

## تأثير درجة الحرارة للسطح على العوامل الخارجية المؤثرة على الحالات الالكترونية الصورية

جبار منصور خلف

قسم الفيزياء - كلية التربية - جامعة البصرة - العراق

ISSN-1817-2695

((الاستلام 2007/9/2، القبول 2007/11/25))

### المخلص :

في هذا البحث تمت دراسة تأثير درجة الحرارة للسطح عند تفاعل ايون (ذرة) مع سطح معدن Cu(111) وتبين انه كلما زادت درجة الحرارة للسطح قلت الطاقة التي يحتاجها الإلكترون لحدوث الحالات الصورية. كذلك تمت دراسة تأثير درجة الحرارة عند اقتراب سطحين (متشابهين ومختلفين)، وعند تسليط مجال كهربائي بين السطحين Cu (111) / Cu (111) ومدى تأثير درجة الحرارة للسطحين وبوجود المجال.

الكلمات المفتاحية: حالة الصورة، طاقة مستوي الفراغ، فرق جهد، طاقة الربط، درجة الحرارة.

### المقدمة:

وتكون حساسة اكثر بهذا الارتفاع من الانتقالات المباشرة داخل الصلب .  
اما حالات السطح من النوع d لسطوح فلزية انتقالية (التي تمتلك دوالاً موجية شبة ذرية ) فانها تشطر بفجوة عن الحزم داخل الصلب بوساطة جهد السطح [11] .

سيتم تناول العوامل الخارجية التي تؤدي الى انحناء حاجز الجهد بتأثير درجة الحرارة وبالتالي تؤثر على حالات الصورة وهذه العوامل تشمل:-

1. تأثير درجة الحرارة للسطح عند تفاعل ايون (ذرة) مع سطح معدن Cu (111) .
2. تأثير درجة الحرارة للسطحين عند تفاعل سطحين.
3. تأثير درجة الحرارة للسطحين على الوصلة Cu (111) / Cu (111) مع تسليط فرق جهد.

الحالات الصورية هي مجموعة مهمة من حالات السطح، والتي جذبت اهتماماً كبيراً في السنوات الاخيرة [1-6] . الحالات شبة الهيدروجينية تتجمع على السطح بسبب استجابة المادة (substrate) الى وجود الإلكترون، وتحفظ الخواص الانعكاسية للمادة خارج السطح. ظهور الأنظمة القياسية الواطئة يفسر الخواص الالكترونية كتلاشي حافة فيرمي في البعد الواحد [ 8,7 ] ، الذي ينتج بسبب ارتباطات الالكترونات التي لا تستطيع تجنب أي حركة الى الأمام بنفس الخط في الفضاء. هنا نحن نركز على حالات بسيطة محددة تسمى الحالات الصورية [ 10,9 ] .

ان الحالة من نوع S,P تنشأ مبدئياً من الشروط الحدودية الجديدة الناتجة بوساطة السطح، وان الاختلاف بين الحالات الالكترونية للسطح وداخل الصلب هي ان درجات حرارة ديبياي للسطح تكون أوطأ من قيمتها داخل الصلب بسبب عدد الإحداثيات المتناقصة لذرات السطح. ونتيجة لذلك فان خواص السطح تميل للاستجابة للارتفاع في درجة الحرارة،



1. تأثير درجة الحرارة عند تفاعل ايون (ذرة) مع سطح معدن Cu (111) .

للمنطقتين عند النقطة  $Z_i$  فقط وجدنا قيمة الثابت  $G$  كالآتي:-

$$G = \frac{\left[ U_0 - \frac{g(\epsilon)}{4(Z_i - Z)} - A \right]}{Z_i^m} \dots \dots \dots (3)$$

حيث  $Z_i$  موقع مستوي الصورة. اما طاقة مستوي الفراغ [9] فتعطى بالعلاقة.

$$U_0 = E_g - V_g + \phi + \epsilon_F \dots \dots \dots (4)$$

تمثل  $E_g$  الطاقة الالكترونية على حدود حاجز بريليون و  $V_g$  مركبة فورير و  $\phi$  دالة شغل المعدن و  $\epsilon_F$  مستوي فيرمي. ونلاحظ تأثير درجة الحرارة على طاقة مستوي الفراغ  $U_0$  وفقاً للمعادلة الآتية [14].

$$\phi = \phi_0 - (8 \times 10^{-5}) \times T \dots \dots \dots (5)$$

حيث ان  $T$  هي درجة الحرارة بوحدات الكلفن (K).

لدراسة تأثير درجة الحرارة على حالات الصورة الالكترونية عند اقتراب ايون من سطح معدن Cu(111) شحنته وحدة واحدة وعلى مسافة  $d$  منه فان طاقة الجهد للإلكترون تصبح [12].

$$U(Z) = GZ^m - \frac{1}{|d-Z|} + \frac{g(\epsilon)}{|d+Z|} + A \dots \dots \dots 0 \leq Z \leq Z_i \dots \dots (1)$$

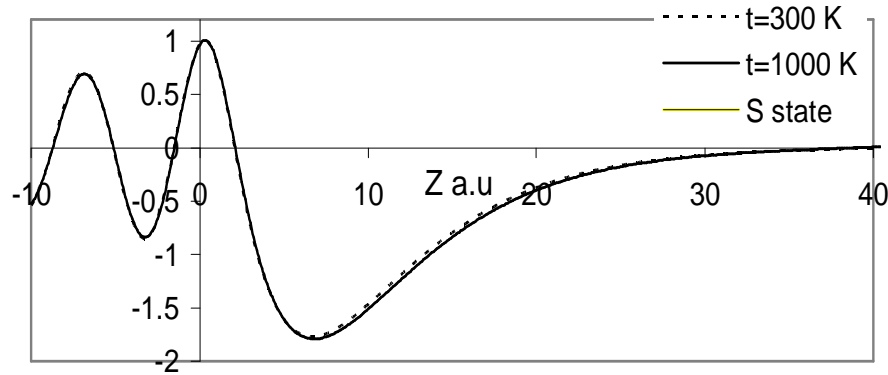
$$= U_0 - \frac{g(\epsilon)}{4(Z-Z_0)} - \frac{1}{|d-Z|} + \frac{g(\epsilon)}{|d+Z|} \dots \dots \dots Z > Z_i \dots \dots (2)$$

حيث ان  $A = \frac{1-g(\epsilon)}{d}$  و  $g(\epsilon)$  هي دالة الاستقطابية الكهربائية [13] وكلا من  $\frac{1}{|d-Z|}$  ،  $\frac{g(\epsilon)}{|d+Z|}$  توصف طاقة الجهد الناتجة من الايون وصورته و  $U_0$  طاقة مستوي الفراغ مقاسه من قعر الحزمة. وعند إجراء المطابقة ومساواة الجهود

**النتائج والمناقشة:**

حيث نلاحظ من الجول انه كلما زادت درجة الحرارة قلت الطاقة التي يحتاجها الإلكترون لحدوث حالات الصورة، والشكل (1) يوضح تأثر الدالة الموجية  $\Psi(Z)$  للحالة  $S$  بتغير درجة الحرارة ولمسافة ثابتة.

اجريت الحسابات لمسافة قدرها  $d = 100$  a.u لاقتراب ايون (ذرة) من سطح Cu (111) وللمعاملات الآتية  $\phi = 4.74$  eV و  $E_g = 10.3$  eV و  $V_g = 2.55$  eV و  $\epsilon_F = 0.85$  eV [وهذه المعاملات ماخوذه من المصدر [1]]. ولتوضيح النتائج سوف اعرضها في الجول (1).



الشكل (1) الدالة الموجية لحالة الصورة  $S_1$  لدرجتين مختلفتين

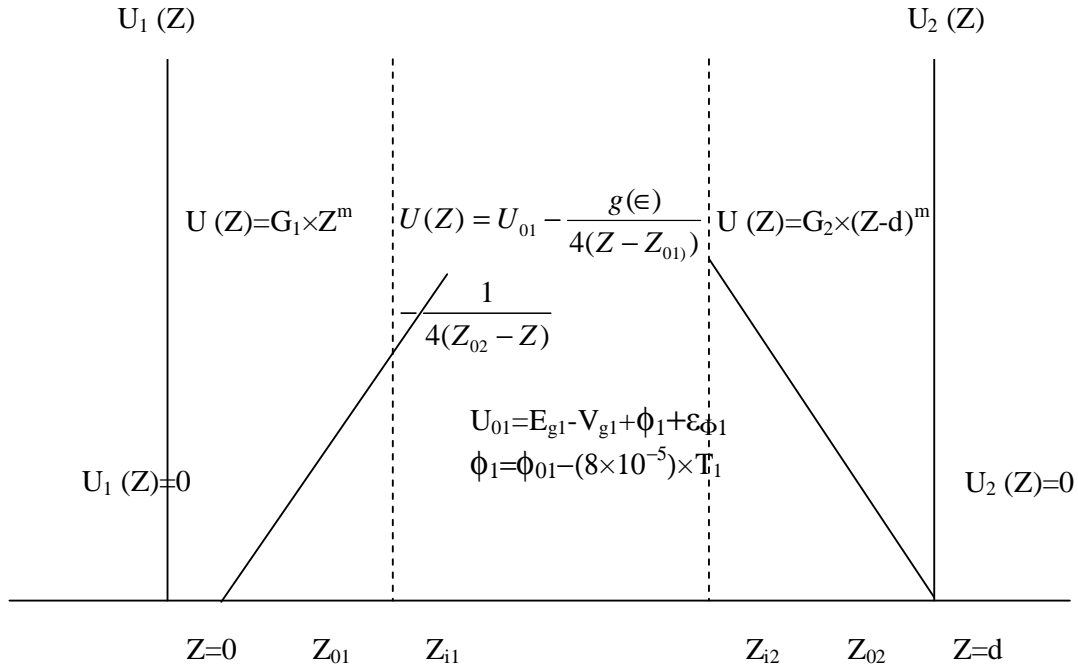
جدول (1) يبين الطاقة التي يحتاجها الإلكترون مع تغير درجة الحرارة

T (K)	E eV
300	12.5335
600	12.4949
1000	12.4688

2. تأثير درجة الحرارة عند تقارب سطحين.

سطحين، ولدراسة الحالات الالكترونية للسطح اعتمدنا الجهد الاتي [12]

المخطط (1) يوضح نموذج الجهد في حالة تقارب



المخطط (1) : يوضح نموذج الجهد في حالة تقارب سطحين

$$U(Z) = 0 \dots \dots \dots Z \leq 0 \dots \dots \dots (6)$$

$$= G_1 Z^m - \frac{g(\epsilon_2)}{4(Z_{02} - Z)} + A \dots \dots \dots 0 < Z \leq Z_{i1} \dots \dots \dots (7)$$

$$= U_{01} - \frac{g(\epsilon_1)}{4(Z - Z_{01})} - \frac{g(\epsilon_2)}{4(Z_{02} - Z)} \dots \dots \dots Z_{i1} < Z \leq Z_{i2} \dots \dots \dots (8)$$

$$= G_2 (d - Z)^m - \Delta - \frac{g(\epsilon_1)}{4(Z - Z_{01})} \dots \dots \dots Z_{i2} < Z \leq 0 \dots \dots \dots (9)$$

يمثلان اصل مستوي الصورة للمعدنيين الأول والثاني على التوالي. و Z المسافة عن سطح المعدن الأول.

تمثل d المسافة بين سطحين و  $\Delta = U_{02} - U_{01}$  وان  $U_{02}$  ،  $U_{01}$  يمثلان مستوي الفراغ للمعدنيين الأول والثاني على التوالي مقاساً من قعر الحزمة و  $Z_{02}$ ،  $Z_{01}$

$$U_{o1} = E_{g1} - V_{g1} + \phi_1 + \varepsilon_{F1} \dots \dots \dots (10)$$

$$\phi_1 = \phi_{o1} - (8 \times 10^{-5}) \times T_1 \dots \dots \dots (11)$$

$$U_{o2} = E_{g2} - V_{g2} + \phi_2 + \varepsilon_{F2} \dots \dots \dots (12)$$

$$\phi_2 = \phi_{o2} - (8 \times 10^{-5}) \times T_2 \dots \dots \dots (13)$$

وجميع المعاملات معرفة سابقاً.

حرارة المعدن الأول درجة حرارة الغرفة تبقى طاقة الربط هذه نفسها لا تتغير .  
ويوضح الشكل (2) مقارنة كثافة الحالات الموضعية  $P(Z) = |\Psi(Z) / \Psi(0)|$  (معايرة نسبة الى قيمتها عند  $Z=0$ ) للحالة  $S_1$  ولدرجات حرارة مختلفة ومسافة  $d = 100 \text{ a.u}$ .

الجدول (3) يوضح النتائج اذ نلاحظ فيه انه كلما زادت درجة حرارة السطح الأول مع بقاء درجة حرارة السطح الثاني عند درجة حرارة الغرفة كلما قلت الطاقة التي يحتاجها الإلكترون لحدوث حالات الصورة. والشكل (3) يبين مقارنة بين كثافة الحالات الموضعية  $P(Z)$  للمعدنين  $Ag(111) / Cu(111)$  لدرجتين مختلفتين.

اما بالنسبة الى درجة الحرارة فهي تؤثر على طاقة مستوي الفراغ للمعدنين  $U_{o1}$  ،  $U_{o2}$  وحسب المعادلات.

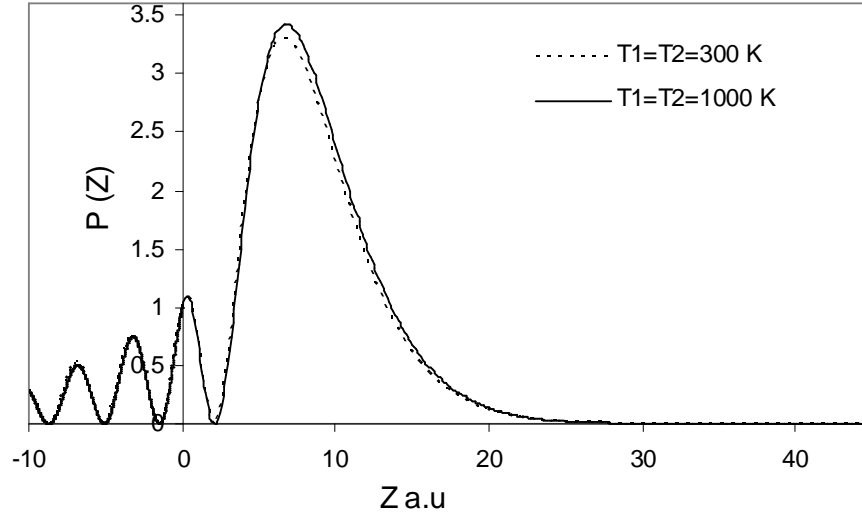
#### أ- عند اقتراب سطحين متشابهين.

الجدول (2) يوضح النتائج عند اقتراب سطحين متشابهين وليكن السطح هو  $Cu(111)$ . اذ نلاحظ من الجدول انه كلما زادت درجة الحرارة للسطح كلما قلت الطاقة التي يحتاجها الإلكترون لحدوث حالات الصورة، ولكن لاحظت في درجة حرارة الغرفة للمعدنين هناك طاقة ربط نحصل عليها وعند تغيير درجة حرارة المعدن الثاني مع بقاء درجة **ب- عند اقتراب سطحين مختلفين.**

لدراسة اقتراب سطحين مختلفين تم اختيار اقتراب سطح  $Ag(111)$  من سطح  $Cu(111)$  وان المعاملات التي تخص  $Ag(111)$  هي  $V_{g2} = 2.15 \text{ eV}$  و  $E_{g2} = 9.64 \text{ eV}$  و  $\phi_2 = 4.74 \text{ eV}$  و  $\varepsilon_{F2} = 0.31 \text{ eV}$  [وهذه المعاملات مأخوذة من المصدر [1]].

جدول (2) يبين الطاقة التي يحتاجها الإلكترون مع تغير درجة الحرارة لسطحين متشابهين

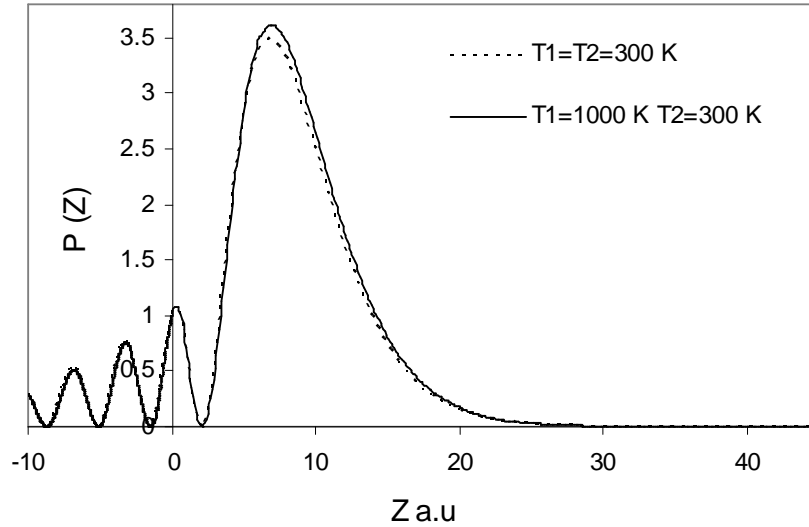
$T_1$ (K)	$T_2$ (K)	E eV
300	300	12.5114
600	300	12.4728
300	600	12.5114
1000	1000	12.4468



الشكل (2) مقارنة بين كثافة الحالات الموضعية  $P(Z)$  للمعدنين Cu (111) / Cu (111) لدرجتين مختلفتين

جدول (3) يبين الطاقة التي يحتاجها الإلكترون مع تغير درجة الحرارة للسطحين مختلفين

$T_1$ (K)	$T_2$ (K)	E eV
300	300	12.5435
600	300	12.5045
800	300	12.4913
1000	300	12.4782



الشكل (3) مقارنة بين كثافة الحالات الموضعية  $P(Z)$  للمعدنين Ag (111) / Cu (111) لدرجتين مختلفتين

### 3. تأثير درجة الحرارة على الوصلة Cu (111) / Cu (111) مع تسليط فرق جهد.

الكهروستاتيكي . وفرق الجهد بين الوجهين المعدنيين يمكن ان يوضح بدلالة دوال شغلها وبما ان دوال الشغل مرتبطة بدرجة الحرارة فهذه الدرجة تأثر على فرق الجهد .  
اما نموذج الجهد بتسليط مجال كهربائي فهو كالآتي [15].

عند اخذ معدنيين دالة الشغل لهما  $\phi_1$  ،  $\phi_2$  مرتبطين بحيث تسمح للالكترونات ان تسري بحرية من احدهما للآخر . عندما يحصل الاتزان فان الالكترونات في كل معدن يجب ان تكون بنفس الجهد الكيميائي. لان الشحنة نقلت من مستوي فيرمي من وجهة المعدن الأول الى وجهة المعدن الثاني وعلى نفس مستوي فيرمي فان المعدنيين لم يكون لهما نفس الجهد

$$U(Z) = G_1 Z^m - \frac{U_a Z}{d} - |\phi_2 - \phi_1| - \frac{g(\epsilon_2)}{4(Z_{o2} - Z)} + A... \quad 0 \leq Z \leq Z_{i1} \dots\dots\dots(14)$$

$$= U_{o1} - \frac{g(\epsilon_1)}{4(Z - Z_{o1})} - \frac{g(\epsilon_2)}{4(Z_{o2} - Z)} - \frac{U_a Z}{d} - |\phi_2 - \phi_1|.. \quad Z_{i1} < Z < Z_{i2} \dots\dots\dots(15)$$

$$= G_2 (d - Z)^m - \Delta - \frac{g(\epsilon_1)}{4(Z - Z_{o1})} - \frac{U_a Z}{d} - |\phi_2 - \phi_1|... \quad Z_{i2} < Z \leq d \dots\dots\dots(16)$$

حيث  $U_a/d$  تمثل المجال الكهربائي، وباقي المعاملات معرفة سابقاً.

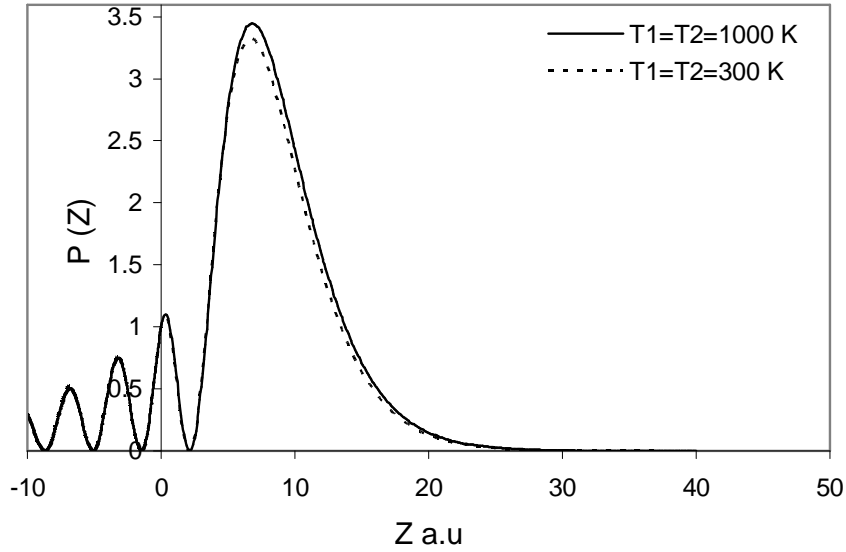
#### النتائج والمناقشة:

درجة حرارة السطحين. ونلاحظ انه مع بقاء درجة الحرارة ثابتة فان الطاقة التي يحتاجها الإلكترون تقل بزيادة المجال الكهربائي بين السطحين.  
والشكل (4 - A,B ) يبين اختلاف كثافة الحالات الموضوعية لدرجات حرارة مختلفة ولمجال كهربائي ثابت ومتغير .

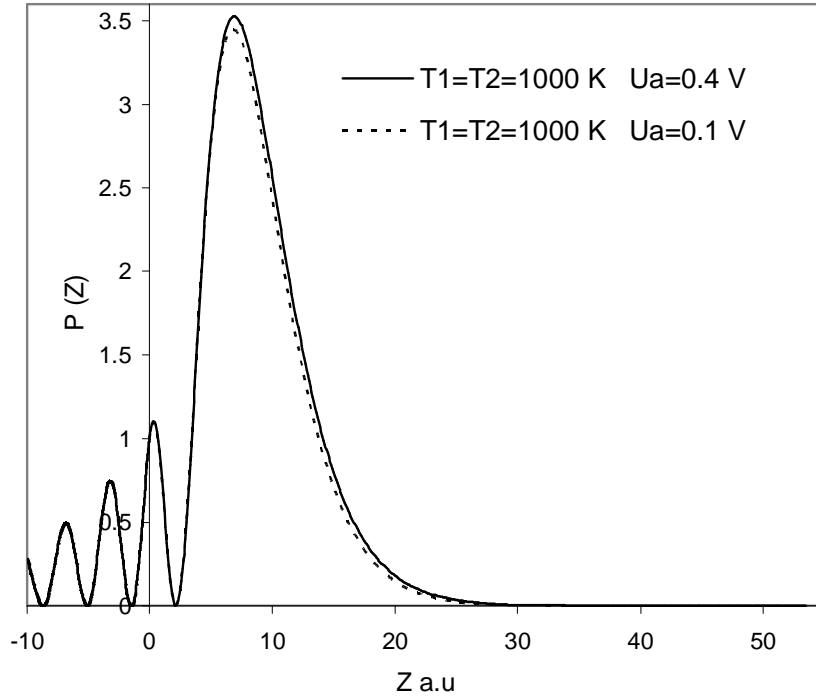
الجدول (4) يوضح لنا عند اقتراب سطحين متشابهين وليكن السطح Cu (111) ووجود مجال كهربائي قيمته ( 0.1 V ) فان الطاقة التي يحتاجها الإلكترون لحدوث حالات الصورة تزيد بزيادة درجة حرارة السطح الأول مع بقاء درجة حرارة السطح الثاني ( درجة حرارة الغرفة ) وتقل عندما يكون العكس ، وتقل أيضاً بزيادة

جدول (4) يبين الطاقة التي يحتاجها الإلكترون مع تغير درجة الحرارة لسطحين متشابهين ومجال متغير

$U_a$ (V)	$T_1$ (K)	$T_2$ (K)	E eV
0.1	300	300	12.5044
0.1	600	300	12.5059
0.1	300	600	12.4640
0.1	1000	1000	12.4395
0.4	300	300	12.4827
0.4	1000	1000	12.4170



الشكل (A4) مقارنة بين كثافة الحالات الموضعية  $P(Z)$  للمعدنيين  $\text{Cu}(111) / \text{Cu}(111)$  لدرجتين مختلفتين ومجال كهربائي  $0.1 \text{ V}$



الشكل (B4) مقارنة بين كثافة الحالات الموضعية  $P(Z)$  للمعدنيين  $\text{Cu}(111) / \text{Cu}(111)$  لمجالين مختلفين ودرجة ثابتة

### Reference

1. P.M. Echeniqe and J.B. Pendry, J. phys. C 11, 2065 (1978).
2. P.D.Johnson and N.V.Smith, phys. Rev. B27, 2527 (1983).
3. V. Dose, W. Altmann, and J. Rogozik, phys.Rev.Lett.52,1919 (1984).



4. B. Reihl, K.H. Frank, and R.R. Schlittler, phys. Rev. B30,7328(1984).
5. E.G.McRae,Rev.Mod.phys.51, 541 (1979).
6. D.straub and F.J. Himpsel, phys.Rev.Lett.52, 1922 (1984).
7. B. Dardel, D. Malterre, M. Grioni, and Y.Petroff, Europhys.Lett.19,525 (1992).
8. Y.Hwu and G.Margaritondo, phys.Rev.B 46, 13624 (1992).
9. P.M. Echeniqe and J.B. Pendry, Prog. Surf. Sci . 32, 111 (1990).
- 10.F. J. Himpsel and J.E. Ortega, phys.Rev.B 46, 9719 (1992).
- 11.V. Dose, Physica Scripta. 36, 669 (1987).
12. جبار منصور خلف / اطروحة ماجستير كلية التربية جامعة البصرة (2000).
- 13.D. Straub and F. J. Himpsel, Phys. Rev. B 33, 2256 (1986).
- 14.A.modinos in Field , Thermionic , and secondary Electron Emission spectroscopy New York 1984.
- 15.N. W. Ashcroft and A. Merminin. Solid state physics, Saunders college, philadelephia, (1985).

### Abstract

In this paper the effect of temperature had been studied for the ion (atom) reaction with the surface of the metal Cu(111). A decrease of the energy required by the electron for image state production with increase of temperature has been observed. The effect of the temperature as the two surfaces become never wether (identical or not) and the effect of the temperature with presence of the electric field between the two surface Cu(111)/Cu(111) has been studied also.