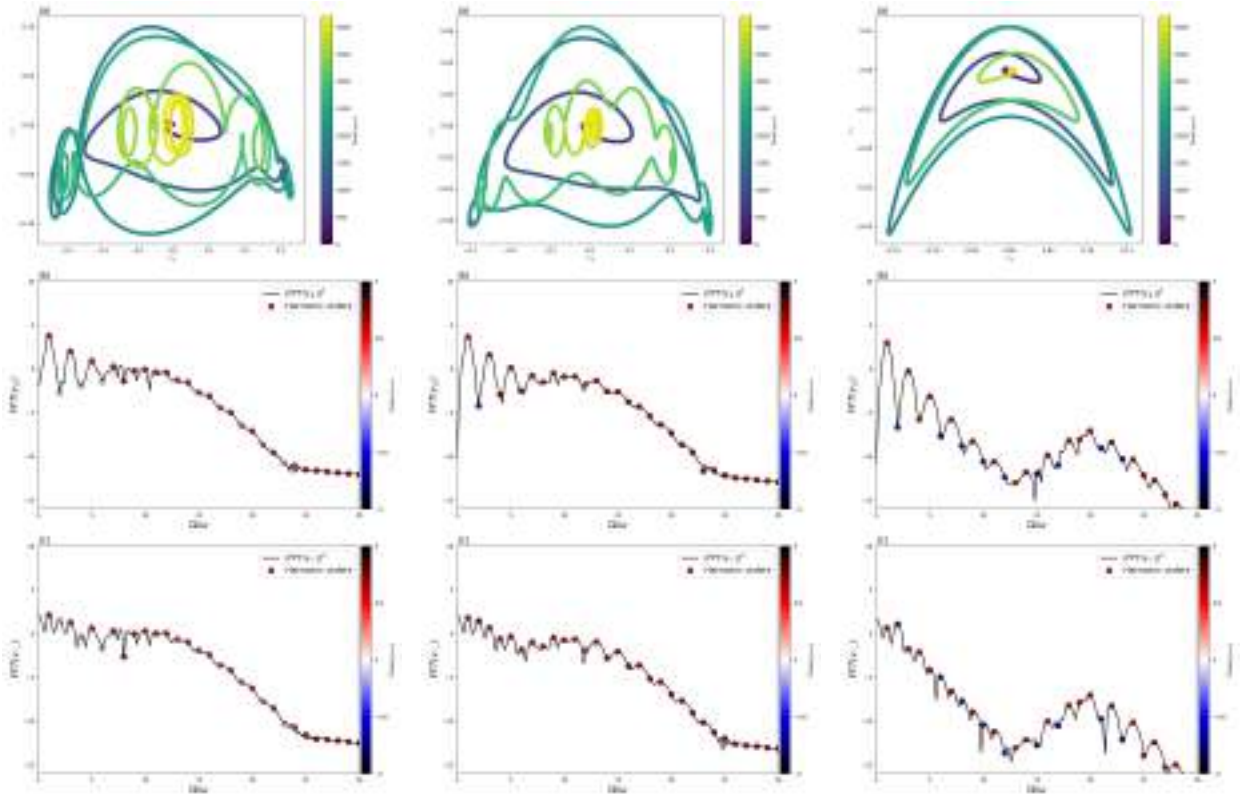
ديناميكيات مسارات الإلكترونات في فضاء k



(a) hBN-like (b) Non-trivial (c) Trivial

شكل 4.4: المسارات وأطياف توليد التوافقيات العالية HHG

(ا) لكل من المركبتين الموازية والعمودية عند النقطة K لثلاث حالات: a--hBN-like ($t_2 = 0$), b--Non-trivial ($t_2 = -0.0087\,i$), c--Trivial ($t_2 = -0.0013\,i$).



(a) hBN-like (b) Non-trivial (c) Trivial

شكل 6.4: المسارات وأطياف توليد التوافقيات العالية HHG

(ا) لكل من المركبتين الموازية والعمودية عند النقطة K' لثلاث حالات: a--hBN-like ($t_2 = 0$), b--Non-trivial ($t_2 = -0.0087\,i$), c--Trivial ($t_2 = -0.0013\,i$).

يبين الشكلان 5.4ا و 7.4ا مسارات الإلكترونات وأطياف توليد التوافقيات العالية (HHG) عند النقطتين K وK' للحالات الثلاث: الحالة الشبيهة بـ hBN، والحالة غير البديهية (Non-trivial) ، والحالة البديهية(Trivial) . كما تعرض الأشكال سلوك المركبتين المتوازية والعمودية للإشعاع التوافقي الناتج.

تكشف المحاكاة العددية لديناميكيات الإلكترونات في فضاء k عن اختلافات جوهرية بين الحالات الثلاث المدروسة: الحالة الشبيهة بـ hBN، والطور الطوبولوجي غير البديهي (Non-trivial) ، والطور البديهي (Trivial) ، وذلك عند كل من النقطتين K وK'.

تُظهر الحالة الشبيهة بـ hBN مسارات إلكترونية منتظمة وشبه مغلقة داخل منطقة بريلوان، مع عودة واضحة إلى موضع الدفع الابتدائي بعد انتهاء نبضة الليزر، مما يدل على وجود ترابط إلكتروني قوي وديناميكيات مستقرة داخل النطاق. كما تعكس هذه المسارات قدرة الحوامل الإلكترونية على المحافظة على التناغم (coherence) أثناء تطورها الزمني تحت تأثير المجال الليزري.

في المقابل، يتميز الطور غير البديهي بمسارات أكثر تعقيدًا واتساعًا، حيث تظهر حركة

دورانية واضحة في فضاء k، وهو ما يشير إلى إعادة توزيع أكبر للحوامل الإلكترونية داخل منطقة بريلوان. ويرتبط هذا السلوك بالتأثيرات الطوبولوجية للنظام، والتي تؤثر على حركة الإلكترونات وتسارعها تحت تأثير المجال الخارجي.

أما الطور البديهي، فيُظهر مسارات إلكترونية أقل انتظامًا وأكثر تشتتًا، خصوصًا عند النقطة K'، حيث تصبح العودة إلى الحالة الابتدائية أضعف بكثير، مما يدل على انخفاض الترابط الإلكتروني وضعف ديناميكيات الاصطدام العكسي[1].

ومن الملاحظات المهمة كذلك أن اتجاه الدوران في المسارات الإلكترونية ينعكس بين النقطتين K وK'، وهو ما يعكس تأثير التناظر بين النقطتين K وK' على ديناميكيات الحوامل الإلكترونية داخل المادة.

كما تُظهر الخرائط اللونية المرافقة للمسارات تغيرًا مستمرًا في الطاقة أثناء الحركة الإلكترونية، حيث ترتبط المناطق ذات الألوان الفاتحة بطاقات أعلى مقارنة بالمناطق الداكنة، مما يدل على اكتساب الإلكترونات لطاقات مختلفة أثناء تطورها الزمني داخل الحزم الإلكترونية.

تحليل الطور وسلوك انعكاس الطور

يكشف تحليل الطور للتوافقيات العالية عن اختلافات واضحة بين الحالات الثلاث، سواء من حيث انتظام تغير الطور أو من حيث ظهور انعكاسات طورية عند رتب توافقية معينة.

في حالة hBN، يتغير الطور بصورة سلسة ومنتظمة مع زيادة رتبة التوافقية، وهو ما يدل على استجابة لاخطية مستقرة وترابط إلكتروني قوي أثناء عملية الانبعاث التوافقي.

أما في الحالة غير البديهية، فيظهر ما يعرف بانعكاس الطور، حيث تحدث تغيرات فجائية في إشارة الطور عند بعض الرتب التوافقية. ويرتبط هذا السلوك على الأرجح بالتداخل بين الإسهامات داخل النطاق (Intra-band) والإسهامات بين النطاقات (Inter-band) ، إضافة إلى التأثيرات المرتبطة بالبنية الطوبولوجية للنظام.

في المقابل، يكون تطور الطور في الحالة البديهية أقل انتظامًا وأكثر ضوضائية، مما يعكس ضعف الترابط الإلكتروني أثناء عملية توليد التوافقيات العالية.

كما يؤدي الانتقال بين النقطتين K وK' إلى انعكاس في سلوك الطور، وهو ما يؤكد مرة أخرى أهمية تناظر النقطتين K وK' في التحكم في الخصائص الديناميكية للتوافقيات العالية.

[1] تشير ديناميكيات الاصطدام العكسي إلى عودة الإلكترونات نحو حالاتها الابتدائية بعد التشتت تحت تأثير المجال الليزري، وهي عملية ترتبط بكفاءة توليد التوافقيات العالية.

توليد التوافقيات العالية (HHG)

شدة التوافقيات

تُظهر أطياف التوافقيات العالية اختلافات واضحة بين الحالات الثلاث المدروسة. فبشكل عام، تنخفض شدة التوافقيات تدريجيًا مع زيادة رتبة التوافقية، وهو السلوك المعتاد في ظاهرة HHG نتيجة انخفاض كفاءة الانبعاث عند الطاقات المرتفعة.

تتميز الحالة غير البديهية بأعلى شدة توافقية مقارنة بالحالتين الأخريين، مما يدل على استجابة بصرية لاخطية معززة وقدرة أكبر على تحويل طاقة المجال الليزري إلى توافقية عالية الرتبة.

أما حالة hBN فتُظهر شدة متوسطة مع تناقص طيفي منتظم نسبيًا، في حين تُظهر الحالة البديهية أضعف استجابة توافقية مع ظهور تذبذبات وعدم انتظام أكبر عند الرتب التوافقية العالية.

كما تكشف النتائج عن وجود اختلافات واضحة بين المركبتين المتوازية والعمودية للإشعاع المنبعث، حيث تكون المركبة الموازية أكثر شدة واستقرارًا مقارنة بالمركبة العمودية، والتي تبدو أكثر حساسية للتغيرات الطوبولوجية والبنية الإلكترونية للنظام.

منطقة الهضبة (Plateau)

تُظهر الحالة غير البديهية امتدادًا أكبر لمنطقة الهضبة مقارنة بالحالتين الأخريين، مما يدل على قدرة الحوامل الإلكترونية على اكتساب طاقة أكبر قبل إعادة الاتحاد.

ويعكس هذا السلوك كفاءة أعلى في ديناميكيات الاصطدام العكسي واستمرار الحركة الإلكترونية المتماسكة لفترة زمنية أطول تحت تأثير المجال الليزري.

أما في حالة hBN فتكون منطقة الهضبة متوسطة الامتداد وأكثر انتظامًا، بينما تصبح أقصر وأقل استقرارًا في الحالة البديهية، مما يشير إلى انخفاض كفاءة اكتساب الطاقة وفقدان الترابط الإلكتروني بسرعة أكبر.

طاقة القطع (Cutoff)

تتبع طاقة القطع الترتيب التالي:

Non-trivial > hBN > Trivial

ويشير ذلك إلى أن الطور غير البديهي يسمح للحوامل الإلكترونية باكتساب طاقات أعلى أثناء تسارعها تحت تأثير المجال الليزري، مما يؤدي إلى انبعاث توافقية ذات طاقات أكبر.

كما تعكس هذه النتيجة الدور المهم للبنية الإلكترونية والطوبولوجية في تحديد الحد الأقصى للطاقة الممكنة في عملية HHG .

خصائص الاستقطاب

تُظهر التوافقيات العالية اعتمادًا واضحًا على البنية الإلكترونية والطوبولوجية للنظام.

تتميز الحالة غير البديهية بظهور استقطاب دائري أو إهليلجي واضح، وهو ما يدل على وجود ديناميكيات إلكترونية غير متناظرة داخل المادة.

وفي حالة hBN تظهر خصائص استقطاب مشابهة ولكن بدرجة أضعف نسبيًا، مما يشير إلى وجود تأثير للبنية النطاقية حتى في غياب الخصائص الطوبولوجية الصريحة.

أما الحالة البديهية فتُظهر استقطابًا أضعف وأقل انتظامًا، نتيجة ضعف الترابط الإلكتروني وانخفاض فعالية الانتقالات بين الحزم.

كما يُلاحظ انعكاس اتجاه الاستقطاب بين النقطتين K وK'، وهو سلوك مرتبط مباشرة بتناظر النقطتين K وK' داخل النظام.

مناقشة مقارنة شاملة

بعد تحليل ديناميكيات الإلكترونات في فضاء k، وأطياف التوافقيات العالية، وتطور الطور، وخصائص الاستقطاب، يتضح أن الخصائص الطوبولوجية والبنية الإلكترونية للنظام تؤدي دورًا أساسيًا في تحديد طبيعة الاستجابة اللاخطية للمادة.

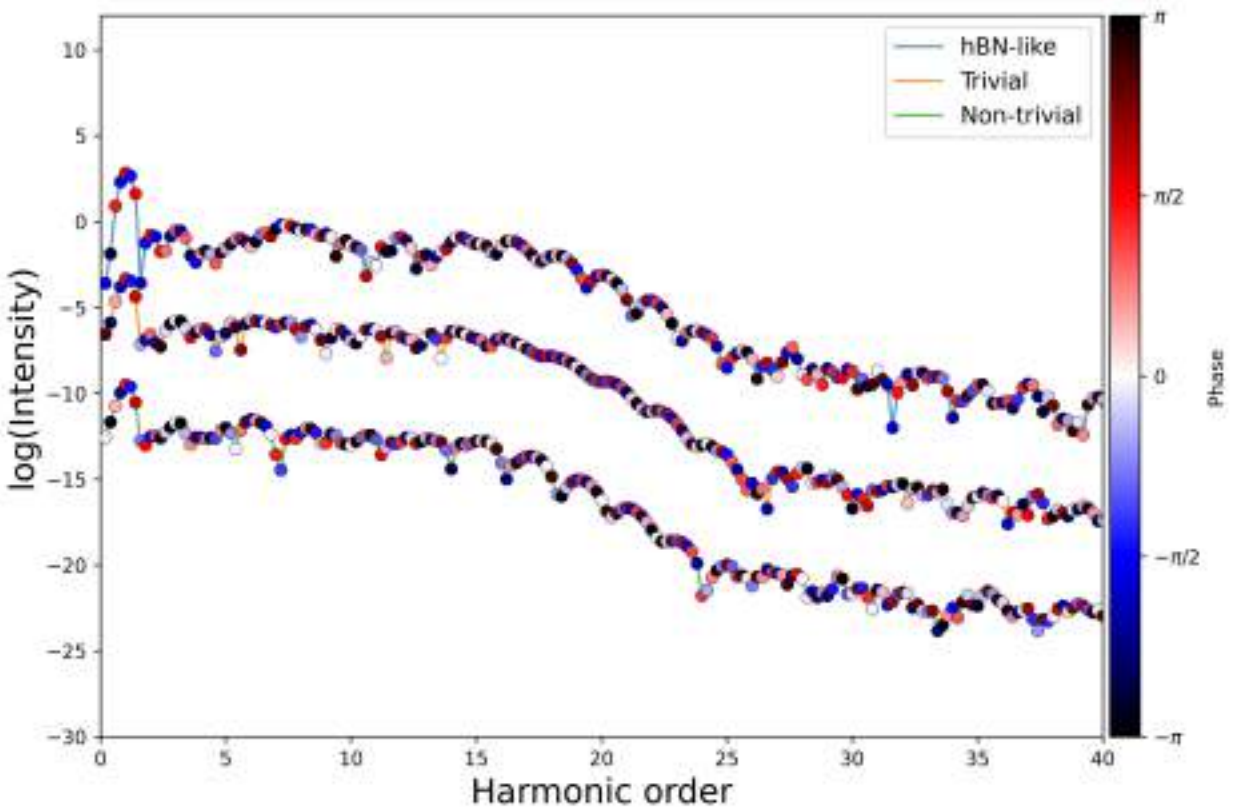
تُظهر الحالة غير البديهية أقوى استجابة لاخطية من حيث شدة التوافقيات، وامتداد منطقة الهضبة، وطاقة القطع، إضافة إلى ظهور انعكاسات طورية واضحة، مما يدل على تأثير الطوبولوجيا في تعزيز ديناميكيات الحوامل الإلكترونية.

في المقابل، تُظهر الحالة البديهية أضعف استجابة، سواء من حيث الشدة أو انتظام الطور أو استقرار المسارات الإلكترونية، وهو ما يعكس انخفاض الترابط الإلكتروني وضعف كفاءة العمليات غير الخطية داخل النظام.

أما حالة hBN فتُظهر سلوكًا وسيطًا قريبًا نسبيًا من الحالة غير البديهية، رغم غياب الخصائص الطوبولوجية الصريحة، مما يشير إلى أن هندسة النطاق والبنية الإلكترونية يمكن أن تؤديا دورًا مهمًا في تعزيز استجابة HHG حتى في الأنظمة غير الطوبولوجية.

وبالتالي، يمكن القول إن استجابة التوافقيات العالية لا تعتمد فقط على الخصائص الطوبولوجية للنظام، بل تنتج عن تأثير مشترك بين هندسة النطاق الإلكترونية، وترابط الحوامل، وتناظر النقطتين K وK'، وديناميكيات الحركة الإلكترونية تحت تأثير المجال الليزري القوي.

الطيف الكلي لتوليد التوافقيات العالية HHG



شكل 8.4: أطياف التوافقيات العالية HHG

(ا) المحسوبة انطلاقًا من السرعة الكلية للإلكترونات بعد التكامل على منطقة بريلوين الأولى $[-\pi, \pi]$.

يوضح الشكل 8.4ا تغير شدة التوافقيات العالية بدلالة رتبة التوافقيات بالنسبة للحالات الثلاث المدروسة: الحالة الشبيهة بـ hBN ، والحالة البديهية ، (Trivial) والحالة غير البديهية (الطوبولوجية) (Non-trivial) ، وقد تم تمثيل الشدة باستعمال مقياس لوغاريتمي، بينما

تمثل الألوان تغير الطور الموافق لكل توافقية.

تُظهر النتائج أن شدة التوافقيات تنخفض تدريجيًا مع زيادة رتبة التوافقية في جميع الحالات المدروسة، وهو سلوك متوقع في ظاهرة توليد التوافقيات العالية، حيث تصبح عملية توليد التوافقيات ذات الرتب المرتفعة أقل كفاءة نتيجة ضعف الترابط الإلكتروني عند الطاقات العالية.

في مجال التوافقيات منخفضة الرتبة، نلاحظ أن الحالات الثلاث تمتلك سلوكًا متقاربًا نسبيًا، مما يدل على أن الاستجابة الإلكترونية تكون خاضعة أساسًا للبنية الإلكترونية الأساسية للنظام. ومع الانتقال نحو الرتب الأعلى تبدأ الفروقات بين الأطوار المختلفة بالظهور بشكل أوضح، خاصة في المجالين المتوسط والعالي من التوافقيات.

تتميز الحالة الشبيهة بـ hBN بشدة توافقية أعلى مقارنة بالحالتين البديهية وغير البديهية، كما أن تناقص الشدة يكون أبطأ نسبيًا، مما يشير إلى فعالية أكبر في التفاعل غير الخطي بين المجال الليزري والحالات الإلكترونية للمادة. بالمقابل، تُظهر الحالة البديهية انخفاضًا أسرع في الشدة، خاصة عند الرتب التوافقية العالية، وهو ما يعكس ضعف الانتقالات الإلكترونية بين الحزم.

أما الحالة غير البديهية فتُظهر سلوكًا متوسطًا بين الحالتين السابقتين، حيث تبقى التوافقيات محافظة نسبيًا على بنيتها مع ازدياد الرتبة، مما يدل على استمرار الترابط الديناميكي للإلكترونات وتأثير الخصائص الطوبولوجية للنظام على عملية الانبعاث التوافقي.

كما يبين توزيع الألوان المرتبط بالطور وجود تغيرات طورية واضحة خصوصًا عند الرتب المنخفضة والمتوسطة، في حين تصبح التغيرات أكثر انتظامًا عند الرتب العالية. ويشير ذلك إلى أن ديناميكيات الإلكترونات تصبح أكثر تزامنًا أثناء توليد التوافقيات ذات الطاقة المرتفعة.

إضافة إلى ذلك، فإن وجود اختلافات طورية محلية وانقطاعات مفاجئة في بعض الرتب التوافقية قد يكون مرتبطًا بتغير مسارات الانتقال الإلكتروني وتأثيرات التداخل الكمي داخل المادة.

بصفة عامة، تؤكد هذه النتائج أن أطياف التوافقيات العالية حساسة بشكل كبير للحالة الإلكترونية والطوبولوجية للنظام، مما يجعل من ظاهرة توليد التوافقيات العالية أداة فعالة لدراسة الخصائص الإلكترونية والطوبولوجية للمواد الصلبة.

4.4 خلاصة

يُظهر التحليل العام للنتائج أن السلوك الفيزيائي للنظام يتأثر بشكل واضح بطبيعة البنية الإلكترونية والخصائص الطوبولوجية، إضافة إلى التفاعلات غير الخطية الناتجة عن تأثير الحقل الخارجي. كما يتبين أن الانتقال من بعد واحد إلى بعدين يؤدي إلى تعقيد أكبر في الديناميكيات الإلكترونية، ويُبرز دور تناظر الفضاء k ونقاط K وK' في تحديد خصائص الاستجابة اللاخطية.

وقد أظهرت النتائج أن مختلف الظواهر المدروسة، من ديناميكيات الحوامل الإلكترونية إلى الاستجابة التوافقية، تتكامل فيما بينها لتشكيل صورة شاملة لسلوك النظام، تعكس الترابط القوي بين البنية الإلكترونية والخواص الطوبولوجية.

وبشكل عام، تؤكد هذه الدراسة أهمية المقاربة المعتمدة في فهم الخصائص الفيزيائية للأنظمة منخفضة الأبعاد، وتبرز الدور الحاسم للأبعاد الإضافية في إثراء السلوك الديناميكي، مما يفتح المجال لمزيد من الدراسات المستقبلية في هذا الاتجاه.

الخلاصة العامة

الخلاصة العامة

يُعد توليد التوافقيات العالية في المواد الصلبة من أكثر الظواهر غير الخطية أهمية في فيزياء المادة المكثفة الحديثة، لما يوفره من إمكانية دراسة الديناميكيات الإلكترونية فائقة السرعة واستكشاف الخصائص الهندسية والطوبولوجية للمواد على مقاييس زمنية قصيرة جدًا. وفي هذا السياق، هدفت هذه الدراسة إلى تحليل تأثير البنية الإلكترونية والخصائص الطوبولوجية على عملية توليد التوافقيات العالية في أنظمة منخفضة الأبعاد، من خلال مقارنة نموذج أحادي البعد من نوع رايس-ميلي مع نموذج ثنائي البعد مستوحى من نموذج هالدين.

في الجزء الأول من هذا العمل تم عرض الأسس النظرية اللازمة لوصف ظاهرة توليد التوافقيات العالية في المواد الصلبة، مع تقديم المفاهيم المرتبطة بالبنية النطاقية، وديناميكيات الحوامل الإلكترونية، والخصائص الهندسية والطوبولوجية مثل طور بيري واتصال بيري. كما تمت مراجعة النماذج النظرية المستعملة لوصف الأنظمة منخفضة الأبعاد وآليات الانبعاث التوافقي داخل الحزمة وبين الحزم.

أما في الجانب العددي، فقد تم تطوير وتنفيذ خوارزميات حسابية لدراسة استجابة الأنظمة المدروسة تحت تأثير حقول ليزرية قوية. وقد أتاح ذلك حساب الأطياف التوافقية وتحليل ديناميكيات الإلكترونات ومتابعة تأثير مختلف المعلمات الفيزيائية على الاستجابة غير الخطية للنظام.

أظهرت نتائج نموذج رايس-ميلي أحادي البعد أن الكمون الموضعي داخل الخلية يلعب دورًا محوريًا في التحكم في الخصائص الهندسية للنظام وفي شدة التوافقيات العالية المنبعثة. وقد بينت الحسابات العددية أن طور بيري يتغير بصورة مستمرة مع تغير الكمون الموضعي، مما يعكس تطورًا تدريجيًا للخصائص الهندسية دون حدوث انتقال طوبولوجي حاد. كما تبين أن زيادة كسر تناظر الانعكاس تؤدي إلى تعزيز شدة التوافقيات، خاصة في الرتب المنخفضة، بينما تُظهر التوافقيات العليا سلوكًا أكثر تعقيدًا تحكمه تأثيرات التداخل الكمي وديناميكيات الانتقالات بين الحزم.

أما في النموذج ثنائي البعد"نموذج هالدين"، فقد كشفت الدراسة عن تأثير واضح للطور

الطوبولوجي على ديناميكيات الإلكترونات وعلى خصائص التوافقيات العالية. فقد أظهرت الحالة غير البديهية استجابة لاخطية أكثر قوة مقارنة بالحالة البديهية، سواء من حيث شدة التوافقيات أو امتداد منطقة الهضبة أو طاقة القطع. كما برزت اختلافات مهمة في سلوك الطور والاستقطاب بين الحالات المختلفة، إضافة إلى ظهور تأثيرات مرتبطة بتناظر النقطتين K وK' انعكست بوضوح على اتجاهات الحركة الإلكترونية وخصائص الإشعاع المنبعث.

ومن خلال المقارنة بين النموذجين أحادي البعد وثنائي البعد، يتضح أن زيادة البعد المكاني لا تؤدي فقط إلى تعقيد أكبر في ديناميكيات الإلكترونات، بل تكشف أيضًا عن آليات إضافية تتحكم في عملية توليد التوافقيات العالية، خاصة تلك المرتبطة بالبنية الطوبولوجية وتناظر فضاء المتجه الموجي. كما أظهرت النتائج أن الخصائص الهندسية والطوبولوجية تؤثر بصورة مباشرة في كفاءة الانبعاث التوافقي وفي إعادة توزيع الشدة الطيفية بين الرتب المختلفة.

تؤكد النتائج المتحصل عليها أن ظاهرة توليد التوافقيات العالية تمثل أداة فعالة لدراسة البنية الإلكترونية والطوبولوجية للمواد الصلبة، وأنها توفر وسيلة حساسة للكشف عن تأثيرات طور بيري والانتقالات الطوبولوجية وديناميكيات الحوامل الإلكترونية في الأنظمة منخفضة الأبعاد.

وفي ضوء هذه النتائج، يمكن اقتراح عدة آفاق مستقبلية لهذا العمل، من بينها دراسة تأثير الاستقطابات المختلفة للحقول الليزرية، وتحليل دور التآثرات الإلكترونية والحرارية، وتوسيع الدراسة إلى مواد ثنائية الأبعاد أكثر تعقيدًا ذات خصائص طوبولوجية متقدمة، إضافة إلى استكشاف إمكانية التحكم في التوافقيات العالية لأغراض تطبيقية في مجالات البصريات فائقة السرعة وتقنيات المعلومات الكمومية.

وفي الختام، تبرز هذه الدراسة الترابط العميق بين البنية الإلكترونية والخصائص الهندسية والطوبولوجية للمواد من جهة، والاستجابة البصرية غير الخطية من جهة أخرى، مما يساهم في تعزيز فهم آليات توليد التوافقيات العالية ويفتح آفاقًا جديدة لاستغلالها في دراسة وتصميم المواد الوظيفية الحديثة.

الملحق

الملحق

1. اتفاقيات بلوخ ومواقع داخل الخلية

في دراسة دوال بلوخ Bloch في الشبكات البلورية، تختلف النتائج حسب اختيار تعريف الموجة ضمن الخلية الأولية. هناك اتفاقيتodن شائعتodن ورد في [14]:

الإتفاقية الاولى : Convention I (Accounting for intracell positions)

في هذه الاتفاقية، يُؤخذ الموضع داخل الخلية τ_α بعين الاعتبار. يمكن كتابة حالة Bloch كالتالي:

$$\psi_{\boldsymbol{k}}^{(n)}(\boldsymbol{r}) = \sum_{\alpha} C_{\alpha}^{(n)}(\boldsymbol{k}) \sum_{R} e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{R}+\tau_\alpha)} \phi_\alpha(r - R - \tau_\alpha), \tag{1.}$$

حيث $\boldsymbol{R}$ هي متجهات الشبكة، وα مؤشر على المواقع داخل الخلية، وϕ_α هي الدوال الذرية الموضعية.

الإتفاقية الثانية : Convention II (Neglecting intracell positions)

في هذه الاتفاقية، يُهمل τ_α ويتم افتراضه مساويًا للصفر:

$$\psi_{\boldsymbol{k}}^{(n)}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} C_{\alpha}^{(n)}(\boldsymbol{k}) \sum_{\boldsymbol{R}} e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}} \phi_\alpha(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}), \tag{2.}$$

وهذا تبسيط شائع في الدراسات السابقة، لكنه قد يؤثر على القيم الدقيقة للتيار والسرعة، إذ تصبح العلاقة مع $\nabla_{\boldsymbol{k}}\mathbf{H}(\boldsymbol{k})$ أقل مباشرة.

مقارنة موجزة

- Convention I: أدق، يأخذ بعين الاعتبار الموضع داخل الخلية، مناسب لحساب التيارات والخصائص الهندسية مثل الطور الهندسي (Berry phase).

- Convention II: أبسط، يهمل الإزاحة داخل الخلية، مناسب لبعض التحليلات الأولية، لكنه قد يؤدي إلى أخطاء في بعض الكميات الدقيقة مثل current operator أو توليد high harmonics.

المصدر:
Vanderbilt, D., *Berry Phases in Electronic Structure Theory*, Cambridge University Press, 2018, Sec. 2.2.3.

2. طور بيري واتفاقيات بلوخ

نكتب النتيجة (2.2) كالتالي

$$\gamma_{\pm} = \frac{\mathrm{i}}{4} \ln \left(\frac{s(\boldsymbol{k})}{s^*(\boldsymbol{k})} \right) \Bigg|_{-\pi/a}^{\pi/a}$$

عند إعتبار الاتفاقية الثانية لبلوخ يكون :

$$s(\boldsymbol{k}) = v + w^* e^{\mathrm{i}a\boldsymbol{k}}$$

يُؤدي كتابة الدالة العقدية $s(\boldsymbol{k})$ على الشكل:

$$s(\mathbf{k}) = r(\boldsymbol{k}) e^{\mathrm{i}\phi(\boldsymbol{k})}$$

إلى:

$$\gamma_{\pm} = \frac{\mathrm{i}}{4} \ln e^{2\mathrm{i}\phi(\boldsymbol{k})} \Bigg|_{-\pi/a}^{\pi/a} = -\frac{1}{2}\phi(\boldsymbol{k}) \Bigg|_{-\pi/a}^{\pi/a}$$

نفترض ، من أجل التبسيط، أن معاملي القفز v و w حقيقيان وموجبان. عندما يتغير شعاع الموجة $\boldsymbol{k}$ من $-\pi/a$ إلى π/a ، فإن الدالة العقدية $s(\boldsymbol{k})$ تُرسم مسارًا دائريًا في المستوى العقدي نصف قطره w، ومزاحًا بمقدار v على المحور الحقيقي. وبشكل خاص نجد أن:

$$s(\pi/a) = s(-\pi/a) = v - w \in \mathbb{R}.$$

يعتمد سلوك طور بيري على ما إذا كان هذا المسار يحيط بالمبدأ في المستوى العقدي أم لا. فإذا كان $v > w$، فإن المسار لا يلف حول الأصل، وتكون زاوية الطور ثابتة عند حدود منطقة بريلوان، أي:

$$\phi(\pi/a) = \phi(-\pi/a) = 0,$$

وبالتالي يكون طور بيري معدوماً، وهو ما يوافق طورًا طوبولوجيًا تافهًا.

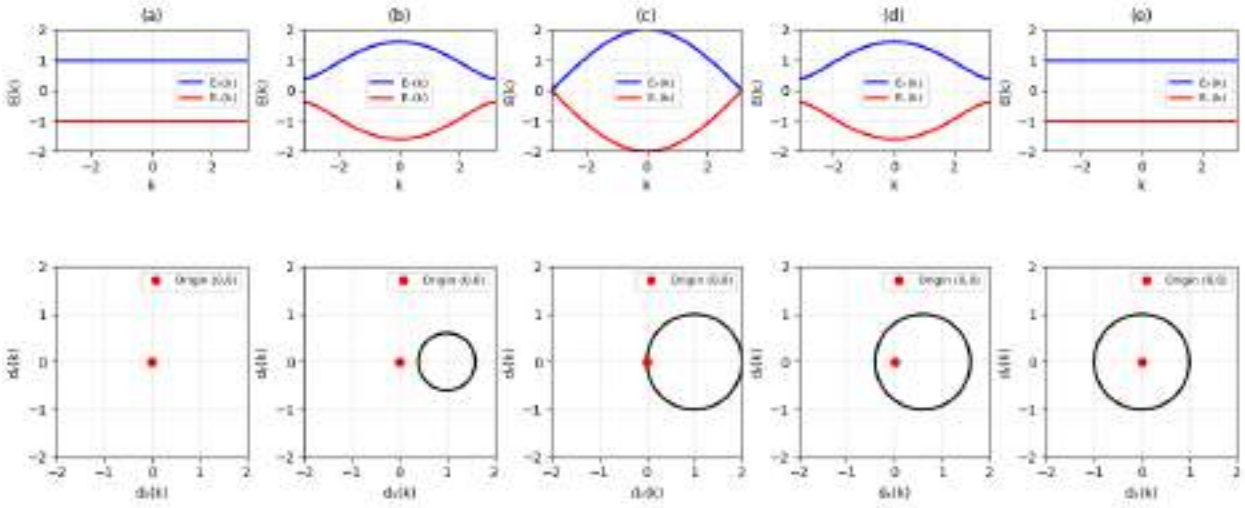
أما في الحالة $w > v$، فإن المسار يحيط بالأصل مرة واحدة، مما يؤدي إلى تغير غير تافه في الطور عند حواف منطقة بريلوان:

$$\lim_{k\to\pi/a} \phi(k) = \pi, \qquad \lim_{k\to-\pi/a} \phi(k) = -\pi، \tag{3.}$$

ومن ثم نحصل على طور بيري غير صفري$(-\pi)$، ما يعكس وجود طور طوبولوجي غير تافه.

في الحالة الحرجة $v = w$، يمر المسار عبر المبدأ بحيث تصبح $s(\boldsymbol{k}) = 0$ عند حدود منطقة بريلوين، مما يجعل الطور غير معرف ويشير إلى حدوث إنتقال طوبولوجي بين طورين مختلفين.

من المهم الإشارة إلى أن طور بيري يُعرّف حتى مضاعفات عددية من 2π بسبب حرية اختيار المعيار (gauge freedom)، إلا أن الكميات الفيزيائية الطوبولوجية تعتمد على البنية النسبية للطور (عدد اللفّات) وليس على قيمته المطلقة، لذلك يمكن دائمًا إختيار تحويل معياري مناسب لإعادة توزيع الطور بين الحزم بطريقة تجعل مجموع المساهمات متسقًا فيزيائيًا، دون التأثير على الخصائص الطوبولوجية للنظام.



شكل 9: علاقات التشتت في نموذج SSH،

(ا) المعادلة (15.1)، لخمسة حالات من معاملات القفز (hopping amplitudes). الحالة (a) : $v = 0.6,\ w = 1$: الحالة(d), $v = w = 1$: الحالة(c), $v = 1,\ w = 0.6$: الحالة(b), $v = 1,\ w = 0$ الحالة(e) : $v = 0,\ w = 1$،

في كل حالة، يُعرض أيضًا مسار نهايات المتجه $\mathbf{d}(k)$ في مستوى $d_y - d_x$ عند مسح عدد الموجة عبر منطقة بريلوين من $k = 0$ إلى 2π [16].

أما عند أخذ الاتفاقية الاولى لبلوخ يكون:

$$s(k) = ve^{-\mathrm{i}a\boldsymbol{k}/2} + w^* e^{\mathrm{i}a\boldsymbol{k}/2}$$

يكون:

$$\gamma_\pm = \frac{\mathrm{i}}{4}\ln\left(\frac{s(\boldsymbol{k})}{s^*(\boldsymbol{k})}\right)\Bigg|_{-\pi/a}^{\pi/a} = \frac{\mathrm{i}}{4}\ln\left(\frac{ve^{-\mathrm{i}a\boldsymbol{k}/2} + w^* e^{\mathrm{i}a\boldsymbol{k}/2}}{v^* e^{-\mathrm{i}a\boldsymbol{k}/2} + we^{\mathrm{i}a\boldsymbol{k}/2}}\right)\Bigg|_{-\pi/a}^{\pi/a} = \frac{\mathrm{i}}{4}\ln\left(\frac{e^{-\mathrm{i}a\boldsymbol{k}/2}(v + w^* e^{\mathrm{i}a\boldsymbol{k}})}{e^{\mathrm{i}a\boldsymbol{k}/2}(v^* + we^{\mathrm{i}a\boldsymbol{k}})}\right)\Bigg|_{-\pi/a}^{\pi/a}$$

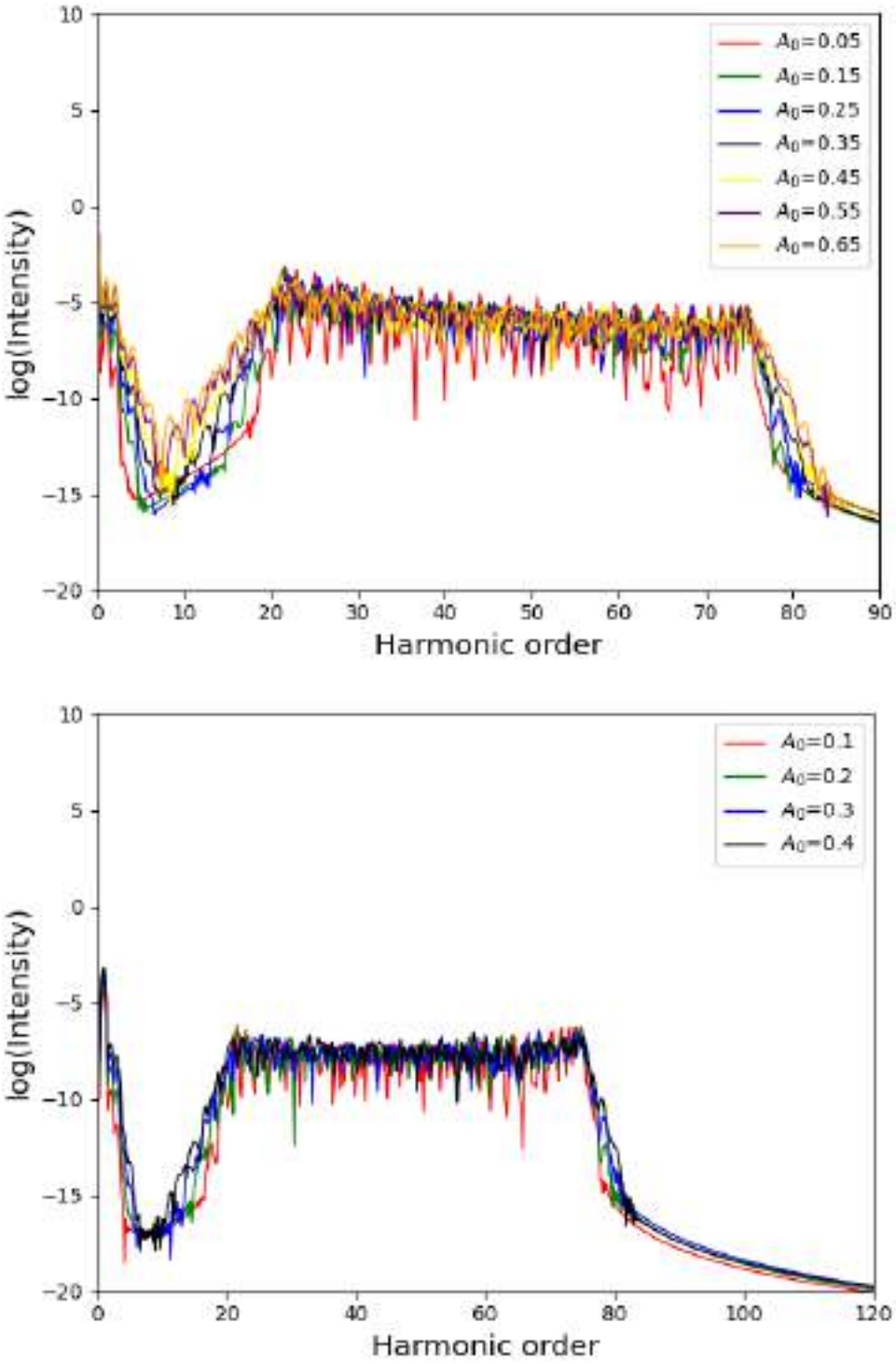
$$= \frac{\mathrm{i}}{4}\ln\left(e^{-\mathrm{i}a\boldsymbol{k}}\frac{(v + w^* e^{\mathrm{i}a\boldsymbol{k}})}{(v^* + we^{\mathrm{i}a\boldsymbol{k}})}\right)\Bigg|_{-\pi/a}^{\pi/a} = \frac{a\boldsymbol{k}}{4}\Bigg|_{-\pi/a}^{\pi/a} + \gamma_\pm^{(previous)} = \frac{\pi}{2} + \gamma_\pm^{(previous)}$$

حيث إن $\gamma_\pm^{(\text{previous})}$ هي النتيجة السابقة التي تم الحصول عليها عند الافتراض الآخر (الإتفاقية الاولى) لدالة بلُوخ (Bloch ansatz).

المصدر: D. Bauer, "Theory of strong-field laser physics on lattices," *Institut für Physik, Universität Rostock*, Rostock, Germany, Apr. 29, 2020, private communication.

3. نتائج اخرى

HHG لنموذج رايس-ميلي

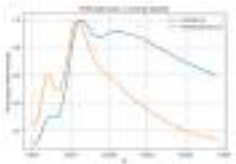


شكل 10: طيف توليد التوافقيات العالية كدالة لسعة الحقل الليزري A_0 لنموذج رايس-ميلي.

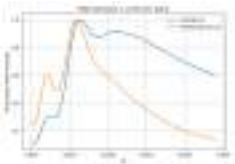
لم تقدم هذه النتائج اضافة لذالك لم يتم عرضها ولا مناقشتها وتم بدل هذا استخراج طيف التوافقيات العالية بدلالة الكمون الموضعي u_0

رتب التوافقيات المولدة

تمثل الصور التالية رتبة الهارمونيكس "#" للمركبة الافقية والعمودية للسرعة كدالة للكمون الموضعي M عند كل من النقطتين k و k' للحالات الثلاثة، الحالة الشبيهة بhBN ،الحالة البديهية والحالة غير البديهية (الطوبولوجية). العمود الايسر لكل صورة يمثل رتبة الهارمونيك عند النقطة k بينما العمود الايمن فيمثل رتبة الهارمونيك عند النقطة k'.

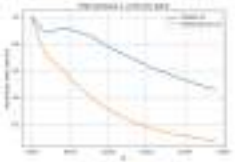


(a) hBN-like

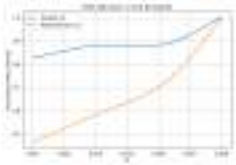


(b) hBN-like

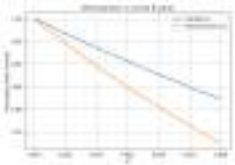
(c) trivial



(d) trivial

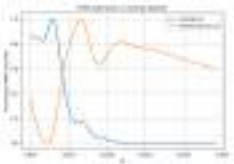


(e) non-trivial

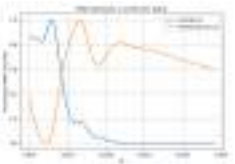


(f) non-trivial

Figure :11 Harmonic-order-1

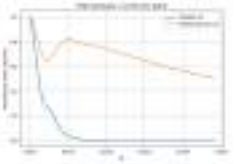


(a) hBN-like

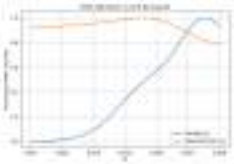


(b) hBN-like

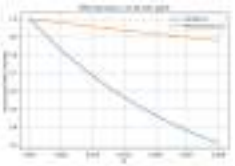
(c) trivial



(d) trivial

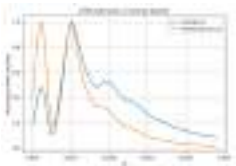


(e) non-trivial

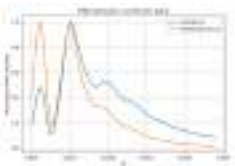


(f) non-trivial

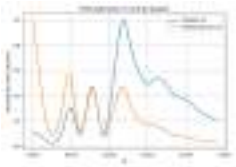
Figure :12 Harmonic-order-2



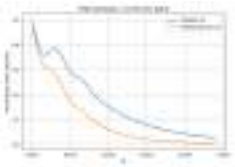
(a) hBN-like



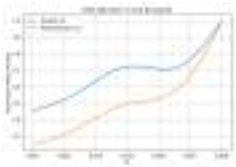
(b) hBN-like



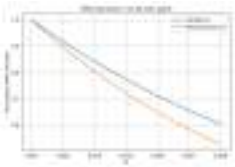
(c) trivial



(d) trivial

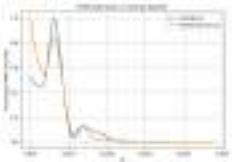


(e) non-trivial

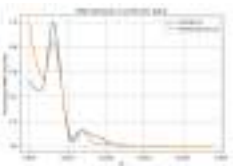


(f) non-trivial

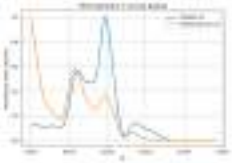
Figure :13 Harmonic-order-3



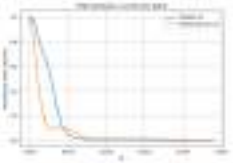
(a) hBN-like



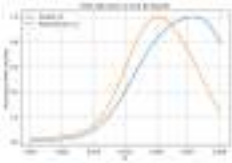
(b) hBN-like



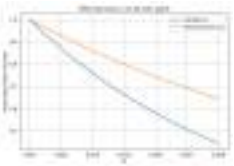
(c) trivial



(d) trivial

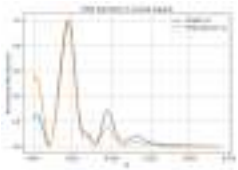


(e) non-trivial

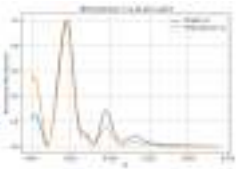


(f) non-trivial

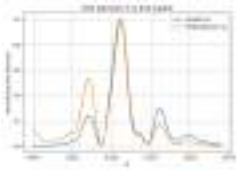
Figure :14 Harmonic-order-4



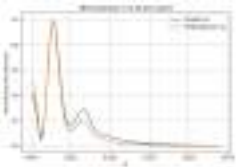
(a) hBN-like



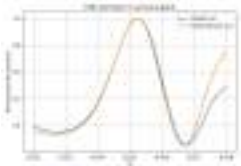
(b) hBN-like



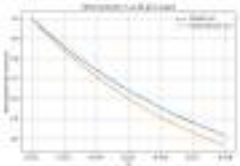
(c) trivial



(d) trivial

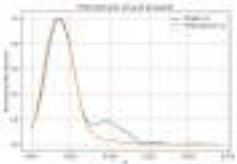


(e) non-trivial

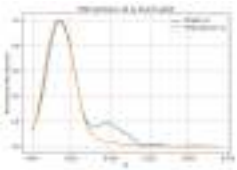


(f) non-trivial

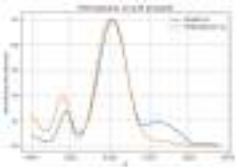
Figure :15 Harmonic-order-5



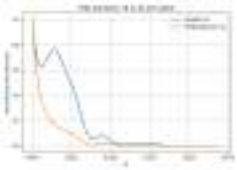
(a) hBN-like



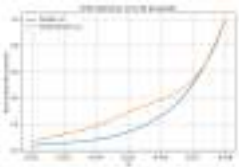
(b) hBN-like



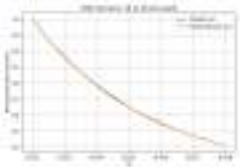
(c) trivial



(d) trivial

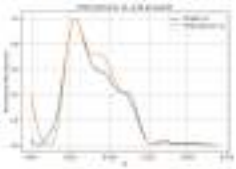


(e) non-trivial

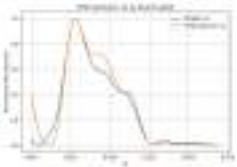


(f) non-trivial

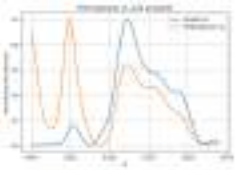
Figure :16 Harmonic-order-10



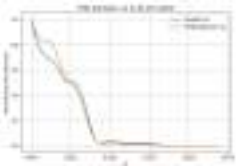
(a) hBN-like



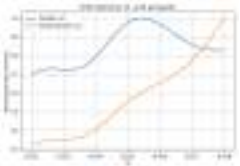
(b) hBN-like



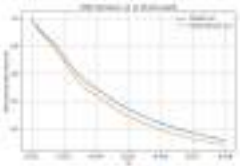
(c) trivial



(d) trivial

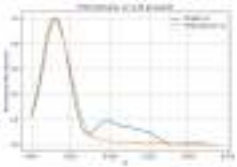


(e) non-trivial

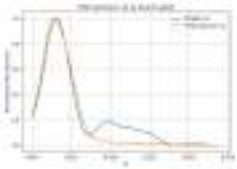


(f) non-trivial

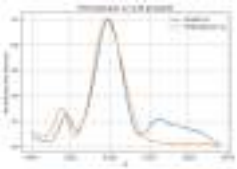
Figure :17 Harmonic-order-11



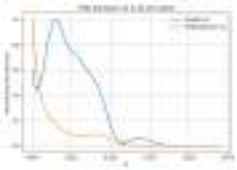
(a) hBN-like



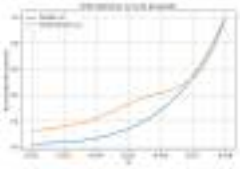
(b) hBN-like



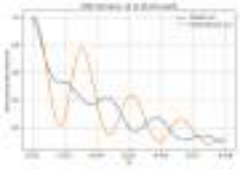
(c) trivial



(d) trivial

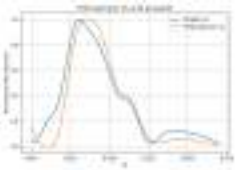


(e) non-trivial

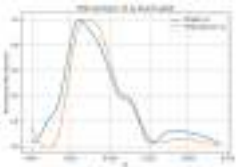


(f) non-trivial

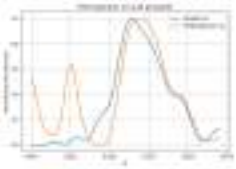
Figure :18 Harmonic-order-12



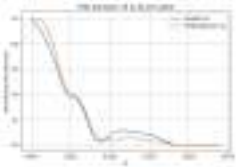
(a) hBN-like



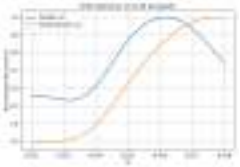
(b) hBN-like



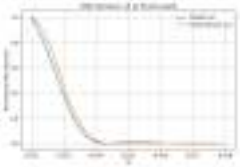
(c) trivial



(d) trivial

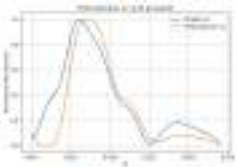


(e) non-trivial

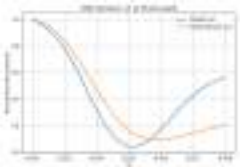


(f) non-trivial

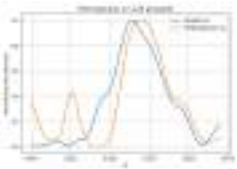
Figure :19 Harmonic-order-15



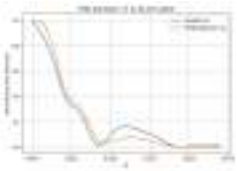
(a) hBN-like



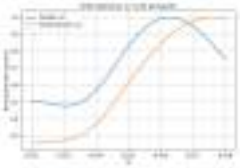
(b) hBN-like



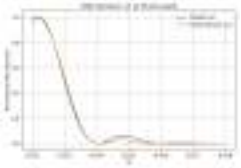
(c) trivial



(d) trivial

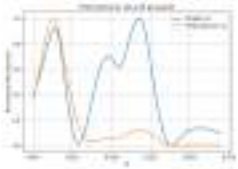


(e) non-trivial

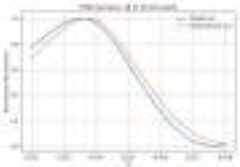


(f) non-trivial

Figure :20 Harmonic-order-17

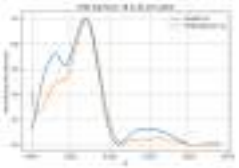


(a) hBN-like

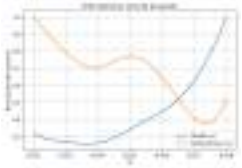


(b) hBN-like

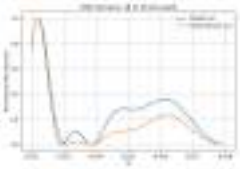
(c) trivial



(d) trivial

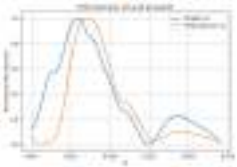


(e) non-trivial

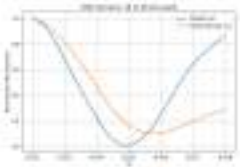


(f) non-trivial

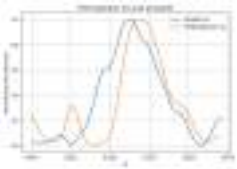
Figure :21 Harmonic-order-18



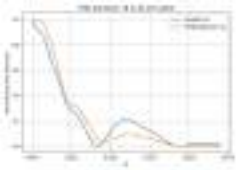
(a) hBN-like



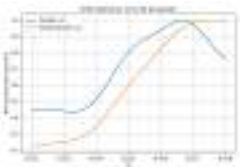
(b) hBN-like



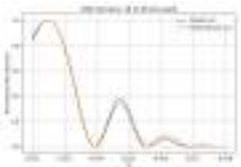
(c) trivial



(d) trivial

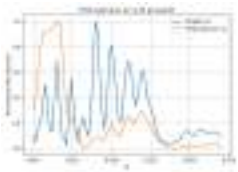


(e) non-trivial

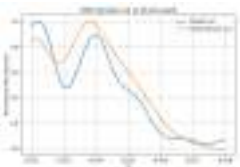


(f) non-trivial

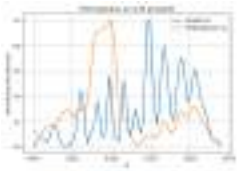
Figure :22 Harmonic-order-19



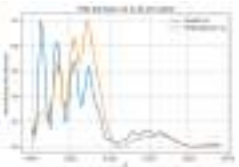
(a) hBN-like



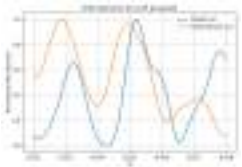
(b) hBN-like



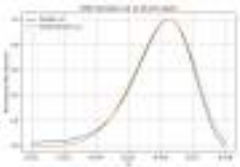
(c) trivial



(d) trivial

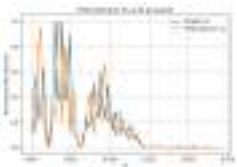


(e) non-trivial

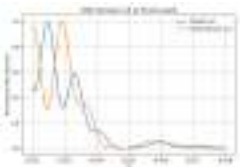


(f) non-trivial

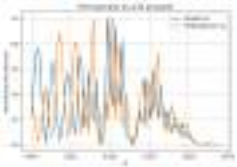
Figure :23 Harmonic-order-22



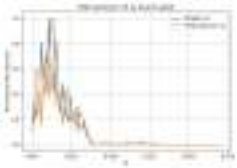
(a) hBN



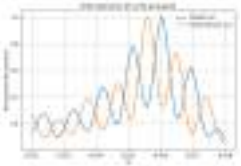
(b) hBN



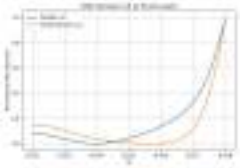
(c) trivial case



(d) trivial case



(e) non-trivial case



(f) non-trivial case

Figure :24 Harmonic-order-25

المراجع

المراجع

[1] F. Krausz and M. Ivanov, *Attosecond Physics*, Reviews of Modern Physics **81**, 163--234 (2009). https://doi.org/10.1103/RevModPhys.81.163

[2] P. B. Corkum, "Plasma perspective on strong field multiphoton ionization," *Physical Review Letters*, vol. 71, pp. ,1997-1994 1993.

[3] D. Bauer, *Theory of Intense Laser-Matter Interaction*, lecture notes, Max-Planck-Institut für Kernphysik, Heidelberg, Germany, 2006.

[4] R. M. Martin, *Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods* (Cambridge University Press, Cambridge, 2004).

[5] T. Fennel and D. Bauer, *Computational Quantum and Many-Particle Physics*, Lecture Notes, Winter Semester 2023, Institute for Physics, University of Rostock, Jan. 22, 2024.

[6] W. P. Su, J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger, *Solitons in Polyacetylene*, Physical Review Letters **42**, 1698–1701 (1979). https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.42.1698

[7] M. J. Rice and E. J. Mele, *Elementary Excitations of a Linearly Conjugated Diatomic Polymer*, Physical Review Letters, 49, 1455 (1982). doi:10.1103/PhysRevLett.49.1455

[8] C. Gadi, N. Bedida, and M. Difallah, *High harmonic generation spectra from polyacetylene in condensed phase*, Spectroscopy Letters **58**, 301–305 (2025). https://doi.org/10.1080/00387010.2024.2436070

[9] F. D. M. Haldane, *Model for a Quantum Hall Effect without Landau Levels: Condensed-Matter Realization of the "Parity Anomaly"*, Phys. Rev. Lett. **61**, 2015 (1988). https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.61.2015

[10] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics*, Holt, Rinehart and Winston, New York, 1975.

[11] S. H. Simon,*The Oxford Solid State Basics*,Oxford University Press,Oxford, United Kingdom, 2013.

[12] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 8th Edition, John Wiley & Sons, New York, 2005.

[13] M. P. Marder, *Condensed Matter Physics*, 2nd ed. (John Wiley & Sons, Hoboken, NJ, 2010).

[14] D. Vanderbilt, *Berry Phases in Electronic Structure Theory: Electric Polarization, Orbital Magnetization and Topological Insulators* (Cambridge University Press, Cambridge, 2018).

[15] D. Bauer, "Theory of strong-field laser physics on lattices," *Institut für Physik, Universität Rostock*, Rostock, Germany, Apr. 29, 2020, private communication.

[16] J. K. Asbóth, L. Oroszlány, and A. Pályi, *A Short Course on Topological Insulators*, Lecture Notes in Physics, Vol. 919, Springer, 2016. doi:10.1007/978-3-319-25607-8

[17] D. Moos, H. Jürß, and D. Bauer, "Intense-laser-driven electron dynamics and high-order harmonic generation in solids including topological effects," *Physical Review A*, vol. 102, no. 5, p. 053112, 2020.

[18] J. Zak, Berry's phase for energy bands in solids, Phys. Rev. Lett. 62, 2747 (1989).

[19] P. Delplace, D. Ullmo, G. Montambaux, Zak phase and the existence of edge states in graphene, Phys. Rev. B 84, 195452 (2011).

[20] B. H. Chen, D. W. Chiou, An elementary rigorous proof of bulk-boundary correspondence in the generalized SSH model, Phys. Lett. A 384, 126168 (2020).

[21] R. Peierls, *Zur Theorie des Diamagnetismus von Leitungselektronen*, Zeitschrift für Physik, vol. 80, pp. 763--791, 1933.

[22] M. Graf and P. Vogl, *Electromagnetic fields and dielectric response in empirical tight-binding theory*, Physical Review B, vol. 51, p. 4940, 1995.

[23] C. Aversa and J. E. Sipe, *Nonlinear optical susceptibilities of semiconductors: Results with a length-gauge analysis*, Physical Review B, vol. 52, p. 14636, 1995.

[24] H. Jürß, *High-order harmonic generation in topological Haldanite systems*, Kumulative Dissertation zur Erlangung des akademischen Grades Doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.), Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät, Universität Rostock (2024). Available at: `https://doi.org/10.18453/rosdok_id00004558`

[25] M. Z. Hasan and C. L. Kane, *Colloquium: Topological insulators*, Rev. Mod. Phys. **82**, 3045 (2010). https://doi.org/10.1103/RevModPhys.82.3045

[26] S. Ghimire, A. D. DiChiara, E. Sistrunk, P. Agostini, L. F. DiMauro, and D. A. Reis, *Observation of high-order harmonic generation in a bulk crystal*, Nat. Phys. **7**, 138 (2011). https://doi.org/10.1038/nphys1846

[27] D. Bauer and K. K. Hansen, *High-Harmonic Generation in Solids with and without Topological Edge States*, Phys. Rev. Lett. **120**, 177401 (2018). https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.120.177401

[28] D. Xiao, M.-C. Chang, and Q. Niu, *Berry phase effects on electronic properties*, Reviews of Modern Physics **82**, 1959--2007 (2010). https://doi.org/10.1103/RevModPhys.82.1959

[29] J. D. Caldwell, I. Aharonovich, G. Cassabois, J. H. Edgar, B. Gil, and D. N. Basov, *Photonic with hexagonal boron nitride*.

[30] M. Liu and Y. Wang, *Hexagonal Boron Nitride Nanosheets: Properties, Preparation and Applications in Thermal Management*.

[31] S. Ogawa, S. Fukushima, and M. Shimatani, *Hexagonal Boron Nitride for Photonic Device Applications: A Review*.

[32] G. Ndabashimiye *et al.*, *Solid-state harmonics beyond the atomic limit*, Nature **534**, 520--523 (2016). https://doi.org/10.1038/nature17660

[33] G. Vampa, T. J. Hammond, N. Thiré, B. E. Schmidt, F. Légaré, C. R. McDonald, T. Brabec, D. D. Klug, and P. B. Corkum, *Linking high harmonics from gases and solids*, Physical Review Letters **115**, 193603 (2015). https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.115.193603

[34] R. P. Feynman, *The quantum mechanical picture of nature*, Nobel Lecture (1972).

[35] L. Yue and M. B. Gaarde, *High-order harmonic generation in solids: role of intraband and interband dynamics*, Journal of the Optical Society of America B **39**, 535 (2022). https://doi.org/10.1364/JOSAB.448602

[36] C. P. Schmid, L. Weigl, P. Grössing, V. Junk, C. Gorini, S. Schlauderer, S. Ito, M. Meierhofer, N. Hofmann, D. Afanasiev, J. Crewse, K. A. Kokh, O. E. Tereshchenko, J. Güdde, F. Evers, J. Wilhelm, K. Richter, U. Höfer, and R. Huber, *High-field terahertz driven nonlinearities in solids*, Nature **593**, 385--389 (2021). https://doi.org/10.1038/s41586-021-03466-7

[37] Á. Jiménez-Galán, R. E. F. Silva, O. Smirnova, and M. Y. Ivanov, *Lightwave control of attosecond electron dynamics in solids*, Nature Photonics **14**, 728--732 (2020). https://doi.org/10.1038/s41566-020-00717-3

[38] S. Ghimire and D. A. Reis, *High-harmonic generation in solids: advances and perspectives*, APL Photonics **11**, 021102 (2026). https://doi.org/10.1063/5.0302159

الملخص

تدرس هذه المذكرة توليد التوافقيات العالية (HHG) في أنظمة منخفضة الأبعاد ودور البنية الإلكترونية والخصائص الطوبولوجية في التحكم في الاستجابة غير الخطية. تم اعتماد نموذج رايس-ميلي أحادي البعد ونموذج هالدين ثنائي البعد لتحليل تأثير كسر تناظر الانعكاس وطور بيري وتناظر النقطتين K وK' على ديناميكيات الإلكترونات وطيف التوافقيات.

أظهرت النتائج أن كسر التناظر في الحالة أحادية البعد يؤثر مباشرة على شدة التوافقيات عبر تعديل طور بيري، بينما يؤدي الطور الطوبولوجي في الحالة ثنائية البعد إلى تعزيز واضح في الشدة وامتداد منطقة الهضبة وطاقة القطع. كما بينت الدراسة أن تناظر K وK' يتحكم في سلوك الطور والاستقطاب.

تخلص الدراسة إلى أن توليد التوافقيات العالية تحدده أساسًا البنية الإلكترونية والطوبولوجية، وليس شدة الحقل الليزري فقط، مما يتيح إمكانية التحكم في الاستجابة غير الخطية للمادة.

الكلمات المفتاحية: التوافقيات العالية ،(HHG) طور بيري، الطوبولوجيا، نموذج رايس-ميلي، نموذج هالدين، الأنظمة منخفضة الأبعاد، كسر تناظر الانعكاس، ديناميكيات الإلكترونات.

Abstract

This thesis investigates high-harmonic generation (HHG) in low-dimensional systems and the role of electronic structure and topological properties in controlling the nonlinear optical response. A one-dimensional Rice–Mele model and a two-dimensional Haldane-type model are employed to analyze the effects of inversion symmetry breaking, Berry phase, and K and K' valley symmetry on electron dynamics and the harmonic spectrum.

The results show that symmetry breaking in the one-dimensional case directly affects harmonic intensity through modifications of the Berry phase, while the topological phase in the two-dimensional system leads to a significant enhancement of harmonic yield, plateau extension, and cutoff energy. Furthermore, K and K' valley symmetry is found to strongly influence both phase and polarization properties.

Overall, the study concludes that high-harmonic generation is primarily governed by the electronic structure and topological properties of the system rather than by the laser field strength alone, enabling efficient control of the nonlinear response.

Keywords: High-harmonic generation (HHG) , Berry phase, topology, Rice–Mele model, Haldane model, low-dimensional systems, inversion symmetry breaking, electron dynamics.