

التهيجات الإلكترونية للجسيمات المقلوعة خلال عملية السبترية

ISSN -1817 -2695

أبازر رحمن أحمد ، حمزة بكر سلمان ، جنان مجيد المخ

قسم الفيزياء - كلية التربية - جامعة البصرة
(الاستلام 2009/9/15، القبول 2010/1/18)

المخلص

في هذا البحث قدمت دراسة نظرية لحساب احتمالية التعادل عبر كل من قناتي الحالة الأرضية والحالة المثارة للجسيم المقلووع خلال عملية السبترية . كتب الهاملتونين الذي يصف النظام بحيث يأخذ بنظر الإعتبار الحالة الأرضية والمثارة للجسيم المقلووع وتفاعلهما مع السطح . تمت الإستفادة من معادلات هايزنبرك للحركة لإشتقاق معادلات الحركة التي تصف النظام . أستعمل تقريب الحزمة العريضة لتبسيط حل المعادلات ، كما تم فحص قانون حفظ الشحنة . حلت المعادلات عددياً كما فحص تفاعل ذرة مقلووعة - سطح على طول المسار الكلاسيكي للذرة المقلووعة المبتعدة عن السطح . تم إستعراض معايرة موسعة للإنموذج إذ فحصت المظاهر العامة الخاصة بتفاعل ذرة مقلووعة - سطح كما نوقش مفهوم طاقة التداخل . طبقت المعالجة لنظام حقيقي وهو قلع ذرات الفضة من الفضة الصلب . حسبت احتمالية التعادل عبر قناتي الحالة الأرضية والمثارة كدالة للزمن ولمركبة السرعة العمودية للذرة المقلووعة ولقيم مختلفة من قوى التفاعل التي ترتبط بالتركيب الإلكتروني لمنطقة القلع . النتائج تظهر تطابقاً نوعياً مع النتائج العملية ونتائج إنموذج إعادة التهئية . وقد تم توظيف هذه النتائج لحساب ناتج الفوتون كدالة لمركبة السرعة العمودية للذرة المقلووعة ولقيم مختلفة لقوة الإقتران .

1. مقدمة Introduction

2- طاقة الترابط بين ذرات الهدف [5,6].
3- الكتل الذرية للأيون الساقط وذرة الهدف [7] .
4- التوجيه البلوري أو التركيب الإلكتروني للسطح .
5- درجة حرارة السطح وبالأخص عندما تكون المادة عبارة عن سبيكة .
6- نوع السطح فيما إذا كان من مادة واحدة أو من عناصر متعددة [8,9] .
7- خشونة السطح أو ما يسمى بـ (طوبوغرافية) السطح ، إذ يتعلق ذلك بزاوية سقوط حزمة الأيونات المعجلة [10] .
8- تغيير دالة الشغل للسطح بسبب عملية السبترية نفسها .
تختلف نسبة الذرات المقلووعة للأيون الساقط من 10^{-3} للذائف الخفيفة مثل H^+ إلى 10 أو 20 للذائف الثقيلة مثل Pb^+ [11].
ووجد أن الجسيمات المقلووعة خلال عملية السبترية تتضمن ذرات وآيونات . إن التوزيع بين حالات الشحنة هذه يرتبط جزئياً بتفاعل الجسيمات المقلووعة مع السطح . فمثلاً يمكن للأيون المقلووع أن يتفاعل عن طريق عملية تعادل رنينية أو تعادل أوجير . وهناك نسبة تصل إلى 10% من الجسيمات المقلووعة تنقلع

عندما يتصادم الأيون الساقط مع السطح (الهدف) وبسبب فرق الكتل (أي كتلتي الأيون الساقط وذرة الهدف) ، فإن الأيون الساقط ينقل زخمه إلى ذرة الهدف ، وأن ذرة الهدف هذه تنقل الزخم إلى داخل السطح (أي إلى الذرات الأخرى) وبعملية متتابعة من التصادمات حتى تتلاشى هذه الطاقة . وتعمل القوى الرابطة بين ذرات الهدف على إعادة الذرات إلى موضع الإتران وعندما يكون الزخم أو الطاقة المنتقلة لذرة الهدف كبيرة فأن ذرة الهدف تراح عن موضعها الأصلي وتتخذ مواضع إتران أخرى ، أما عندما تكون الطاقة غير كافية فأن ذرة الهدف ترجع إلى موقعها السابق [1,2].
عندما تمر ذرة الهدف بسلسلة من التصادمات الثانوية فأنها تمتلك طاقة كافية للتغلب على القوى الرابطة بين الذرات وبذلك تتحرك السطح وتتحرك في الفراغ . هذه العملية هي التي نسميها السبترية Ion sputtering .
يعرف ناتج السبترية [3] Sputtering yield على أنه عدد الجسيمات المقلووعة لكل أيون ساقط . ويعتمد ناتج السبترية على ما يلي :
1- طاقة الأيون المستخدم للتصادم مع سطح الهدف [4] .

السبترة على أنها العملية التي ينتج عنها انبعاث فوتونات نتيجة إنحلال (Decay) الذرات المتهيجة في المستويات العليا إلى المستويات الأوطأ التي تحدث خلال عمليات تبادل الشحنة بين ذرة (أيون) و سطح المادة الصلبة خلال عمليتي الإستطارة والسبترة . علماً أن مسار الذرات المقلوعة في عملية السبترة يناظر مسار الخروج في الإستطارة وأن إنحلال وانبعاث الفوتونات من الذرة المقلوعة بسبب عملية السبترة يحدث بعد خروجها من منطقة السطح .

يحدد ناتج الفوتونات بالعوامل التالية :

- 1 . وجود التغطية coverage على السطح وتغير هذه التغطية خلال عملية السبترة [13,14] .
 - 2 . منطقة أقرب تجاوراً إذ تحدد الأواصر الكيميائية للذرة المقلوعة بسبب السبترة [15] .
 - 3 . إن للقوة الصورية دوراً فعالاً في تفسير الإنتقالات الإلكترونية ومن ثم ناتج الفوتونات وبالأخص عند منطقة أقرب تجاوراً [16] .
 - 4 . إن تهيج الذرات يمكن أن يحدث بسبب التصادم بين الجسيمات الساقطة والمقلوعة أيضاً عند منطقة السبترة [3] .
- إن الهدف الأساس من دراستنا هو بناء إنموذج حسابي متكامل لدراسة عملية التهيج للذرات المقلوعة بسبب عملية السبترة ودراسة كل العوامل المؤثرة فيها وكذلك حساب ناتج الفوتونات . حيث نتابع دراستنا هذه حالة التعادل (عبر قناة الحالة الأرضية أو عبر قناة الحالة المثارة) للذرة المقلوعة بالسبترة عند لحظة خروجها من منطقة القلع .

سطح معدن يفترض أخذ الطيف المستمر لطاقتان مستويات السطح أسفل وأعلى مستوي فيرمي E_F التي سيرمز لها بالرمز E_k . نفترض أن ذرة متعادلة مقلوعة بسبب عملية السبترة وأن موقع المستوي الذري المقابل للحالة الأرضية ground state (على مخطط الطاقة في الشكل (a) 2) مقاساً بالنسبة لمستوي فيرمي (يتمثل بـ E_a . وأن موقع المستوي الذري المقابل للحالة المثارة excited state لهذه الذرة يتمثل بـ E_x وهو مقاس بالنسبة لمستوي فيرمي أيضاً . علماً أن الإقتران coupling بين كل من هاتين الحالتين والسطح يكون أعلى ما يمكن بالقرب من السطح [18] .

كجزيئات نتيجة لعملية قلع ذرتين أو أكثر من الذرات المتجاورة في الشبيكة [12]. كذلك يمكن لنسبة من الجسيمات المقلوعة أن تكون في حالة مثارة excited state إذ تبعث خط إشعاع ذري atomic line radiation عند مسافة معينة من السطح .

يمكن تصور عملية التهيج خلال عملية السبترة كما يلي :

تعيد الإلكترونات التساهمية في حزمة طاقة الصلب ترتيبها من الحالة الابتدائية التي يمكن أن توصف بها بدلالة الدوال الموجية الخاصة بالصلب إلى حالة نهائية يمكن وصفها بدلالة الدوال الموجية الذرية . إن التهيج الذري في عمليات السبترة هو عبور تنظيم الإلكترون التساهمي من الصلب إلى ذرة حرة (أو أيون حر) وكما هو موضح في الشكل (1) .

من الجدير بالذكر أن دراستنا تتابع حالة التعادل (فيما إذا كانت عبر قناة الحالة الأرضية أو الحالة المثارة) للذرة المقلوعة لحظة خروجها من منطقة القلع وعليه يكون التهيج لأحد الأسباب التالية :

- 1 . تخرج الذرة المقلوعة من منطقة القلع وهي بالحالة المثارة بسبب التصادمات المتتابعة داخل المادة .
- 2 . تخرج الذرة المقلوعة من منطقة القلع وهي بالحالة الأرضية ثم يحدث لها إثارة بسبب عملية تبادل الشحنة الرنيني أو شبه الرنيني .

فضلاً عن ذلك ، فإن الإضمحلالات المتتابعة للذرات المثارة تقود إلى انبعاث فوتونات . لذا فإن التهيج خلال عملية السبترة يمكن أن يدرس من خلال ملاحظة الضوء المنبعث من الجسيمات المقلوعة . وتعرف عملية ناتج الفوتون خلال عملية

2. الإنموذج الحسابي Model Calculation

لدراسة عمليات التهيج الإلكترونية للجسيمات المقلوعة خلال عملية السبترة تم اعتبار الآتي : إن الذرة المقلوعة بسبب عملية السبترة تكتسب زخماً محدداً بسبب تصادمها مع ذرة أخرى وتقلت من السطح . وبسبب هذه التصادمات الذرية قد تنقل الذرة (من السطح وعند الزمن الابتدائي $t_0 = 0$) وهي بحالة مثارة وبحالة شحنة محددة، وتقع أيضاً بالحالات المثارة عند حزمة المعدن وتتبدد هذه الإثارة في المعدن بزمن أقل بكثير من الوقت الذي تستغرقه الذرة لكي تترك السطح . ولكن هناك كثير من حالات التهيج تنشأ عندما تمر الذرة من خلال السطح [17] .

لحساب احتمالية التعادل للذرات المقلوعة عبر قناة الحالة الأرضية وعبر قناة الحالة المثارة خلال عملية السبترة من

السبترة في الحالة الأرضية وكذلك في الحالة المثارة على التوالي قبل أن يحدث تفاعل الإقتران. أما $V_{ak}(t)$ و $V_{xk}(t)$ فيمثلان عناصر مصفوفة الإقتران بين مستويات المعدن مع المستوى الذري للذرة المقلوعة للحالة الأرضية والمثارة على التوالي حيث [20]:

$$V_{ak}(t) = \langle a|V(t)|k \rangle$$

$$V_{xk}(t) = \langle x|V(t)|k \rangle \quad \dots\dots(2)$$

إن $V(t)$ يمثل حد الإضطراب بسبب التفاعل بين الذرة في حالتها الأرضية أو في حالتها المثارة والسطح .

وعليه يكتب المؤثر الهاملتوني المقابل بصيغة التكميم الثاني second quantization formalism كالآتي [19]:

$$H(t) = \sum_k E_k C_k^+ C_k + E_a C_a^+ C_a + E_x C_x^+ C_x$$

$$+ \sum_k (V_{ak}(t) C_a^+ C_k + V_{ak}^*(t) C_k^+ C_a) \quad \dots(1)$$

$$+ \sum_k (V_{xk}(t) C_x^+ C_k + V_{xk}^*(t) C_k^+ C_x)$$

حيث أن C_i^+ و C_i ($i = k, a, x$) يمثلان مؤثرات الهدم والخلق للمستوي i على التوالي . الحدود الثلاثة الأولى في العلاقة (1) تخص السطح والذرة المقلوعة بسبب

3. اشتقاق معادلات الحركة Equations of Motion Derivation

وتمثل الأقواس المربعة في المعادلات (3-5) أقواس التبادل . وتعويض صيغة المؤثر الهاملتوني (العلاقة (1)) في العلاقات أعلاه وبالإفادة من خاصية تباعد المؤثرات Commutation Relations of Operators [22]:

$$[C_i, C_j] = [C_i^+, C_j^+] = 0$$

$$[C_i, C_j^+] = \delta_{ij} \quad \dots\dots(6)$$

حيث أن δ_{ij} تمثل دالة كرونكر ، نجد الحدود السبعة في العلاقات (3) و (4) و (5) والمبينة في الجدول (1) .

لإشتقاق معادلات الحركة سنعرف المؤثرات $C_a(t)$ و $C_k(t)$ و $C_x(t)$ بتمثيل هايزنبرك Heisenberg Representation التي تحقق معادلات هايزنبرك للحركة وبالوحدات الذرية (a.u.) ([21]) :-

$$i \frac{dC_a(t)}{dt} = -[H(t), C_a(t)] \quad \dots(3)$$

$$i \frac{dC_x(t)}{dt} = -[H(t), C_x(t)] \quad \dots\dots(4)$$

$$i \frac{dC_k(t)}{dt} = -[H(t), C_k(t)] \quad \dots\dots(5)$$

الجدول (1) الحدود السبعة للمعادلات (3) و (4) و (5)

رقم المعادلة	الحد الأول	الحد الثاني	الحد الثالث	الحد الرابع	الحد الخامس	الحد السادس	الحد السابع
3	0	$-iE_a(t)C_a$	0	$-i\sum_k V_{ak}C_k$	0	0	0
4	0	0	$-iE_x(t)C_x$	0	0	$-i\sum_k V_{xk}C_k$	0
5	$-iE_k C_k$	0	0	0	$-iV_{ak}^* C_a$	0	$-iV_{xk}^* C_x$

وبإجراء بعض الخطوات الرياضية نحصل على معادلات الحركة التالية :-

$$i\dot{C}_a(t) = E_a(t)C_a(t) + \sum_k V_{ak}(t)C_k(t) \quad \text{.....(7)}$$

$$i\dot{C}_x(t) = E_x(t)C_x(t) + \sum_k V_{xk}(t)C_k(t) \quad \text{.....(8)}$$

$$i\dot{C}_k(t) = E_k C_k(t) + V_{ak}^* C_a(t) + V_{xk}^*(t)C_x(t) \quad \text{.....(9)}$$

إذ تم التأكد من أن معادلات الحركة أعلاه تحقق ما يلي [23] :-

$$\frac{dn_a(t)}{dt} + \frac{dn_x(t)}{dt} + \sum_k \frac{dn_k(t)}{dt} = 0 \quad \text{.....(10)}$$

إذ أن $n_i(t)$ يمثل عدد إشغال occupation number المستوى $i(= a, x, k)$ ويعطى بما يلي :-

$$n_i(t) = C_i^+(t)C_i(t) \quad \text{.....(11)}$$

يتكون نظام المعادلات (9 - 7) من ثلاثة معادلات حركة مترابطة وهي معادلات خطية وغير متجانسة ولتسهيل عملية الحساب العددي كان لا بد من حل المعادلة (9) حلاً تحليلياً وبتعويض الحل في المعادلة (7) نحصل على :-

$$i\dot{C}_a(t) = E_a(t)C_a(t) + \sum_k V_{ak}(t)C_k(t_0) \exp[-iE_k(t-t_0)] - i \sum_k V_{ak}(t) \int_{t_0}^t V_{xk}^*(t')C_x(t') \exp[iE_k(t'-t)] dt' \quad \text{.....(12)}$$

$$- i \sum_k V_{ak}(t) \int_{t_0}^t V_{ak}^*(t')C_a(t') \exp[iE_k(t'-t)] dt'$$

وبالإفادة من التعريفات التالية [19] :-

$$\Delta_a(t) = 2\pi \sum_k |V_{ak}(t)|^2 \delta(E - E_k) \quad \text{.....(13)}$$

$$\Gamma(t) = 2\pi \sum_k V_{ak}(t)V_{xk}^*(t) \delta(E - E_k) \quad \text{.....(14)}$$

إذ يمثل $\Delta_a(t)$ التعريض (the broadening) الحاصل بالمستوى الذري للذرة المقلوعة وهي بالحالة الأرضية بسبب تفاعل ذرة— سطح. أما المعنى الفيزيائي للدالة $\Gamma(t)$ فسنأتي على توضيحه لاحقاً. عليه تأخذ العلاقة (12) الصيغة التالية:-

$$\begin{aligned}
i\dot{C}_a(t) &= E_a(t)C_a(t) + \sum_k V_{ak}(t)C_k(t_0)\exp[-iE_k(t-t_0)] \\
&\quad - i\frac{1}{2\pi}\int_{t_0}^t dt' C_x(t')\Gamma(t')\int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp[iE(t'-t)] \quad \dots\dots(15) \\
&\quad - i\frac{1}{2\pi}\int_{t_0}^t dt' C_a(t')\Delta_a(t')\int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp[iE(t'-t)]
\end{aligned}$$

وباستعمال العلاقة التالية [21] :-

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp[iE(t'-t)] = \delta(t'-t) \quad \dots\dots(16)$$

يمكن كتابة المعادلة (15) كالتالي :-

$$\begin{aligned}
i\dot{C}_a(t) &= [E_a(t) - i\Delta_a(t)]C_a(t) - i\Gamma(t)C_x(t) \\
&\quad + \sum_k V_{ak}(t)C_k(t_0)\exp[-iE_k(t-t_0)] \quad \dots\dots(17)
\end{aligned}$$

من الجدير بالذكر أنه في حالة عدم أخذ الحالة المثارة بنظر الإعتبار وإهمال الحد الثاني في الطرف الأيمن من العلاقة (17) ، فأنتنا نحصل على علاقة Brako و Newns المعروفة [24] .

بتعويض حل العلاقة (9) في المعادلة (8) وإتباع الخطوات السابقة نفسها نحصل على علاقة مماثلة للعلاقة (17) خاصة بالحالة المثارة :-

$$\begin{aligned}
i\dot{C}_x(t) &= [E_x(t) - i\Delta_x(t)]C_x(t) - i\Gamma(t)C_a(t) \\
&\quad + \sum_k V_{xk}(t)C_k(t_0)\exp[-iE_k(t-t_0)] \quad \dots\dots(18)
\end{aligned}$$

يمثل $\Delta_x(t)$ التعريض الحاصل بالمستوى الذري للذرة المقلوعة وهي بالحالة المثارة بسبب تفاعلها مع السطح . وطبقاً للتعريف (13) فإن $\Delta_x(t)$ تأخذ الصيغة التالية :

$$\Delta_x(t) = 2\pi \sum_k |V_{xk}(t)|^2 \delta(E - E_k) \quad \dots\dots(19)$$

وباستخدام التعريف الآتي [25, 26] : $V_{ak}(t) = v_k V_a(t)$ تأخذ دالة التعريض $\Delta_a(t)$ الصيغة الآتية

$$\Delta_a(t) = \Delta_a V_a^2(t) \quad \text{حيث أن :}$$

$$\Delta_a = 2\pi \sum_k |v_k|^2 \delta(E - E_k) \quad \dots\dots(20)$$

$$\Delta_x(t) = \Delta_x V_x^2(t) \quad \text{وبالمثل فإن :}$$

أما $\Gamma(t)$ فتسمى طاقة التداخل [27] Interference Energy وتأخذ الصيغة الآتية [19] :-

$$\Gamma(t) = \sqrt{\Delta_x(t)\Delta_a(t)} \quad \dots\dots(21)$$

Wide Band Approximation إذ أهمل اعتماد الدوال Δ_a و Δ_x و Γ على الطاقة وذلك يمثل غاية تقريب الحزمة العريضة [28]. ولغرض تبسيط العلاقتين (17) و (18) نعرف الدالة $C_k(t_0)$ كالتالي [25]:

$$C_k(t_0) \equiv C(E, t_0) = v_k^* \bar{C}(E, t_0) \dots(22)$$

إذ تعطي الدالة $\bar{C}(E, t_0)$ معلومات حول توزيع الإلكترونات في المستويات الذرية لحزمة طاقة المعدن عند الزمن t_0 وعليه فهي تعطى بما يلي [27]:

$$\bar{C}(E, t_0) \approx \sqrt{f(E, T)} \dots\dots(23)$$

$$f(E, T) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E}{k_B T}\right)} \quad \text{إذ تمثل الدالة } f(E, T) \text{ دالة توزيع فيرمي - ديراك :-}$$

حيث k_B و T ثابت بولتزمان ودرجة حرارة السطح على التوالي .

وباستعمال التعريفات السابقة وكذلك صيغة كثافة الحالات الإلكترونية على السطح [29]:

$$\rho_s(E) = \sum_k |v_k|^2 \delta(E - E_k) \dots\dots(24)$$

$$\rho_s(E) \Rightarrow \bar{\rho} = \frac{1}{\text{band width}} \quad \text{وباستخدام تقريب الحزمة العريضة :}$$

تأخذ العلاقتان (17) و (18) الصيغ التالية :-

$$\begin{aligned} \dot{C}_a(t) = & -[iE_a(t) + \Delta_a(t)]C_a(t) - \Gamma(t)C_x(t) \\ & - iV_a(t)\bar{\rho} \int_{u_0}^{\Phi} dE \sqrt{f(E, T)} \exp[-iE(t - t_0)] \end{aligned} \dots\dots(25)$$

$$\begin{aligned} \dot{C}_x(t) = & -[iE_x(t) + \Delta_x(t)]C_x(t) - \Gamma(t)C_a(t) \\ & - iV_x(t)\bar{\rho} \int_{u_0}^{\Phi} dE \sqrt{f(E, T)} \exp[-iE(t - t_0)] \end{aligned} \dots\dots(26)$$

علمًا أن u_0 و Φ يمثلان قعر حزمة الطاقة للسطح ودالة الشغل للسطح على التوالي . ومن الجدير بالذكر أن معالجتنا أهملت ما يلي :-

1. تفاعل كولوم التنافري على الذرة المقلوقة [30,31].

2. التهيجات الإلكترونية داخل حزمة الطاقة للسطح [4,60,61].

4. دوال التعريض وطاقة التداخل Broadening Functions and Interference Energy

$$\begin{aligned} V_a(t) = V_{oa} e^{-\lambda_a t} & \quad V_x(t) \text{ و } V_a(t) \text{ الصيغ الخاصة بالدوال} \\ V_x(t) = V_{ox} e^{-\lambda_x t} & \quad \text{تعطى الدوال الخاصة بالتفاعلات } V_x(t) \text{ و } V_a(t) \text{ بما} \\ & \quad \text{يلي [35]} \end{aligned} \dots(27)$$

إذ أن λ_x و λ_a معاملات تخص المسار الكلاسيكي للذرة المقلوقة وهي بحالتها الأرضية والمثارة على التوالي وهي متعلقة

بسرعة الذرة المقلوعة . ولما كان قياس احتمالية التهيج أو التعادل للجسيم المقلوع دالة للطاقة الحركية للجسيم نفسه بغض النظر عن حالته فيما إذا كان بالحالة الأرضية أم المثارة لذا يكون $\lambda_a = \lambda_x$. بينما تمثل V_{ox} و V_{oa} شدة الإقتران للحالتين الأرضية والمثارة على التوالي عند السطح (أي عند

ثانياً : دوال التعريض $\Delta_x(t)$ و $\Delta_a(t)$

تعطى دوال التعريض وفقاً لتقريب الحزمة العريضة بالعلاقات التالية [20]

$$\Delta_a(t) = \pi \bar{\rho} |V_a(t)|^2 \quad \dots(28)$$

$$\Delta_x(t) = \pi \bar{\rho} |V_x(t)|^2$$

$$\Gamma(t) = -\sqrt{\Delta_x(t) \Delta_a(t)} \quad \dots(29 b)$$

أما الحالة الثالثة فهي حالة الطور العشوائي Random phase والتي تأخذ الصيغة التالية :

$$\Gamma(t) = 0 \quad \dots(29 c)$$

$$P^*(t) = |C_x(t)|^2 \quad \dots(31)$$

إذ تمثل $P^*(t)$ احتمالية التهيج أيضاً . من الجدير بالذكر أن احتمالية التعادل عبر قناة الحالة الأرضية وإحتمالية التهيج هو ما يتم قياسه عملياً .

أما فيما يخص مستويات الطاقة $E_x(t)$ و $E_a(t)$ سيتم إهمال اعتمادهما على الزمن وأن كل قياسات الطاقة كانت بالنسبة لمستوي فيرمي $E_F = 0$.

من الضروري هنا أن نستعرض نتائجنا لتسجيل ملاحظات حول ثلاث نقاط مهمة هي :

أولاً : المظاهر العامة المعروفة حول تغير احتمالية التعادل عبر قناة الحالة الأرضية $P_{gr}(t)$ وإحتمالية التهيج

مع الزمن ولمعاملات مهمة كقوة الإقتران V_{ox} و V_{oa} ولسرعة محددة ، وكذلك علاقة

بسرعة الذرة المقلوعة . ولما كان قياس احتمالية التهيج أو التعادل للجسيم المقلوع دالة للطاقة الحركية للجسيم نفسه بغض النظر عن حالته فيما إذا كان بالحالة الأرضية أم المثارة لذا يكون $\lambda_a = \lambda_x$. بينما تمثل V_{ox} و V_{oa} شدة الإقتران للحالتين الأرضية والمثارة على التوالي عند السطح (أي عند

ثالثاً : طاقة التداخل $\Gamma(t)$

تأخذ طاقة التداخل $\Gamma(t)$ إشارة سالبة أو موجبة اعتماداً على فرق الطور النسبي بين $V_{ak}(t)$ و $V_{xk}(t)$. فإذا كانت إشارات $V_{ak}(t)$ و $V_{xk}(t)$ كلاهما سالب أو كلاهما موجب لكل قيم k فإن طاقة التداخل تأخذ الصيغة التالية:

$$\Gamma(t) = +\sqrt{\Delta_x(t) \Delta_a(t)} \quad \dots(29 a)$$

أما إذا كانت إشارة $V_{ak}(t)$ تختلف عن إشارة $V_{xk}(t)$ ولكل قيم k فإن طاقة التداخل تأخذ الصيغة التالية :

رابعاً : قناة التعادل

يمكن للذرة المقلوعة من السطح في إنموذجنا أن تكون متعادلة عبر قناة الحالة الأرضية أو عبر قناة المثارة . وتحسب احتمالية التعادل عبر قناة الحالة الأرضية كدالة للزمن بالعلاقة التالية :

$$P_{gr}(t) = |C_a(t)|^2 \quad \dots(30)$$

بينما تحسب احتمالية التعادل عبر قناة المثارة بالعلاقة التالية :

5. معايرة الإنموذج Model Parametrization

تم حل المعادلات (25) و (26) عددياً بإستعمال طريقة رانج - كوتا من الدرجة السادسة وبالشروط الإبتدائية التالية :

1. عندما يكون الجسيم المقلوع بالحالة الأرضية (الشكل (a) 2)

$$C_a(t_0) = (1,0) \quad \dots(32 a)$$

$$C_x(t_0) = (0,0)$$

2. عندما يكون الجسيم المقلوع بالحالة المثارة (الشكل (b) 2)

$$C_a(t_0) = (0,0) \quad \dots(32 b)$$

$$C_x(t_0) = (1,0)$$

الشكل (3) أن إحتمالية التهيج تزداد وإحتمالية التعادل عبر قناة الحالة الأرضية نقل كلما تزداد قيمة قوة الإقتران . علماً أن قيمة V_0 تحدد بالتركيب الإلكتروني للسطح .

يستعرض الشكل (4) حساباتنا لـ $P_{gr}(\infty)$ و $P^*(\infty)$ للمعاملات السابقة كدالة للمعامل λ المتعلق بسرعة الذرة المقلوعة ولقيم V_0 مختلفة . إن علاقة إحتماليته التهيج والتعادل عبر قناة الحالة الأرضية بسرعة الجسيم المقلووع لا تختلف عن مثيلتها لمسار خروج الجسيم أثناء عملية الإستطارة . فزيادة سرعة الجسيم تعني أن الفترة الزمنية التي يقضيها الجسيم المقلووع بالقرب من السطح قصيرة ومن ثم فإن إحتمالية حدوث عملية تبادل شحنة للحالتين الأرضية والمثارة تكون ضعيفة كما هو موضح في الشكل (4 a) إذ أن الإقتران ضعيف نسبياً .

تعد فاصلة الطاقة ΔE من العوامل المهمة والمؤثرة في حساب إحتمالية التهيج وكما هو واضح في الكثير من الدراسات العملية [17,36] . لذا تم حساب $P^*(\infty)$ و $P_{gr}(\infty)$ كدالة لفاصلة الطاقة وللسرعة وقوى الإقتران المثبتة على الأشكال (5 a,b,c,d) بإستخدام الشرط (32 b) . والذي يؤكد أن تصرف الإحتماليات مع فاصلة الطاقة يعتمد بالدرجة الأساس على السرعة . إذ تزداد $P^*(\infty)$ مع زيادة فاصلة الطاقة ΔE عند السرعة العالية والعكس صحيح بغض النظر عن قيم قوى الإقتران (راجع المصدر [1]) .

$$\lambda_a = \lambda_x \text{ كدالة للمعامل } P^*(\infty) \text{ و } P_{gr}(\infty)$$

المتعلق بسرعة الذرة المقلوعة .

ثانياً : إعتداد حساب كل ما ورد في " أولاً " على حالة الطور ، لذا سنرمز لإشارة $\Gamma(t)$ بالرمز α ، وعليه سنسمي ($\alpha = +$) حالة الطور الأولى التي تكون عندها إشارات $V_{ak}(t)$ و $V_{xk}(t)$ كلاهما موجب أو كلاهما سالب ولكل قيم k ، والحالة ($\alpha = -$) حالة الطور الثانية التي تكون عندها إشارة $V_{ak}(t)$ تختلف عن إشارة $V_{xk}(t)$ ولكل قيم k . أما ($\alpha = 0$) فسوف تشير إلى حالة ما يسمى بـ " الطور العشوائي " .

ثالثاً : فحص كل المعاملات التي تنمي الحالة المثارة عندما تخرج الذرة المقلوعة وهي بالحالة الأرضية علماً أنه ستستعمل الشروط الإبتدائية المعطاة بالعلاقة (32 a) .

تم حساب قيم $P_{gr}(t)$ و $P^*(t)$ كدالة للزمن وللمعاملات $\beta = 2.5 eV$ (حيث أن عرض الحزمة = 4β) و $T = 300 K$ و $E_a = -2 eV$ و $\lambda_a = \lambda_x = \lambda = 0.3 a.u.$ و $E_x = 1 eV$ وحالة الطور الأولى . يستعرض الشكل (3) حساباتنا هذه لقيم $V_{oa} = V_{ox} (= V_0)$ المختلفة والمثبتة على الشكل ولحالات الإقتران الضعيف والمثبتة على الشكل (كما في الشكل (3 a)) والإقتران القوي $(V_o \langle \beta \rangle)$ (كما في الشكل (3 b,c)) . يتضح من

6. تطبيق نظام حقيقي Application to Real System

مطياف (time-of-flight mass spectrometry) [38,39,40] .

ويمكن أن يوصف مسار الذرة الكلاسيكي من خلال إعتداد موقع مستوى الطاقة الذري للحالة الأرضية على الزمن من خلال العلاقة التالية :-

$$E_a(t) = E_a(\infty) + \{E_a(0) - E_a(\infty)\} e^{-\lambda_a t} \dots\dots(33)$$

وعليه يمكن وصف تغير موقع مستوى الطاقة الذري للحالة المثارة مع الزمن بطريقة مماثلة وكالتالي :-

$$E_x(t) = E_x(\infty) + \{E_x(0) - E_x(\infty)\} e^{-\lambda_x t} \dots\dots(34)$$

إن كل ما ورد من ملاحظات حول المظاهر العامة يصح للأشكال المذكورة أعلاه ، فهذه النتائج تتفق مع النموذج المقدم من قبل Winograd [42] الذي يفترض إنموذجاً نوعياً لإعادة التهذئة qualitative deexcitation model الذي يأخذ بنظر الإعتبار التركيب الإلكتروني للذرة المثارة . يستند هذا الإنموذج إلى أن الذرات المثارة (التي تتولد بسبب التصادمات المسببة للإثارة خلال التصادمات المتتالية) يمكن أن يحدث لها إعادة تهذئة بنسبة كبيرة أو صغيرة اعتماداً على التفاعلات الإلكترونية للذرات المقلوعة مع السطح خلال إبتعادها عن السطح بعد عملية القلع . وإتماداً على هذا الإنموذج يصبح من الواضح أن درجة إعادة التهذئة (أو إحتمالية إعادة التهذئة والتي يمكن أن تناظر بالمعنى الفيزيائي إحتمالية التعادل عبر قناة الحالة الأرضية في معالجتنا) سوف تقل كلما إزدادت سرعة إنبعاث الذرة المقلوعة ، إذ أن الذرة تقضي وقتاً أقل بالقرب من السطح بحيث لا يكون الزمن كافياً لحدوث إعادة التهذئة .

الشكل (7) يوضح حساب إحتمالية التهيج وإحتمالية التعادل عبر قناة الحالة الأرضية (إحتمالية إعادة التهذئة) كدالة للعامل λ كدالة للطاقة الحركية لذرة Ag المقلوعة (ولقيم V_0 مختلفة والذي يؤكد زيادة إحتمالية التهيج ونقصان إحتمالية التعادل عبر قناة الحالة الأرضية مع زيادة السرعة واضعين في الحسبان أن الذرة مقلوعة وهي في حالة مثارة . لقد تم إستخدام قيمتين مختلفتين لـ V_0 على إعتبار أن قوة التفاعل V_0 تاخذ بنظر الإعتبار عند حسابها التركيب الإلكتروني عند منطقة القلع .

وبمقارنة الشكل (7) مع الأشكال (8) و (9) التي حسبت لكل المعاملات المستخدمة في الشكل (7) ولقيم $\alpha = 0$ و $\alpha = -$ على التوالي ، نجد أن تصرف $P^*(\infty)$ عندما تكون قوة الإقتران عالية نسبياً و $\alpha = -$ يدل على إحتمالية تكون حالة جزيئية بسبب تفاعل $Ag - Ag$ أو تهيج إلكترون - فجوة بسبب تصادم $Ar - Ag$ أو تكون عنقوداً عند منطقة القلع وبالقرب من السطح [17,36] .

إذ أن $\lambda_a = \lambda_x = \lambda$ للأسباب الأنفة الذكر . وأن كل قيم الطاقة في العـلاقـتين (33) و (34) حسبت بالنسبة لمستوى فيرمي . علماً أن جهد التأين لذرة الفضة Ag يساوي $7.57 eV$ بالنسبة لمستوى الفراغ وأن دالة الشغل للفضة تساوي $4.6 eV$. وقد تم اختيار قيمة β لتكون مساوية إلى $2.3 eV$ التي لا تتعارض مع إستخدام تقريب الحزمة العريضة في المعالجة . ومن الجدير بالذكر أن صيغ $E_a(t)$ و $E_x(t)$ تأخذ التأثيرات الصورية [30] بنظر الإعتبار . وأن :

$$E_a(\infty) = -2.97 eV , E_a(0) = -0.6 eV$$

$$E_x(\infty) = -1.87 eV , E_x(0) = 0.5 eV$$

من المعروف أن توزيع زمن الطيران flight-time distribution الذي يعتمد على الإشارة المعاييرة normalized signal المقاسة عملياً يتم تحويله إلى توزيع الطاقة الحركية kinetic energy distribution إذ يأخذ هذا التوزيع الكثافة العددية للجسيمات المقلوعة المتعادلة بنظر الإعتبار [36,37] . وعليه تم حساب إحتمالية التعادل عبر الحالة الأرضية وكذلك إحتمالية التهيج كدالة للزمن ولقيمة $\lambda = 0.2 a.u.$ و V_0 مختلفة وكما هو موضح في الشكل (6) . الذي يؤكد أنه لـ λ محددة فإن قيمة V_0 تحدد ناتج السبترية . إذ مع زيادة V_0 تقل إحتمالية التهيج بينما تزداد إحتمالية التعادل عبر قناة الحالة الأرضية . ومن الجدير بالذكر أن عدم تغير إحتمالية التهيج مع الزمن لـ $V_0 = 0.02 a.u.$ ولكل قيم $t > 15 a.u.$ ($= 3.6285 * 10^{-16} sec$) تؤكد أن حالة التهيج هي حالة شبه مستقرة metastable state والذي يتفق نوعياً مع النتائج العملية [38,40,41] المقاسة للنظام نفسه .

7. حساب ناتج الفوتون Calculation The Photon Yeild

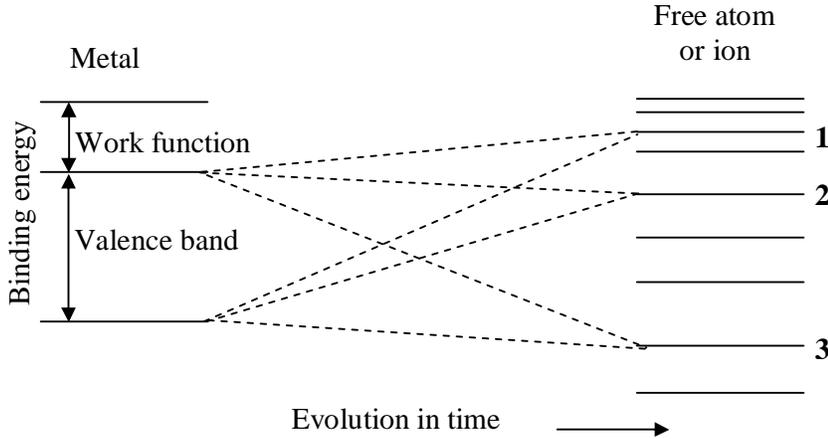
والعكس بالعكس . وعليه لما كانت P^* تمثل إحتمالية التهيج فمن المنطقي أن تمثل P_{gr} إحتمالية إعادة التهذئة De - excitation Probability . وبناءً على ما سبق يمكن حساب ناتج الفوتون وفقاً للعلاقة الآتية :-

لقد تم في الفقرات السابقة إستعراض نتائج حساباتنا لـ P_{gr} و P^* كدالة للزمن ولكل المتغيرات المتعلقة بموضوع السبترية ، هذه الحسابات تؤكد أن أي زيادة لإحتمالية التهيج ستكون على حساب إحتمالية التعادل عبر قناة الحالة الأرضية ،

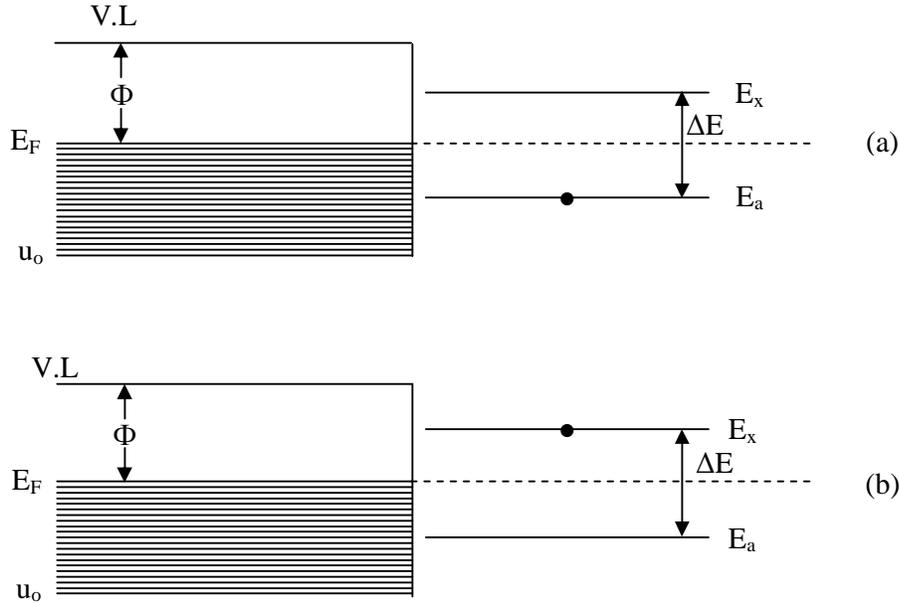
السرعة يزداد ناتج الفوتون ، ولكن ناتج الفوتون وللسرع كلها يكون أكبر عندما $V_o = 0.02 a.u.$ ، علماً أنه لم نجد قياسات عملية تخص علاقة ناتج الفوتون (محسوبة بالإعتماد على إحصائية التهيح) بمركبة السرعة وللنظام قيد الدراسة .

$$Y(t) = P^*(t)(1 - P_{gr}(t)) \quad \dots\dots(35)$$

تم حساب ناتج الفوتون المعابر $Y(\infty)$ كدالة للعامل λ وفقاً للعلاقة (35) ولقيمتي V_o المساوية إلى $0.02 a.u.$ و $0.2 a.u.$ ولقيم $\alpha = -$ و $\alpha = 0$ و $\alpha = +$. هذه النتائج موضحة بالشكل (10) وتؤكد جميعها أنه كلما زادت

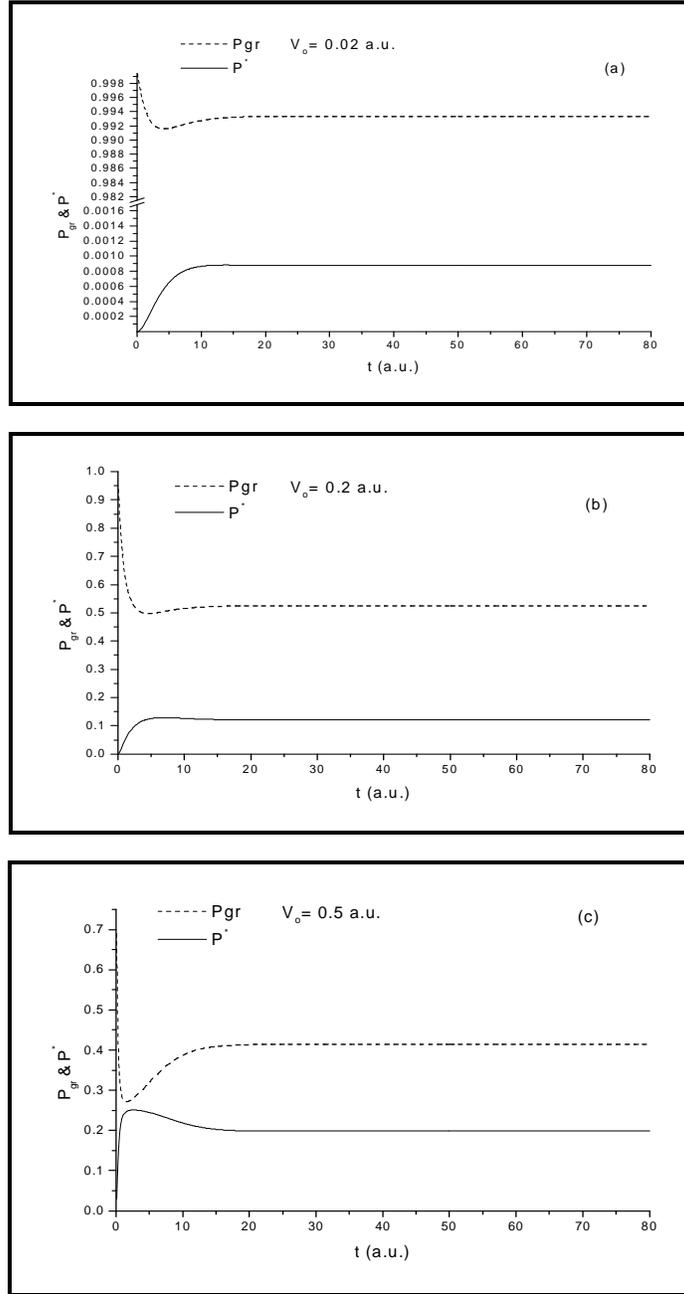


الشكل (1) يوضح التهيح في عملية السبترية الذي ينتج من نمو الحالة (evolution in time) من اليسار إلى اليمين . تقود هذه العملية إلى مستويات نهائية مثل المستوي 2 الذي يمكن أن يكون في حالة رنينية مع المستويات المملوءة لحزمة الطاقة للمعدن ، في حين لا يكون المستوي 1 و 3 في حالة رنينية معها [45]



الشكل (2) يوضح مخطط الطاقة الخاص بعملية قلع ذرة من سطح خلال عملية السبترية . E_x و E_a يمثلان موقع المستوى الذري للذرة المقلوعة بالحالة الأرضية والمثارة على التوالي بالنسبة لمستوى فيرمي E_F . يمثل u_o قعر الحزمة بينما تمثل Φ دالة الشغل للسطح ، وأن ΔE تمثل فاصلة الطاقة .

(a) ذرة متعادلة مقلوعة بالحالة الأرضية . (b) ذرة متعادلة مقلوعة بالحالة المثارة .

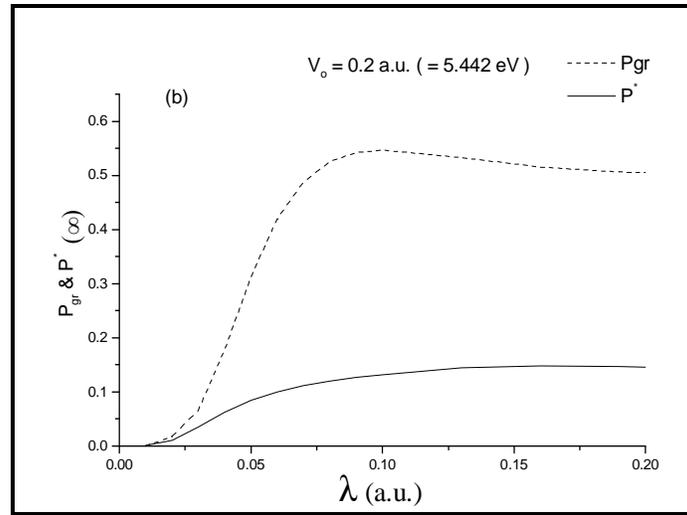
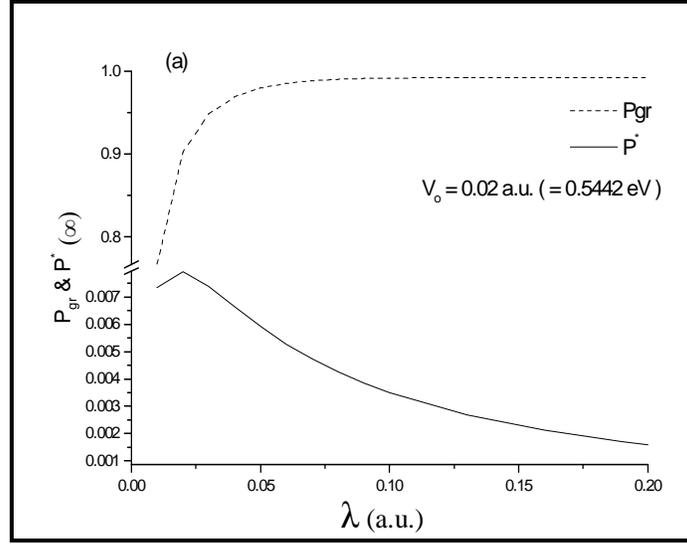


الشكل (3) يوضح قيم $P_{gr}(t)$ و $P^*(t)$ كدالة للزمن ولفاصلة طاقة $\Delta E = 3 eV$ و $\alpha = +$ و $\lambda = 0.3 a.u.$ وللحالات

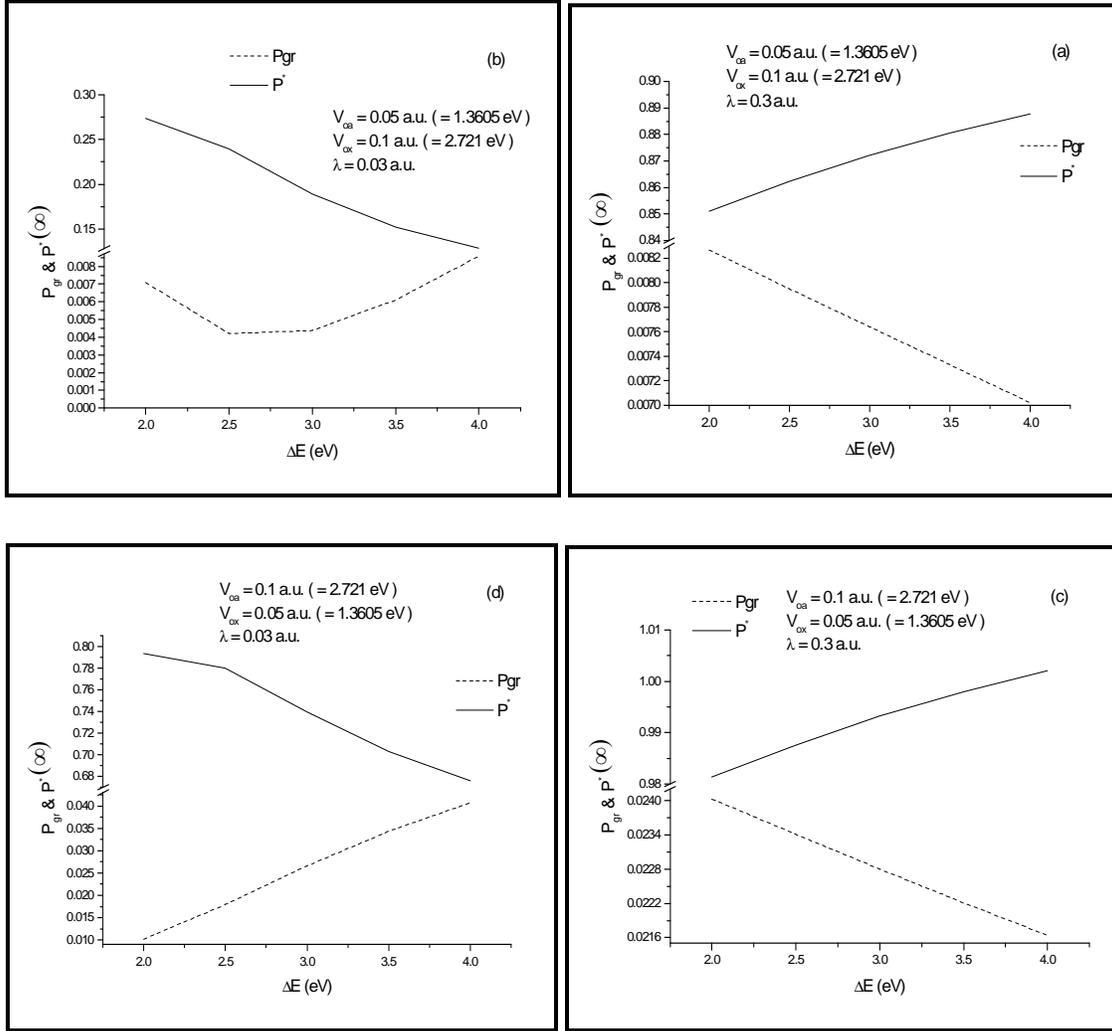
(a): $V_0 = 0.02 a.u. (= 0.5442 eV)$, $V_0 < \beta$

(b): $V_0 = 0.2 a.u. (= 5.442 eV)$, $V_0 > \beta$

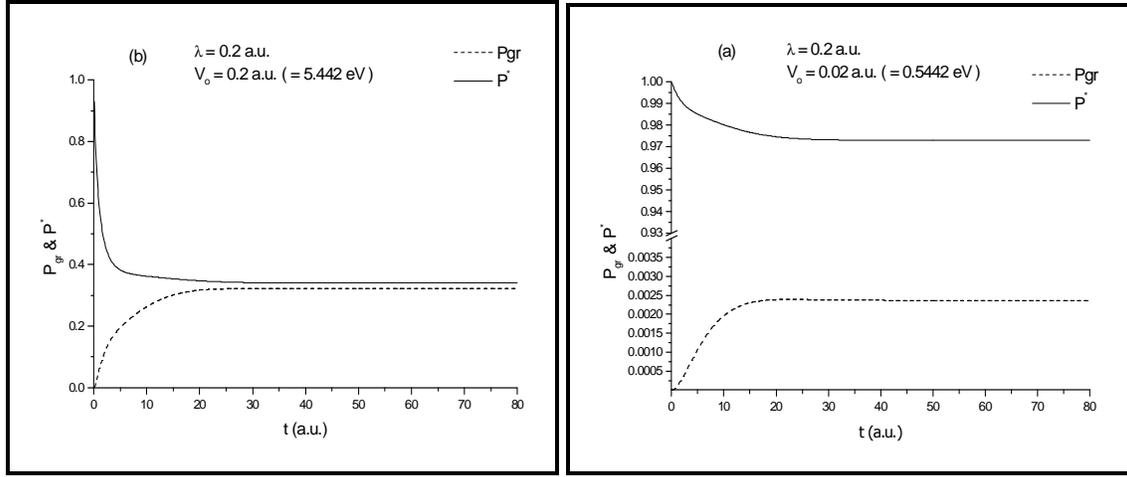
(c): $V_0 = 0.5 a.u. (= 13.605 eV)$, $V_0 > \beta$



الشكل (4) يوضح قيم $P_{gr}(\infty)$ و $P^*(\infty)$ كدالة لعامل السرعة λ ولفاصلة الطاقة $\Delta E = 3eV$ و $\alpha = +$ ولحالتى الإقتران $V_0 > \beta$: (b) ، $V_0 < \beta$: (a).



الشكل (5) يوضح تصرف $P^*(\infty)$ و $P_{gr}(\infty)$ كدالة لفاصلة الطاقة ΔE ولقيم V_{ox} و V_{oa} و λ المختلفة المثبتة على الأشكال .

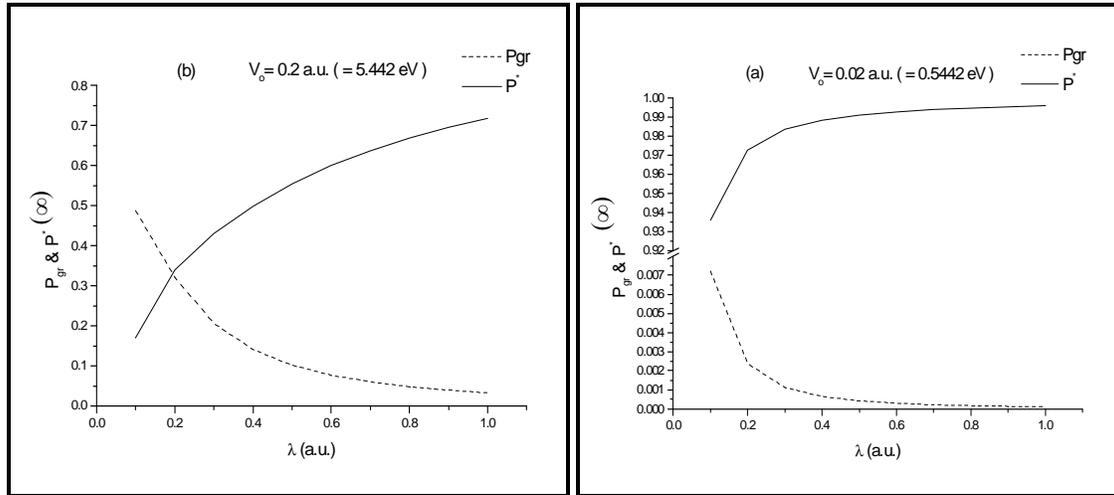


الشكل (6) يوضح ح $P_{gr}(t)$ و $P^*(t)$ كدالة للزمن ولـ $\lambda = 0.2 \text{ a.u.}$ وللطاقة

$$E_a(\infty) = -2.97 \text{ eV} \quad , \quad E_a(0) = -0.6 \text{ eV}$$

$$E_x(\infty) = -1.87 \text{ eV} \quad , \quad E_x(0) = 0.5 \text{ eV}$$

$$V_0 = 0.2 \text{ a.u.} : (b) \quad , \quad V_0 = 0.02 \text{ a.u.} : (a)$$

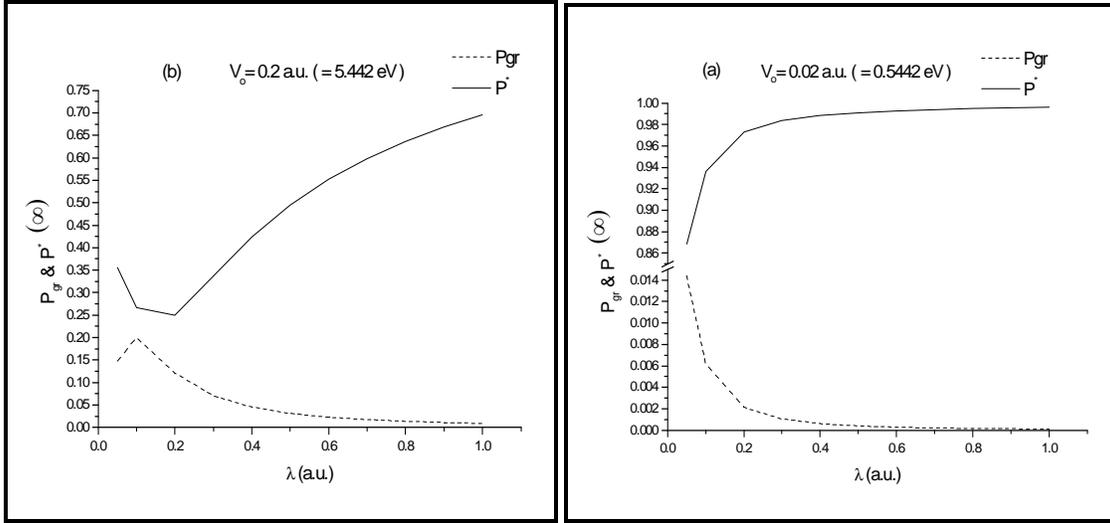


الشكل (7) يوضح ح $P_{gr}(\infty)$ و $P^*(\infty)$ كدالة لعامل السرعة λ وللطاقة

$$E_a(\infty) = -2.97 \text{ eV} \quad , \quad E_a(0) = -0.6 \text{ eV}$$

$$E_x(\infty) = -1.87 \text{ eV} \quad , \quad E_x(0) = 0.5 \text{ eV}$$

$$\text{ولـ } \alpha = + \quad V_0 = 0.2 \text{ a.u.} : (b) \quad , \quad V_0 = 0.02 \text{ a.u.} : (a)$$

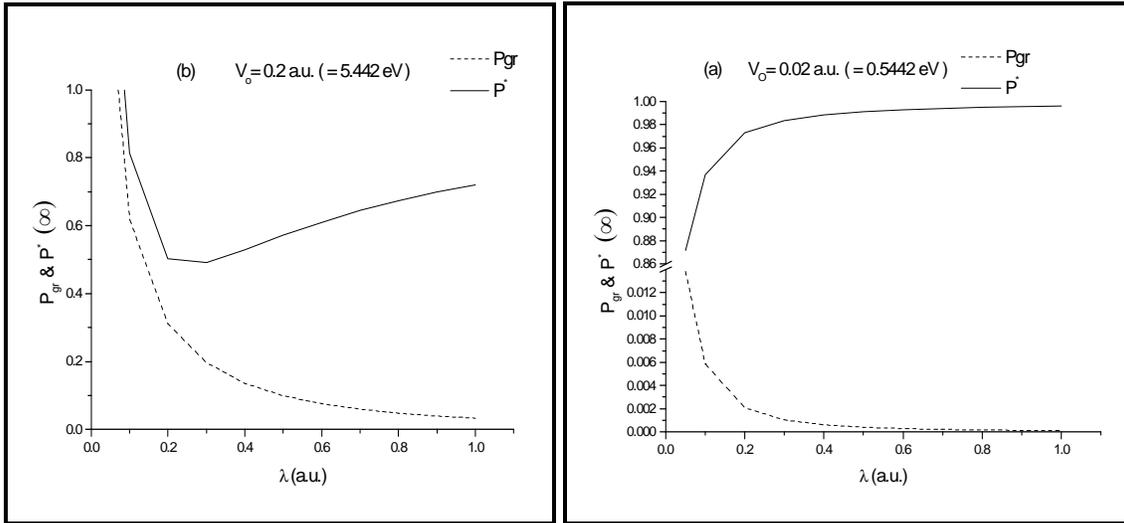


الشكل (8) يوضح ح $P_{gr}(\infty)$ و $P^*(\infty)$ كدالة لعامل السرعة λ وللطاقات

$$E_a(\infty) = -2.97 \text{ eV} \quad , \quad E_a(0) = -0.6 \text{ eV}$$

$$E_x(\infty) = -1.87 \text{ eV} \quad , \quad E_x(0) = 0.5 \text{ eV}$$

ولـ $\alpha = 0$ عندما $V_0 = 0.02 \text{ a.u.}$: (a) ، $V_0 = 0.2 \text{ a.u.}$: (b) .

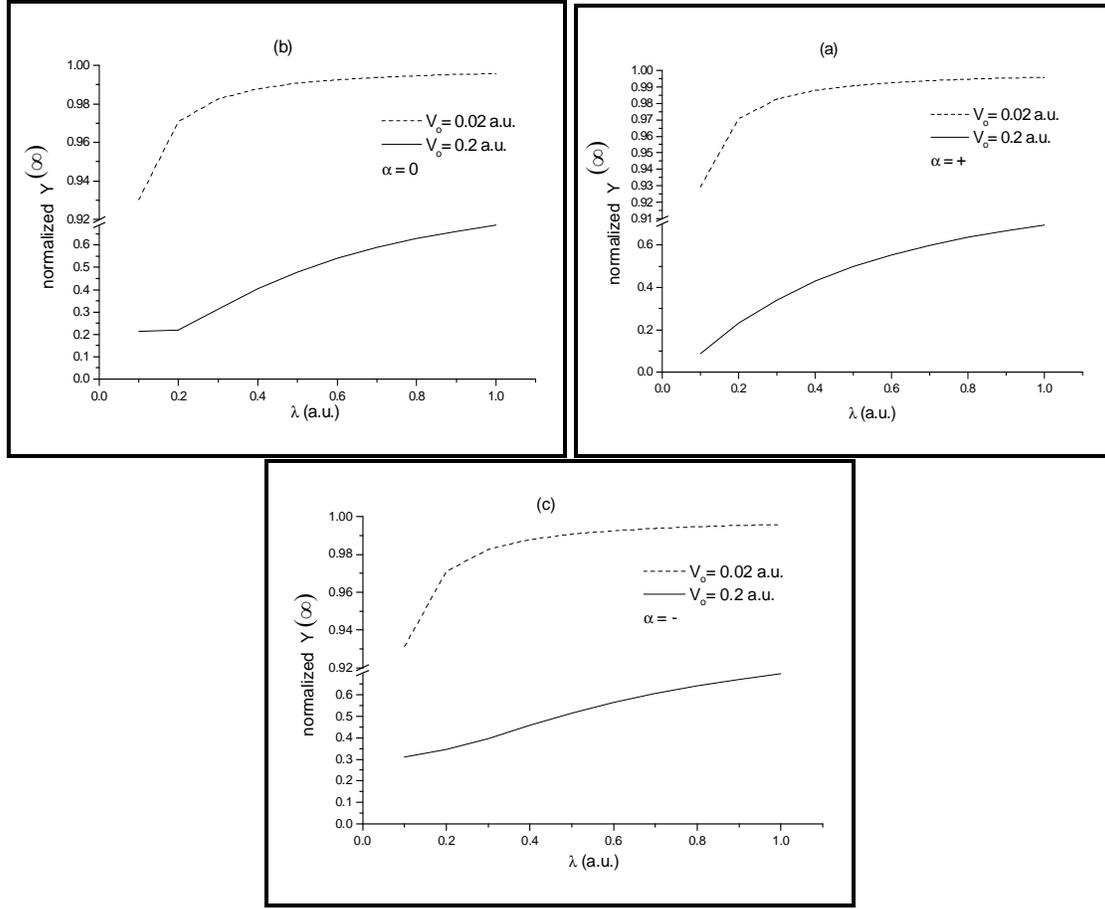


الشكل (9) يوضح ح $P_{gr}(\infty)$ و $P^*(\infty)$ كدالة لعامل السرعة λ وللطاقات

$$E_a(\infty) = -2.97 \text{ eV} \quad , \quad E_a(0) = -0.6 \text{ eV}$$

$$E_x(\infty) = -1.87 \text{ eV} \quad , \quad E_x(0) = 0.5 \text{ eV}$$

ولـ $\alpha = -$ عندما $V_0 = 0.02 \text{ a.u.}$: (a) ، $V_0 = 0.2 \text{ a.u.}$: (b) .



الشكل (10) يوضح ناتج الفوتون كدالة لعامل السرعة λ ولقيم V_0 المساوية إلى 0.02 a.u. و 0.2 a.u. و $\alpha = +$: (a) ، $\alpha = -$: (c) ، $\alpha = 0$: (b) .

8. الإستنتاجات *Conclusions*

3 . إن عملية إعادة التهدة للذرات المثارة بالقرب من سطح صلب قد لا يصاحبها إنبعاث فوتونات ، هذه الحالة تمت مناقشتها من قبل الكثير من الدراسات العملية [44,45] . لقد أكدت هذه الدراسات أن الشرط الضروري لكي يحدث إلكترون واحد عملية إعادة تهدة لا يصاحبها إنبعاث فوتون هو أن يكون المستوي المثار للذرة المقلوعة بالسبترية يقابل مستويات الطاقة الفارغة لحزمة الطاقة للسطح . وإذا تحقق هذا الشرط فإن الألكترون يقفز مرة أخرى من الذرة إلى المعدن . وهذه العملية هي عملية تأين رنينية . إن احتمالية إعادة التهدة التي لا يصاحبها إنبعاث فوتونات تزداد مع زيادة الزمن الذي تقضيه الذرة المثارة بالقرب

1 . لقد تضمنت معالجتنا مفهوم طاقة التداخل إذ تمت الإشارة إلى أن $\alpha = +$ و $\alpha = 0$ و $\alpha = -$ تقابل حالات تأصر مختلفة ، وبمراجعة النتائج كلها يمكن القول أن $\alpha = +, 0$ تقابل حالة ضد التآصر وأن $\alpha = -$ تقابل حالة التآصر . ما سبق يتفق مع نتائج الكثير من الدراسات العملية فناتج السبترية يتضمن تكوين جزئيات من الذرات المقلوعة أو من الذرات المقلوعة والأيونات الأولية المسببة للقلع .

2 . يمكن ولكل قيم t حساب احتمالية التعادل الكلية وفقاً للعلاقة الآتية [43] :

$$P(t) = n_a(t) + n_x(t)$$

مما سبق نستنتج إن وضع إنموذج لحساب ناتج الفوتون الذي يأخذ مجمل الديناميكيات المحتملة الأنفة الذكر ليس يسيراً . ولو فرضنا أنه بالإمكان وضعه فإنه سوف لا يصح لكل الأنظمة المستخدمة في التجارب العملية . وعليه لا بدّ عند دراسة عملية السبترية لأي نظام من وضع إنموذج متكامل خاص بالنظام بحسب احتمالية التهيج وكذلك ناتج الفوتون بحيث يأخذ بنظر الإعتبار التوزيع الإلكتروني electronic configuration للذرة المقلوعة والمادة التي تم القلع منها على حد سواء .

وأخيراً ، واعتماداً على ما سبق يمكن إستخدام الإنموذج نفسه لتقديم معايير مفصلة عندما يكون $E_x(0)$ واقعاً أسفل مستوى فيرمي لغرض مناقشة نوع عملية إعادة التهئة عندما يكون $E_x(0)$ فارغاً أو مملوءاً ، كذلك يمكن دراسة تأثير التهيجات الإلكترونية التي تحدث في حزمة الطاقة للسطح خلال عملية السبترية .

من السطح . وعليه يمكن إعتبار عملية إعادة التهئة في الإنموذج المستخدم من النوع الذي لا يصاحبه إنبعاث فوتونات .

4 . عندما تقصف المادة بالأيونات المعجلة للغازات النادرة مثل Ar^{+} فإن إنبعاث الإشعاع يعزى إلى حدوث الديناميكيات الآتية :

a - إستطارة الجسيمات الأولية الساقطة وبطاقة عالية .

b - تصادم الذرات المقلوعة بعملية السبترية مع الجسيمات الأولية الساقطة .

c - تفكك الجزيئات الناتجة عن عملية السبترية بسبب التصادمات المتكررة بالقرب من السطح .

d - إن العمليات الإلكترونية التي تحدد ناتج الفوتون هي تعادل أو جبر [46] أو إعادة التهئة عن طريق العمليات الرنينية أو الإنتقال المباشر إلى المستويات غير المشغولة في الصلب (والتي تكون قريبة من مستوي فيرمي) .

9. المصادر References

- 1- Abathr R. Ah. Al-Ebade, MSc. Thesis, Department of Physics, University of Basrah, Basrah, Iraq (2009).
- 2- J. W. Rabalais, ((Applications of Accelerators in Research and Industry)) Sixteenth Int'l Conf., Denton, TX, Nov. (2000).
- 3- M. L. Yn, ((Sputtering by Particle Bombardement)) Edited by R. Behrisch and K. Wittnaack (Springer, Berlin (1991)).
- 4- E. Franke, H. Neumann, M. Zeuner, W. Franke, F. Bigl, Surface and Coatings Technology 97, 90-96 (1997).
- 5- V. I. Shulga, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 174, 77-90 (2001).
- 6- V. I. Shulga, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 170, 347-361 (2000).
- 7- Zhu Lin Zhang, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 149, 272-284 (1999).
- 8- V. I. Shulga, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 152, 49-59 (1999).
- 9- V. I. Shulga, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 174, 423-432 (2001).
- 10- Y. Yamamura, C. Mossner and H. Oechsner, Radiation Effects, Vol.103, 25-43 (1987).
- 11- H. Bakr Salman, Ph.D. Thesis, University of Basrah, Basrah, Iraq (2003).
- 12- G. Abrasonis, W. Moller and X. X. Ma, Physical Review Letter, 96:065901 (2006).
- 13- Yuriy Kudriavtsev, Rene Asomoza, Applied surface science 167, 12-17 (2000).
- 14- G. E. Thomas and E. E. de Kluizenaar, Nucl. Instr. Methods 132, 449 (1976) .
- 15- N. V. Smith, P. K. Larsen and S. Chiang, Phys. Rev. B 16, 2699 (1977).
- 16- Ming L. YU, Surface Science, 90, 442 – 446 (1979).
- 17- Diederik Depla, Stijn Mahieu, ((Reactive Sputter Deposition)) Edited by R. Hull, R. M. Osgood, Jr., J. Parisi and H. Warlimont, (Springer Series in Materials Science 109, 2008).
- 18- A. B. Mahmood, MSc. Thesis, College of Science, University of Basrah, Basrah, Iraq (1999).
- 19- M. Kato, D. J. O'Connor, K. Yamamoto and R. Souda, Surface Science, 363, 150 (1996).
- 20- D. M. News, K. Makoshi, R. Brako and J. N. M. Van Wunnik, Physica Scripta, Vol.T6, 5-14 (1983).
- 21- A. S. Davydov, "Quantum Mechanics" Second Russian Edition published by Nauka, Moscow (1973).
- 22- Amnon Yariv, ((An Introduction to Theory and Applications of Quantum Mechanics)), Copyright by John Wiley and Sons (1982).
- 23- W. L. Clinton and Sepra Pal, Surface Science, 226, 89-92 (1990).
- 24- R. Brako and D. M. News, Surface Science, 108, 253 (1981).
- 25- C. Stampfl, J. Neugebauer and M. Scheffler, Surface Science, 307-309, 8 (1994).
- 26- B. L. Burrows, K. W. Sulston, A. T. Amos and S. G. Dewison, surface science, 253, 365-374 (1991).

- 27- Thikra S. Dh. Al-Naser, MSc. Thesis, Department of Physics, University of Basrah, Basrah, Iraq (2003).
- 28- K. W. Sulston, A. T. Amos and S. G. Dawison, Surface Science, 197, 555-566 (1988).
- 29- J. M. Al-Mukh, Ph. D. Thesis, College of Science, University of Basrah, Basrah, Iraq (1997).
- 30- Haider Qassim Al-Edany, MSc. Thesis, Department of Physics, University of Basrah, Basrah, Iraq (2002).
- 31- R. Brako and D. M. Newns, Solid State Communications, Vol.55, No.7, pp.633-638 (1985).
- 32- Z. Sroubek and J. Lorincik, Vacuum 56, 263-267 (2000).
- 33- R. Brako and D. M. Newns J. Phys. C : Solid State Phys. , 14, 3065-3078 (1981).
- 34- Z. Sroubek, Physical Review B, Vol.51, No.9 (1995).
- 35- M. Kato, D. J. O'connor and R. J. MacDonald, Nuclear Instruments and Methods in physics Research B78, 77-80 (1993).
- 36- Rainer Behrisch, Wolfgang Eckstein, ((Sputtering Particle Bombardment)), Editor by Claus E. Ascheron, Werner Skolaut, (Topics in Applied Physics, 110 (2006)).
- 37- C. Standt, A. Wucher, J. Bastiaansen, V. Philipsen, E. Vandeweert, P. Lievens, R. E. Silverans and Z. Sroubek, Physical Review B66, 085415 (2002).
- 38- G. Nicolussi, W. Husinsky, D. Gruber and G. Betz, Physical Review B, Vol.51, No.14 (1995).
- 39- A. Wucher, W. Berthold, H. Oechsner and K. Franzreb, Physical Review A, Vol.49, 2188 (1994).
- 40- W. Berthold and A. Wucher, Physical Review B, Vol.56, No.7 (1997).
- 41- W. Berthold and A. Wucher, Physical Review Letters, Vol.76, No.12 (1996).
- 42- N. Winograd, M. El. Maazawi, R. Mabovdian, Z. Postawa, N. D. Bernardo and B. J. Garrison, J. Chem. Phys., 69, 6314 (1992).
- 43- W. Bloss and Dttore, Surface Science, 72, 277-297 (1978).
- 44- E. Veje, Physical Review B, Vol.28, No.1 (1983).
- 45- E. Veje, Physical Review B, Vol.28, No.9 (1983).
- 46- T. Schlatholter, A. Narmann, A. Robin, D. F. A. Winters, S. Marini, R. Morgenstern and R. Hoekstra, Physical Review A, Vol.62, 042901 (2000).

The Electronic Excitations of the Desorbed Species Throughout Sputtering Process

A. R. Ahmed , H. B. Salman and J. M. Al-Mukh
Department of Physics – College of Education – University of Basrah

Abstract

In the present work , theoretical study is presented to calculate the neutralization probability throughout the ground state channel and the neutralization probability throughout the excited state channel for the desorbed particle throughout the sputtering process . The Hamiltonian that describes the system is written taking into account the ground and the excited states of the sputtered particle. We get use of Heisenberg equations of motion to derive the equations of motion that describe the system . To simplify the solution of the equations , wide band approximation is used then the law of charge conservation is investigated . The equations are solved numerically and the sputtered atom – surface interaction is investigated along its classical trajectory as it goes far away from the surface . Extended model parameterization is presented to check the general features of sputtered atom – surface interaction and the concept of interference energy is discussed . Our treatment is applied to real system , that is the sputtering of Ag atom from polycrystalline silver surface . The neutralization probabilities throughout ground state and the excited state channels are calculated as a function of time , the normal velocity component of the sputtered atom and for different values of the strength of interaction that related to the electronic structure of sputtering region . The results we get show qualitative agreement with the experimental data and with results of the de – excitation model . These results are employed to calculate the photon yield as a function of the sputtering atom's normal velocity component and for different values of interaction strength .

