الواطئة بالذرات القلوية على عملية تبادل الشحنة بين الذرة المستطيرة والذرة الملتصقة/سطح بوجود اقتران إلكترون- فونون

م.م مصطفى عبد الستار عبد الجبار /كلية العلوم /جامعة ذي قار

الملخص Abstract

لغرض دراسة تأثير التغطية خلال استطارة ذرة عن سطح مغطى بذرات قلوية , أستخدم المؤثر الهاملتوني لأندرسون الذي تضمن تفاعل الذرة المستطيرة مع ذرة ملتصقة واحدة وكذلك تفاعل الذرة الملتصقة مع ذرات السطح . بحيث تستطير الذرة من الذرة الملتصقة وتتم عمليةتبادل الشحنة بينهما عن طريق عملية تبادل الشحنة الرنيني وشبه الرنيني . تضمن الهاملتونين كذلك تفاعل اقتران إلكترون-فونون . وقد عُولج نظام المعادلات الخاص بذرة مستطيرة-ذرة ملتصقة/ سطح باستخدام تقريب الحزمة العريضة .وقد حُلَّ نظام المعادلات عددياً باستخدام طريقة رانج كوتا من الدرجة السادسة والتأكد من الدقة عند كل زمن. طبقت المعالجة لنظام حقيقي هو Li – K/W , إذ تم دراسة تأثير التغير في دالة الشغل للسطح (ΔΦ) بسبب التغطية على احتمالية تبادل الشحنة وعلى موقع المستوي الذري للذرة المستطيرة.

مقدمة Introduction

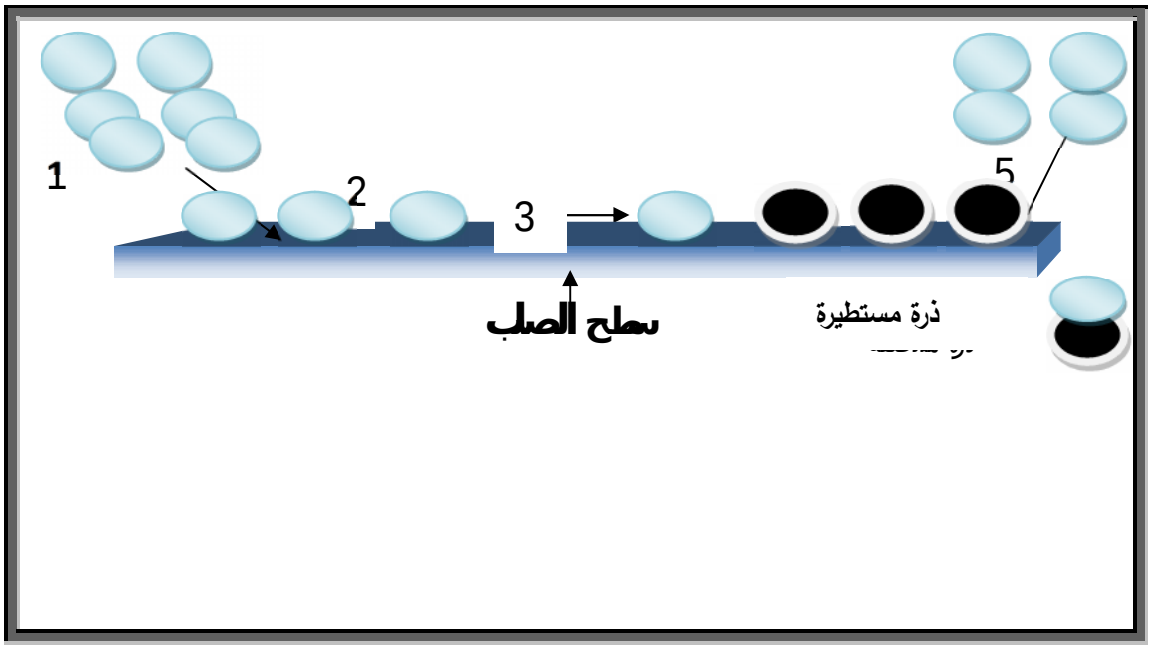
إن الطبقة العليا من ذرات السطح التي تكون الحد الفاصل عن الأطوار الأخرى (غاز, سائل أو صلب) القريبة من السطح أو الساقطة عليه يمكن أعتبارها السطح (the Surface) وعلى أية حال فان تركيب وكيمياء الطبقة العليا من الذرات أو الجزيئات سوف تعين بالذرات والجزيئات التي تقع إلى الأسفل منها . وبدقة يمكن القول إن 10 – 2 من طبقات الذرات أو الجزيئات الأخيرة يمكن أعتبارها السطح (الذي يكون في حدود 3 nm – 0.5). وللأغراض التكنلوجية تصنع السطوح كأفلام (surface films) هذه الأفلام يكون عمقها بحدود (10 – 100 nm. وعليه يمكن أن نعبر عن السطح بدلالة ثلاثة مناهج هي الطبقة العليا الأولى للسطح وحوالي أول عشرة طبقات والفلم (surface film), ليس أكثر من 100 nm .أذن لفهم سطوح المواد الصلبة فأننا لانحتاج إلى تكنيك يميز السطح عن عمق المادة الصلبة وانما يميز أيضاً صفات أو خصائص المناهج الثلاثة المذكوره أعلاه . إن الصفات الفيزيائية للسطوح تهمل

Created with nitroPDF professional
download the free trial online at nitropdf.com/professional

عادةً إذا ماقورنت بالجسيم ذي الأبعاد الثلاثة وعلى أية حال فان الأجسام الفيزيائية التي تدرس هذه الأيام أصبحت أصغر وأصغر لذلك فأن السطوح لايمكن أن تهمل بعد الآن. فإذا كان لدينا جسيم صلب حجمه ($1cm^3$) فأن نسبة الذرات على السطح إلى تلك في الصلب (Bulk) تكون(10^{-7}<<1) وحينما يكون حجمه بحدود ($0.1\mu m^3$)

فأن النسبة تصبح (10^{-2}) وبذلك أصبحت خواص السطوح في مجال التقنية النانوية الحديثة مهمة جداً[1,2] . في الكيمياء أصبحت السطوح أيضاً مهمة جداً لأنها المساحة التي تحدث عليها التفاعلات الكيميائية (Chemical Reactions) وبعض هذه السطوح يمكن أن تتصرف كمسبب للتفاعل Catalysts . وببساطة فأن الجزيئات أو الذرات التي تصل إلى السطح أو قريبة منه لاتتفاعل فقط فيما بينها ولكنها تتفاعل أيضاً مع السطح , لذلك حاجز التفاعل (Reaction Barrier) بين الذرات أو الجزيئات والسطح يتغير[3,4]. وعلى أية حال , فأن الميكانيكية التي يعمل بها السطح على تغيير حاجز التفاعل ليست بسيطة لأن السطح ليس مجرد فضاء مستوي ذي بعدين . إن وحدات بناء السطح كالذرات أو الجزيئات لاتمتد بشكل مستمرعليه.وللسطح بعض التجعد (Corrugation) اعتماداً على أتجاه وتركيب شبيكة السطح وبطبيعة الحال, إن السطوح الحقيقية تحتوي على مجالات متنوعة من تراكيب السطح كالحافات (Steps) والجزر (Islands) وكذلك العيوب (Defects) [5,6] وان شروط السطح (Surface Conditions) التي تعزز التفاعل مع الذرات أو الجزيئات تعتمد على الجسيمات والسطح. إن فحص الديناميكية التي تحكم تفاعلات غاز – سطح ليست سهله الفهم فهي يمكن أن تتبع سلوكاً أو تصرفاً كيميائياً عند الحد الفاصل غاز – صلب (gas – solid interface) فعندما تستطير الجسيمات الذرية عن السطوح تحدث العديد من العمليات الكيميائية الأساسية التي يمكن ملاحظتها عملياً التي تتضمن انتقال ألكترون [7] (أنظر الشكل (1)) .

Created with nitroPDF professional
download the free trial online at nitropdf.com/professional



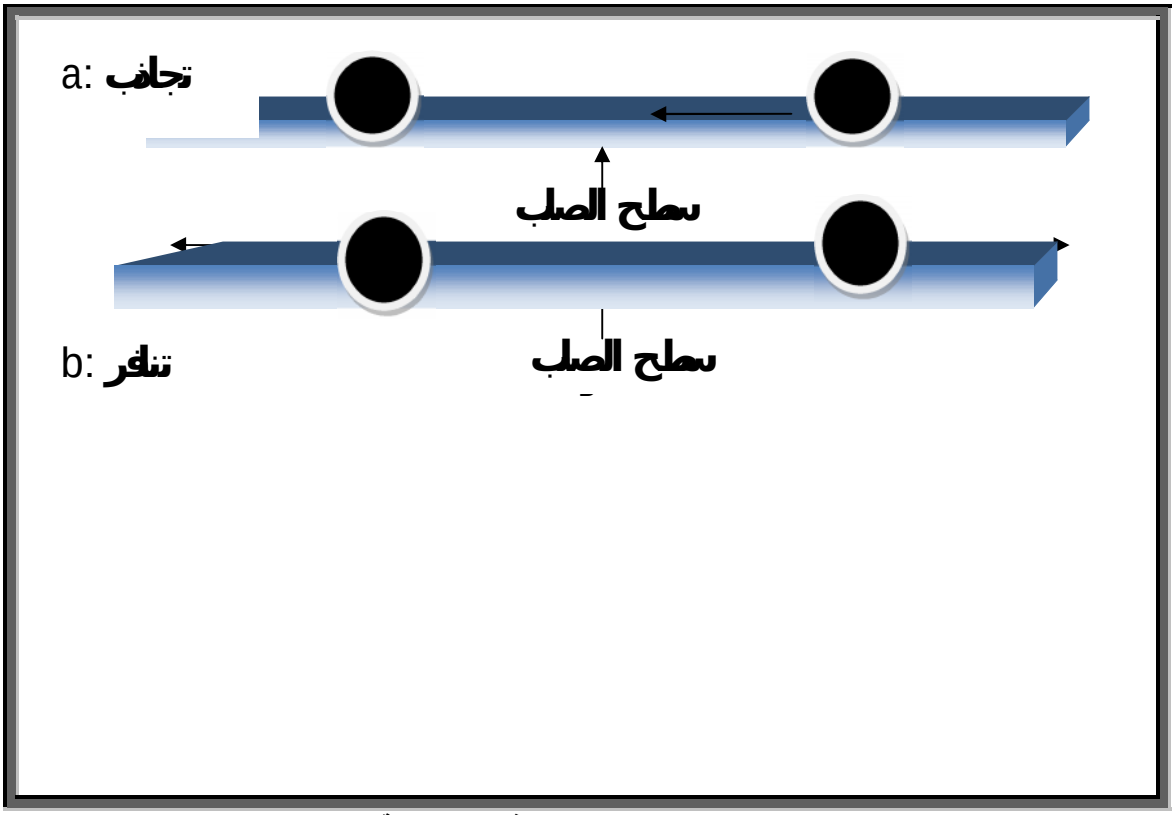
الشكل (1) يوضح مجمل العمليات الكيميائية التي تحدث عند السطح عند أستطارة الجسيمات الذرية من السطح 1- سقوط جسيمات ذرية بأتجاه السطح الصلب 2- ألتصاق بعض الجسيمات المستطيرةعلى السطح 3-أنتشار الذرات المستطيرة الملتصقة على السطح 4- التفاعل بين الذرات الملتصقة أصلاً على السطح 5- أستطارة الجسيمات الذرية من الذرات الملتصقة أو من ذرات السطح .

إن الدراسات النظرية لأنتقال الشحنة في موضوع تصادمات ذرة – سطح تفترض السطح نظيفاً وتاماً . وعلى أية حال فأن السطوح الحقيقية هي ليست نظيفة وتامة أي أنها قد تحتوي على العيوب (كوجود التغطية Coverage عليها أي وجود الذرات الملتصقة عليها) التي تؤثر بدورها على عملية تبادل الشحنة . وعليه سنهتم بدراسة تأثير وجود الجسيمات الملتصقة على عملية تبادل الشحنة . ويمكن أن تعرف تغطية السطح الكسرية (θ Fractional Surface Coverage) كالآتي :-

$$\theta = \frac{N_{oc}}{N_{av}} \qquad \text{.....(1)}$$

تمثل N_{oc} عدد مواقع الألتصاق على السطح التي تكون مشغولة بينما تمثل N_{av} عدد مواقع الألتصاق المتوفرة عليه . ومن الجدير بالذكر أن θ تحدد بالتفاعل المباشر بين الذرات الملتصقة فيما إذا كان تجاذبياً أو تنافرياً (أنظر الشكل (2)) .

Created with nitroPDF professional
download the free trial online at nitropdf.com/professional



الشكل (2) **يوضح التفاعل المباشر بين الذرات الملتصقة على السطح.**

عند هذه النقطة لابد أن نميز حالات التغطية [8,9] الآتية :-

1- **التغطية الواطئة** Low Coverage

ويعنى بها وجود الجسيمات الملتصقة (الأيونات أو الذرات أو الجزيئات) على السطح وبتركيز واطئ $\theta < 1ML$. بمعنى تكون الذرات الملتصقة adatoms متباعدة عن بعضها أي أن التفاعل بينهما مهمل بمعنى أنه لايوجد تجاذب بين الذرات الملتصقة. ولا تتخذ الذرات الملتصقة ترتيباً محدداً على السطح. إن غاية التغطية الواطئة وجود ذرة ملتصقة واحدة على السطح .

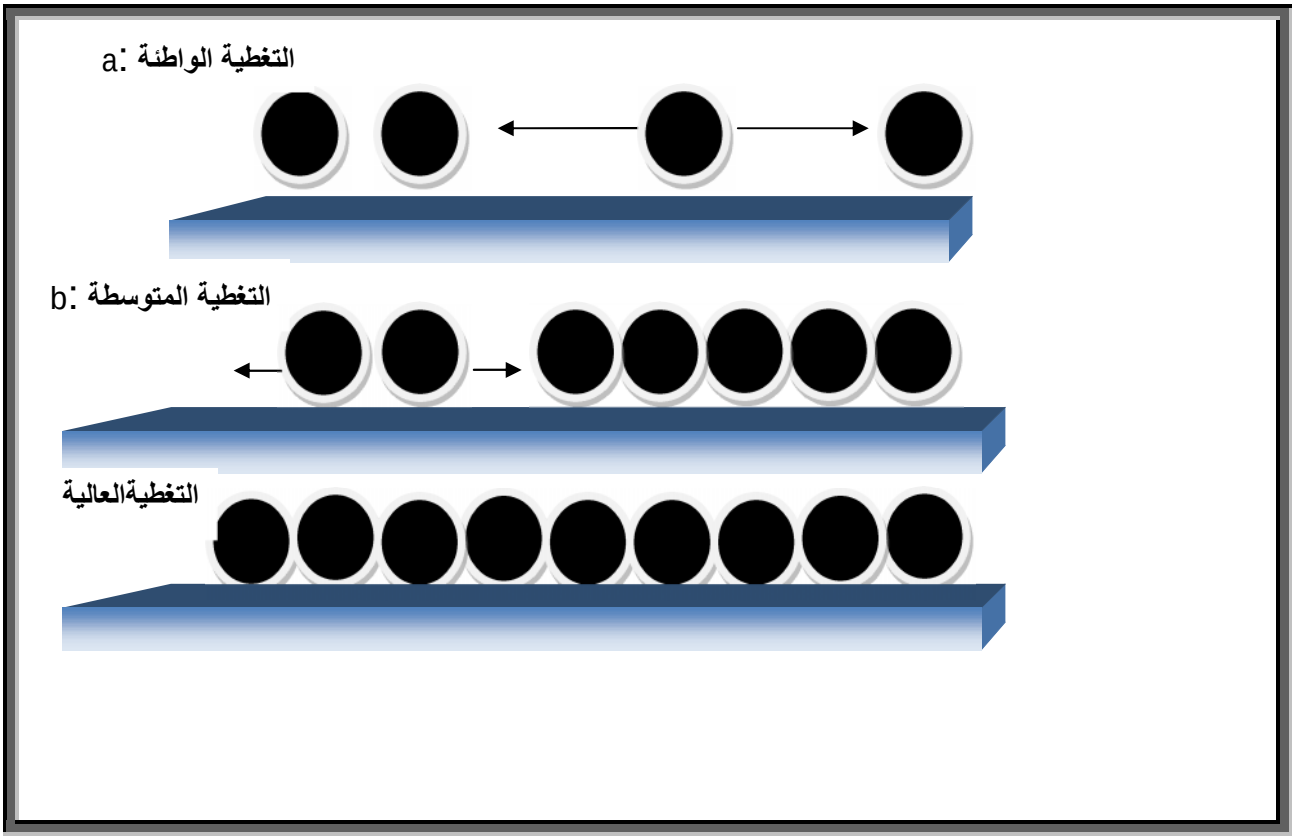
2- **التغطية المتوسطة** Medium Coverage

وهي بالتأكيد حالة وسطية بين التغطية الواطئة والعالية إذ يكون هنالك تجاذب بين الذرات الملتصقة ولكنها لاتتخذ ترتيباً محدداً على السطح .

3- **التغطية العالية** High Coverge

Created with nitroPDF professional
download the free trial online at nitropdf.com/professional

تتمثل هذه الحالة بوجود طبقة ذات سمك محدد من الذرات الملتصقة إذ يمكن اعتبار السطح وكأنه استبدل بسطح آخر جديد وعند ذلك تختفي مميزات القاعدة (Substrate) بمعنى أن $\theta \geq 1ML$ حيث تكون قوى التجاذب بين الذرات كبيرة ويكون هنالك ترتيب عالي (highly ordered) (أنظر الشكل (3)) .



الشكل (3) **يوضح حالات التغطية التغطية الواطئة والمتوسطة والعالية .**

تأثيرات الذرات الملتصقة Effects of Adatoms

عند تصادم أيون (ذرة) – سطح صلب , وحينما يكون الجسيم الذري قريباً من السطح , فأن المستويات الألكترونية للجسيم الذري تقترن مع المستويات الألكترونية للمعدن مما ينتج عملية إنتقال الشحنة بينهما . هذه العملية تلعب دوراً مهماً في العديد من العمليات الديناميكية المختلفة [10-16] التي تحدث على السطوح ولاسيما عندما تكون عملية إنتقال الشحنة رنينية إذ

Created with nitroPDF professional
download the free trial online at nitropdf.com/professional

تكون ذات كفاءة عالية عند نقل الشحنة. هذه المظاهر جعلت عملية نقل الشحنة الرنينية حساسة لتعديلات السطح (Modification of Surface) ولاسيما بسبب وجود الذرات الملتصقة على السطح التي كانت موضوع الكثير من الدراسات العملية [17-23] التي فسرت وبشكل واضح أهمية هذا التأثير. المعروف أن الذرات الملتصقة تلعب دوراً مهماً في تعزيز فعالية التفاعلات التي تحدث على السطح أو بالقرب منه. إن الأضطراب الذي تسببه الذرات القلوية الملتصقة تمت دراسته نظرياً [24-26] إذ يتمثل تأثير الأضطراب الذي تسببه الذرات القلوية الملتصقة على عملية تبادل الشحنة الرنيني بمظهرين مختلفين هما التأثير غير الموضعي والتأثير الموضعي.

أولاً : التأثير غير الموضعي Non- Local Effect

يطابق التأثير غير الموضعي التغير الحاصل في دالة الشغل للسطح بسبب وجود الذرات الملتصقة الذي يعدل موقع المستوي الذري للذرة المستطيرة بالنسبة لمستويات حزمة الطاقة للسطح. ما سبق يؤثر بشكل مباشر على عملية تبادل الشحنة الرنيني التي تتضمن انتقالات بين المستويات ذات الطاقة نفسها .

ثانياً : التأثير الموضعي Local Effect

يتضمن الأضطراب الموضعي للتركيب الألكتروني والجهود في المنطقة التي تحيط بالذرة الملتصقة والتي تغير أو تعدل موقع وعرض المستويات الذرية للذرة المستطيرة.[27].

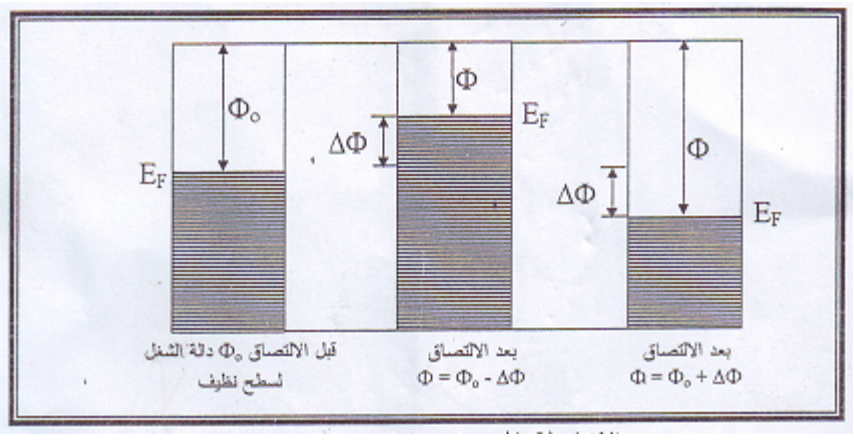
الجدير بالذكر أنه ليس من السهل فصل دور التأثيرات الموضعية عن التأثيرات غير الموضعية. وفي الحقيقة أن التغير في دالة الشغل للسطح ينتج من جمع كل الأضطرابات الموضعية التي تسببها الذرات الملتصقة وبمعنى آخر فأن التغيرات الموضعية للجهود الألكترونية على السطح تعد مقابلة للتغير في دالة الشغل للسطح. في بعض التجارب العملية [28] يمكن فصل التأثيرات الموضعية عن غير الموضعية وذلك لأنه يمكن في التجارب العملية التمييز فيما اذا كانت الذرة

Created with nitroPDF professional
download the free trial online at nitropdf.com/professional

مستطيرة عن ذرة ملتصقة أم ذرة السطح وعلى أية حال فأن النتائج العملية المحصل عليها ترتبط بظروف عملية الأستطارة وأن السؤال الذي يعد الأهم هوما أهمية التأثيرات الموضعية. بمعنى آخر أن الأضطراب الموضعي يكون مهماً جداً حينما تكون الأستطارة رأسية (on – top Scattering) أي الذرة المستطيرة تستطير عن الذرة الملتصقة فقط ولكن ما مدى تأثير هذا الأضطراب الموضعي جانبياً من الذرة الملتصقة؟ أو ما حجم المنطقة على السطح التي تتأثر بالذرات الملتصقة ؟

التقريب غير الموضعي

في الجانب النظري هناك العديد من التقريبات التي قدمت لمعالجة وجود الجسيمات الملتصقة على السطح وتأثيرها على عمليات تبادل الشحنة وكان من أبسطها التقريب غير الموضعي إذ تكون ترابطات Coupling انتقال الشحنة هي نفسها لسطح نظيف ويضاف تأثير وجود الجسيمات الملتصقة فقط في دالة الشغل للسطح $\Phi \rightarrow \Phi_0 + \Delta\Phi$ فإشارة $\Delta\Phi$ قد تكون سالبة أو موجبة حسب نوع الذرات الملتصقة وإن Φ_0 دالة الشغل لسطح نظيف كما هو موضح في الشكل (4)



الشكل (4) يوضح التقريب غير الموضعي

Created with nitroPDF professional
download the free trial online at nitropdf.com/professional

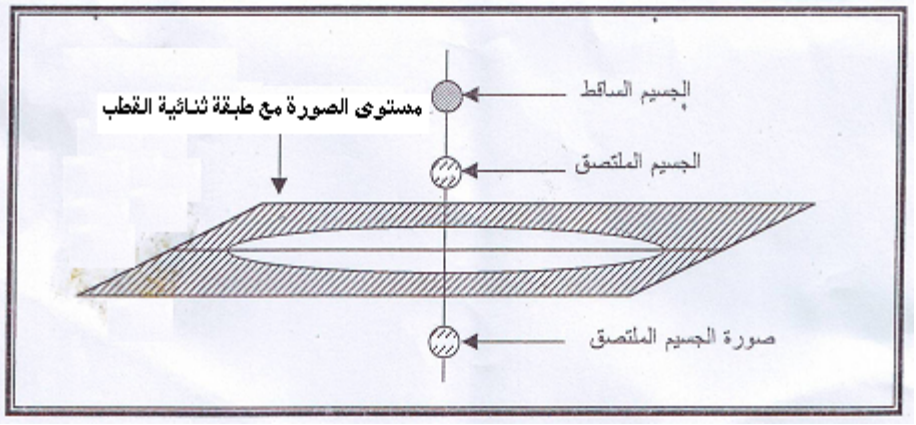
من المعروف أن موقع طاقة المستوي الذري (للذرة القريبة من السطح) تتغير بسبب وجود الذرات الملتصقة على السطح . وفي الحقيقة إن الطرق التي اهتمت بدراسة تفاعل المستويات الذرية مع سطح معدن نظيف أشارت إلى إن التغير في طاقة المستوي الذري مع المسافة الفاصلة بين الذرة والسطح يمكن أن يستخرج من الجهد الموضعي الذي تنغمس فيه الذرة إن الصورة التقليدية لإلتصاق ذرات قلوية على السطح تكون كالآتي :عند التغطية الواطئة تفقد الذرة القلوية إلكترونها الخارجي وتلتصق على السطح وهي أيون موجب.هذا الأيون يُحدث صورة له في المعدن كما في الشكل (5) ولذلك فإن ذرة قلوي ملتصقة على بعد h من السطح تخلق عزم ثنائي قطب موضعي μ مساوي إلى 2h (بالوحدات الذرية) .ثنائيات القطب هذه تتنافر في ما بينها عند التغطية الواطئة وتتوزع بشكل منتظم على السطح.ولكثافة جسيمات ملتصقة مساوية إلى N فإن ما سبق يقود إلى تغير دالة الشغل على السطح ΔΦ بمقدار مساوي إلى:

$$\Delta\Phi = 2\pi N\mu = 4\pi Nh$$

وبذلك فإن دالة الشغل للسطح تصبح

$$\Phi = \Phi_0 - 2\pi N\mu$$

أما عند التغطية العالية بالذرات القلوية فإن الذرات الملتصقة تتفاعل مع بعضها الأمر الذي يقود إلى إعادة استقطاب ثنائيات القطب وتكوين طبقة معدن قلوي . كذلك فإن الذرات القلوية في حالة التغطية الواطئة تلتصق على شكل ذرة – ملتصقة Adatom بينما عند التغطية العالية تلتصق على شكل جزر على السطح[28].



Created with nitroPDF professional
download the free trial online at nitropdf.com/professional

الشكل(5) يوضح اللاتجانس الموضعي الذي يحدثه الجسيم الملتصق

الأنموذج الحسابي The model Calculation

عندما يكون السطح غير نظيف اي مغطى بذرات غريبة (ذرات ملتصقة عليه) بحيث ان التغطية تكون واطئة Low coverage , وبوصف البحالات الالكترونية للسطح بحيث تكون الذرة الملتصقة adatom عند نهاية سلسلة ذرات السطح وهي تتصرف متذبذباً توافقياً مككماً , أي إن اقتران إلكترون – فونون يقع على موقع الذرة الملتصقة . وأن الذرة المستطيرة (وهي كقذيفة) ترتطم بالذرة الملتصقة وهي التي تولد الفونونات عليها. ما سبق يتفق مع الكثير من التجارب العملية التي فيها تستطير الذرة أو الآيون عن الذرة الملتصقة وليس ذرة السطح [29-31]. كما أن هذا الفرض يسهل كتابة الهاملتونين الخاص بهذا النظام الذي سيأخذ الهيئة الآتية [32-36] :

$$H = H_e + H_p + H_{e\text{-}p} \qquad ...(1)$$

وبأخذ الذرة الملتصقة بنظر الاعتبار فان الهاملتونين الإلكتروني يأخذ الصيغة الآتية:

$$H_e = E_a(t) C_a^+ C_a + E_d C_d^+ C_d + \sum_k E_k C_k^+ C_k + \sum_k (V_k C_d^+ C_k + V_k^* C_k^+ C_d) + V(t)(C_a^+ C_d + C_d^+ C_a) \qquad ...(2)$$

الحد الأول من المعادلة أعلاه يخص الذرة المتفاعلة بينما الثاني يخص الذرة الملتصقة على السطح أما الحد الثالث فيخص المستويات الذرية للسطح والحد الرابع يخص تفاعل الذرة الملتصقة مع السطح والحد الأخير فيمثل تفاعل الذرة المستطيرة مع الذرة الملتصقة.

من الملاحظ انه تمت إضافة حدود خاصة بالذرة الملتصقة إذ يمثل E_d موقع المستوي الذري للذرة الملتصقة بينما يمثل الحد الرابع حد تفاعل الذرة الملتصقة مع السطح والحد الأخير يمثل تفاعل الذرة الملتصقة مع المستطيرة . يمثل V_k عناصر مصفوفة الاقتران بين مستويات حزمة الطاقة للسطح وأوربيتال الذرة الملتصقة . يمثل $V(t)$ حد التفاعل المعتمد على الزمن بين

Created with nitroPDF professional
download the free trial online at nitropdf.com/professional

أوربيتالات الذرة المستطيرة والملتصقة بمعنى إن تفاعل الذرة المستطيرة مع السطح يكون غير مباشر التي سنأتي على تحديد صيغتها لاحقاً .

أما جزء الهاملتونين الخاص بالبوزونات :

$$H_p = \omega b^+ b + g(t)(b+b^+) \qquad ...(3)$$

يمثل ω تردد المتذبذب التوافقي الكمي المتمثل بالذرة الملتصقة إذ أن الأنماط التذبذبية للذرة الملتصقة تقترن بحركة الذرة المستطيرة بفرض أن الذرة المستطيرة تؤثر على المتذبذب بقوة خارجية تعطى بالصيغة الآتية [36] :

$$F = -(2M\omega)^{1/2} g(t) \qquad ...(4)$$

إذ أن M تمثل كتلة الذرة الملتصقة وأن g(t) تعرّف كالآتي :

$$g(t) = -(2M\omega)^{1/2} 2a' E_o \operatorname{sech}^2(a'\nu_0 t) \qquad ...(5)$$

تمثل E_o الطاقة الحركية الابتدائية للذرة المستطيرة . أما a' فهو معامل خاص بجهد بورن – ماير وأن ν_0 مركبة السرعة العمودية الابتدائية . ويعطى الجزء الثالث من الهاملتونين بمايلي:

$$H_{e-p} = \lambda C_d^+ C_d (b^+ + b) \qquad ...(6)$$

إذ يمثل المقدار $C_d^+ C_d$ عدد إشغال n_d المستوي الذري للذرة الملتصقة بينما يمثل λ اقتران إلكترون –فونون بين الانماط المتذبذبة للذرة الملتصقة وأي إلكترو ن متموضع عليها .

3-اشتقاق معادلات الحركة

Equations of Motion Derivation

لغرض إشتقاق معادلات الحركة سنعرّف المؤثرات $C_k(t)$ و $C_a(t)$ و $C_d(t)$ و $b(t)$ بتمثيل هايزنبرك representation Heisenberg التي تحقق المعادلات هايزنبرك للحركة (وبالوحدات الذرية):-

Created with nitroPDF professional
download the free trial online at nitropdf.com/professional

$$\frac{dC_a(t)}{dt} = i[H, C_a(t)] \quad ...(7)$$

$$\frac{dC_d(t)}{dt} = i[H, C_d(t)] \quad ...(8)$$

$$\frac{dC_k(t)}{dt} = i[H, C_k(t)] \quad ...(9)$$

$$\frac{db(t)}{dt} = i[H, b(t)] \quad ...(10)$$

تمثل الأقواس المربعة في العلاقات ((7) -(10)) أقواس التبادل وبتعويض صيغة المؤثر الهاملتونين (1) في العلاقات((10)-(7)) وبالاستفادة من خاصية تبادل المؤثرات Commutation Relations of Operators :

$$[C_i, C_j] = [C_i^+, C_j^+] = 0 \quad ...(11)$$

$$[C_i, C_j^+] = \delta_{ij}$$

إذ إن δ_{ij} تمثل دالة كرونكر . وبإجراء بعض الخطوات الرياضية نحصل على معادلات الحركة التالية [36] :

$$\dot{C}_a = iE_a(t)C_a - iV(t)C_d \quad ...(12)$$

$$\dot{C}_d = iE_d(t)C_d - iV(t)C_a - i\sum_k V(t)C_k - i\lambda C_d(b + b^+) \quad ...(13)$$

$$\dot{C}_k = iE_k(t)C_k - iV_k(t)C_d \quad ...(14)$$

$$\dot{b} = -i\omega b - i\lambda C_d^+ C_d - ig(t) \quad ...(15)$$

إن نظام المعادلات ((18)-(16)) يمكن حله بالطرق العددية المعروفة وهو يمثل نظاماً من المعادلات الخطية غير المتجانسة .لقد تم التأكد من أنّ معادلات الحركة أعلاه تحقق قانون حفظ الشحنة [37] ,

Created with nitroPDF professional
download the free trial online at nitropdf.com/professional

$$\frac{dn_a}{dt}+\frac{dn_d}{dt}+\sum_k\frac{dn_k}{dt}=0 \qquad ...(16)$$

والذي يعني إنّ معدل تغير الكثافة الإلكترونية الذرية Atomic electron density للذرة المستطيرة يعادل معدل التغير على الذرة الملتصقة والسطح . إذ إن $\mathbf{n_i(t)}$ يمثل عدد إشغال المستوي i(=a,d,k)

ولغرض تسهيل عملية الحساب العددي لنظام المعادلات أعلاه كان لابد من حل المعادلة (14) حلاً تحليلاً وكالآتي :

$$C_k(t)=C_k(t_o)\exp(-iE_k(t-t_o)-i\int_{t_0}^{t}V_k^*C_d(t')\exp(iE_k(t'-t)\,dt' \qquad ...(17)$$

وبتعويضها في العلاقة (18) وباستخدام تقريب الحزمة العريضة نحصل على نحصل على[32] :

$$\dot{C}_d=[-iE_d-2\pi\gamma^2\rho-i\lambda(b^+ + b)]\,C_d(t)-iV(t)C_a(t) - i\gamma\rho\int_{u_o}^{\varphi}\sqrt{f(E,T)}\exp(-iE(t-t_o))\,dE \qquad ...(18)$$

الحل العددي لمعادلات الحركة

The Numerical Solution for the Equation of Motion

واعتماداً على ماسبق يتضمن نظام المعادلات العلاقات(12) و (15) و (18) والتي تم حلها باستخدام الطرق العددية المعروفة ومنها طريقة رانج – كوتا من الدرجة السادسة التي تتضمن التأكد من نسبة الخطأ عند كل خطوة حسابية . علماً أنّ الوحدات المستخدمة في معالجتنا كلها وفي أنموذجنا الحسابي هي وحدات ذرية ($\mathbf{m=\hbar=e=1}$) وكل قياسات الطاقة هي بالنسبة لمستوى فيرمي $\mathbf{E_F=0}$. وتعطى الشروط الابتدائية للحل بمايلي :

$$C_a(t_o)=(1,0)$$
$$C_d(t_o)=(0,0) \qquad (19)$$
$$\tilde{C}_k(t_o)=\sqrt{f(E,T)}$$

وعليه يمكن الحصول على احتمالية التأين $\mathbf{P^+}$ للذرة المستطيرة والمبتعدة عن السطح

Created with nitroPDF professional
download the free trial online at nitropdf.com/professional

وفقاً لمايأتي :

$$P^{+}(t)=1-|C_a(t)|^2 \qquad ...(20$$

تطبيق لنظام حقيقي

في هذه البحث ندرس استطارة ذرات Li من سطح K/W(110), إذ أن عرض حزمة الطاقة للاتكستن مساوي إلى 4β وأن $\beta = 1.75\ eV$ الذي يعطي كثافة حالات للسطح بهيأة قطع مكافئ وبعرض 7eV تتمركز 5eV أسفل مستوي الفراغ Vacuum Level.وإن كل مستويات الطاقة حسبت بالنسبة لمستوي فيرمي E_F الذي ثبت في حساباتنا عند $E=0$

أما فيما يخص موقع المستوي الذري للذرة المستطيرة Li بالنسبة لمستوي فيرمي فيعطى بما يلي:

$$E_a(t) = \phi + V_i + \frac{e^2}{4(z(t)+4.5a_0)} \qquad ...(21)$$

إذ أن V_i تمثل جهد التأين لذرة Liالمستطيرة وهو مساوٍ إلى 5.392eV- وأن الحد الأخير من العلاقة (21) يمثل الإزاحة الصورية الناتجة من تأثير القوى الصورية التي تعمل على إزاحة المستوى الذري إلى الأعلى بمقدار هذه الإزاحة التي تتناسب مع قيمة المسار Z(t) .أما $4.5a_0$ فيمكن عدّه هنا طول الحجب وأن a_0 هو نصف قطر بور .

لقد اختير مدى الطاقة فوق الحرارية $E_0 \approx 1-50\ eV$ وذلك لأنه من المتوقع أن تكون تأثيرات اقتران إلكترون- فونون واضحة عند هذا المدى من الطاقة وبالأخص للمدى 1-25eV . ولغرض فحص تأثير تغير دالة الشغل للسطح باستخدام التقريب غير الموضعي و الطاقة الحركية الابتدائية للذرة المستطيرة على عملية تبادل الشحنة بين الذرة المستطيرة والسطح وبوجود تفاعل اقتران إلكترون- فونون سنستعرض النتائج التالية:

إن احتمالية التأين لذرة Li المستطيرة المبتعدة عن السطح $p^+(\infty)$ تزداد مع زيادة الطاقة الابتدائية لها وكذلك مع زيادة التغطية على السطح وإن هذه الزيادة للـ $p^+(\infty)$ تكون بوتيرة أكبر من احتمالية تأين الذرة المستطيرة بالقرب من السطح $p^+(0)$ وهذا واضح في الجداول $(1 \to 6)$,

Created with nitroPDF professional
download the free trial online at nitropdf.com/professional

بينما تبين الجداول $(12 \to 7)$ إنه كلما زاد $\Delta\Phi$ (قلΦ) فإن مستوي الذرة عند $t=0$ $E_a(0)$ يقع أكثر أسفل مستوي فيرمي وهذا مثبت من خلال الجداول $(1 \to 6)$ حيث تزداد $p^+(0)$ بدرجة أقل من الزيادة الحاصلة في $p^+(\infty)$ كلما زاد $\Delta\Phi$.وكذلك تم فحص قيمة $E_a(t)$ كدالة للزمن عند طاقة إبتدائية $E_0 = 5eV$ و$\Delta\Phi$=0.75 . وجد أن $E_a(t)$ تقع دائماً تحت مستوى فيرمي .عندما $\Delta\Phi$=0.75 و عندما $\Delta\Phi$=2.75 . وتقع أعلى مستوى فيرمي لكل $-250.40a.u. \le t \le 240.71a.u.$ عند $\Delta\Phi$=0.75 وتقع دائماً أسفل مستوي فيرمي عند $\Delta\Phi$=2.75 عندما $E_0 = 50eV$ وكما موضح في الأشكال $(4 \to 1)$ هذا يدل على أن الفترة الزمنية التي تقع فيها $E_a(t)$ اعلى مستوى فيرمي تزداد كلما قلت الطاقة الإبتدائية وكلما قلت درجة التغطية .

جدول(1)قيم $E_a(0)$ عند $E_0 = 1eV$

ϕ	$\Delta\phi$	$E_a(0)$
4.5	0.25	-0.00577
4	0.75	-0.02415
3.5	1.25	-0.04252
3	1.75	-0.0609
2.5	2.25	-0.07927
2	2.75	-0.09765

جدول(2)قيم $E_a(0)$ عند $E_0 = 5eV$

ϕ	$\Delta\phi$	$E_a(0)$
4.5	0.25	-0.00435
4	0.75	-0.01883
3.5	1.25	-0.03721
3	1.75	-0.05558
2.5	2.25	-0.07396
2	2.75	-0.099234

Created with nitroPDF professional
download the free trial online at nitropdf.com/professional

جدول(3)قيم $E_a(0)$ عند $E_0 = 15eV$

ϕ	$\Delta\phi$	$E_a(0)$
4.5	0.25	-0.00450
4	0.75	-0.01387
3.5	1.25	-0.03225
3	1.75	-0.05065
2.5	2.25	-0.06900
2	2.75	-0.08738

جدول(4)قيم $E_a(0)$ عند $E_0 = 25eV$

ϕ	$\Delta\phi$	$E_a(0)$
4.5	0.25	-0.00735
4	0.75	-0.01103
3.5	1.25	-0.02940
3	1.75	-0.04907
2.5	2.25	-0.06615
2	2.75	-0.08453

جدول(5) قيم $E_a(0)$ عند $E_0 = 35eV$

ϕ	$\Delta\phi$	$E_a(0)$
4.5	0.25	-0.00946
4	0.75	-0.01891
3.5	1.25	-0.02729
3	1.75	-0.04665
2.5	2.25	-0.06404

جدول(6) قيم $E_a(0)$ عند $E_0 = 50eV$

ϕ	$\Delta\phi$	$E_a(0)$
4.5	0.25	-0.01196
4	0.75	-0.01642
3.5	1.25	-0.02481
3	1.75	-0.04393
2.5	2.25	-0.06154
2	2.75	-0.07994

Created with nitroPDF professional
download the free trial online at nitropdf.com/professional

-0.08241	2.75	2

جدول(7)قيم $p^+(0)$ و $p^+(\infty)$ عند $E_0 = 1eV$

جدول(8)قيم $p^+(0)$ و $p^+(\infty)$ عند $E_0 = 5eV$

ϕ	$\Delta\phi$	$p^+(\infty)$	$p^+(0)$
4.5	0.25	0.4937	0.39041
4	0.75	0.50029	0.40493
3.5	1.25	0.52196	0.42265
3	1.75	0.54397	0.43370
2.5	2.25	0.55847	0.47597
2	2.75	0.56099	0.47826

ϕ	$\Delta\phi$	$p^+(\infty)$	$p^+(0)$
4.5	0.25	0.30991	0.22489
4	0.75	0.37059	0.27537
3.5	1.25	0.39221	0.30711
3	1.75	0.42806	0.33420
2.5	2.25	0.45649	0.36670
2	2.75	0.46225	0.37321

جدول(9)قيم $p^+(0)$ و $p^+(\infty)$ عند $E_0 = 15eV$

جدول(10)قيم $p^+(0)$ و $p^+(\infty)$ عند $E_0 = 25eV$

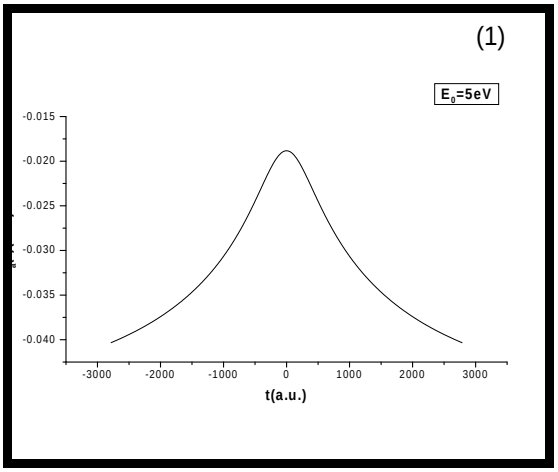
جدول(11)قيم $p^+(0)$ و $p^+(\infty)$ عند $E_0 = 35eV$

جدول(12)قيم $p^+(0)$ و $p^+(\infty)$ عند $E_0 = 50eV$

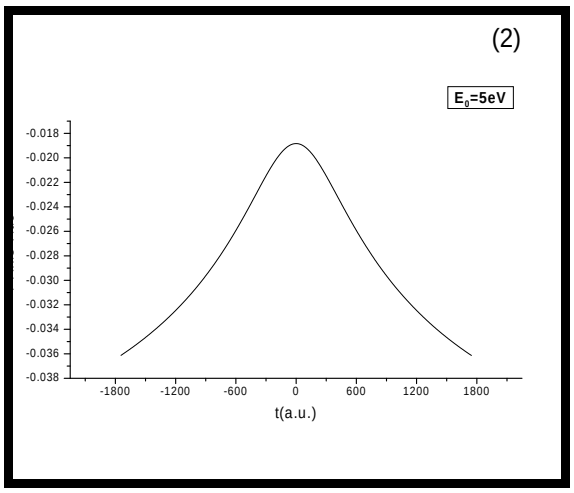
ϕ	$\Delta\phi$	$p^+(\infty)$	$p^+(0)$
4.5	0.25	0.56328	0.48680
4	0.75	0.58299	0.49329
3.5	1.25	0.58943	0.49888
3	1.75	0.59613	0.50023
2.5	2.25	0.64044	0.53570
2	2.75	0.66994	0.56650

ϕ	$\Delta\phi$	$p^+(\infty)$	$p^+(0)$
4.5	0.25	0.16237	0.10136
4	0.75	0.17332	0.12460
3.5	1.25	0.18313	0.13188
3	1.75	o.18933	0.15381
2.5	2.25	0.19258	0.17020
2	2.75	0.25711	0.21743

Created with nitroPDF professional
download the free trial online at nitropdf.com/professional



لشكل (1)موقع المستوي الذري للذرةالمستطيرة دالة للزمن ولـ $E_0 = 5eV$ عندΔΦ=2.75

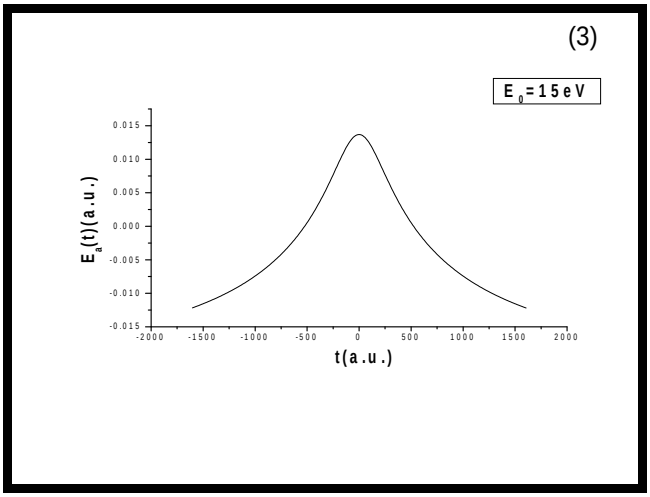


الشكل (2)موقع المستوي الذري للذرةالمستطيرة دالة للزمن ولـ $E_0 = 5eV$ عندΔΦ=0.75

ϕ	$\Delta\phi$	$p^+(\infty)$	$p^+(0)$
4.5	0.25	0.795220	0.690148
4	0.75	0.811440	0.722556
3.5	1.25	0.823730	0.729055
3	1.75	0.847870	0.744230
2.5	2.25	0.854211	0.769940
2	2.75	0.859363	0.790012

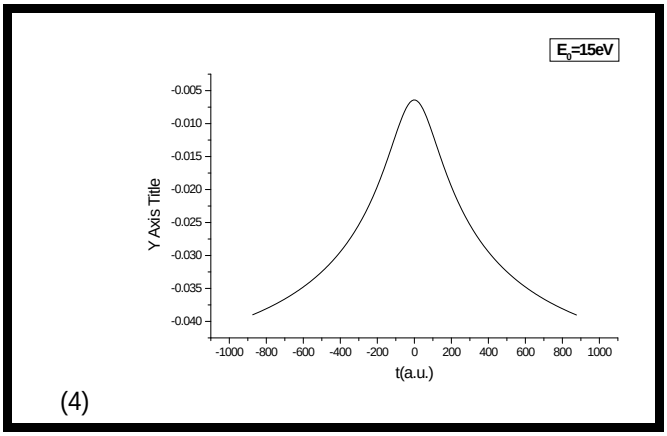
ϕ	$\Delta\phi$	$p^+(\infty)$	$p^+(0)$
4.5	0.25	0.701012	0.59923
4	0.75	0.73183	0.60081
3.5	1.25	0.73690	0.63148
3	1.75	0.75001	0.64266
2.5	2.25	0.75412	0.65070
2	2.75	0.757931	0.65570

Created with nitroPDF professional
download the free trial online at nitropdf.com/professional



الشكل (3)موقع المستوي الذري للذرةالمستطيرة دالة

$E_0 = 15eV$ عندΔΦ=2.75



الشكل (4)موقع المستوي الذري للذرةالمستطيرة دالة للزمن ولـ

$E_0 = 15eV$ للزمن ولـ ΔΦ=0.75عند

Abstract

The Non- Local approximation for the effect of coverag on the charge transfer process in the hyper – thermal energies regime, is one of the most important subject in surface physics . And to study this effect due to the recoil of the adatom through out the scattering of atom from surface covered with alkali atoms , Anderson Hamiltonian is used which incorporates the interaction of the scattering atom with the adatom and the interaction of the adatom with the surface atoms.

Since the atom is scattered from the adatom and the charge transfer happens through out resonance and quasi-resonance charge transfer. The Hamiltonian incorporates also the electron-phonon coupling interaction .The system of equations for scattered atom-adatom/

Created with nitroPDF professional
download the free trial online at nitropdf.com/professional

surface is treated using the wide band approximation . The system of equations are solved numerically using six-order Runge-Kutta method with the accuracy is checked at each time . The treatment is applied to real system , that is Li-K/W, since the ionization probability of the scattered atom and the position of the atomic energy level with respect to Fermi level are studied as function of surface work function variations.

References

Created with nitroPDF professional
download the free trial online at nitropdf.com/professional

Jonghyuk Kim ,'' Quantum State – Resolved Studies of Sticking andElastic Scattering of H_2 From Cu(100)''Ph.D. Thesis, University of Texas at Austin, 2006.

2- John C. Vickerman and Ian S. Gilmore , ''Surface Analysis''Copyright by John Wiley and Sons , 2009.

3- Schattke @ tp . cau. de.

4- J. Kroger , L. Limot , H. Jensen , R. Berndt , S. Crampin and E . Pehlke , Progress in Surf. Sci. 80 (2005) 26 – 48.

5- G. E. Makhmetov , A. G. Borisov , D. Teillet – Billy and

J. P. Gauyacq , Surf. Sci. 366 (1996) L769 – L774.

6- H. Lu – bing , D. Hui. – qiu and H. Wang – yu Transactionsof Nonfnnous Metals, Society of China, 16 (2006) 820 – 823.

7- B. S. Patricia Lynn Maazouz , ''Reaction Dynamics and Charge Transfer in the Scattering of State – Selected Ions on Surfaces'' Ph.D. Thesis, University of Notre Dame , Notre Dame , Indiana , 2004.

8- Andrew P. Graham , Surf. Sci. Reports 49 (2003) 115 – 168.

9- Zhen – Yu Yang , Zhi – Qiao Wang and Ya – Pu Zhao , International Physical Rev. Lett. 69 (1992) 2706

Journal of Nonlinear Sciences and Numerical Simulation , 9 (4) , 323 – 332 ,2008.

10- R. Souda, W. Hayami,T. Aizawa, S. Otani andIshizawa,

11- L.Q. Jiang, Y.D. Li and B.E. Kole, Phys. Rev. Lett. 70 (1993) 2649.

12- H. Muller, R. Hausmann, H. Brenten and V. Kempter, Nuclear InstrumentsMethods B 78 (1993) 239.

13- K. Schmidt, T. Schlatholter, A. Narman and W. Heiland, Chem. Phys. Lett. 200 (1992) 465.

14- Q. B. Lu, D. J. O'Connor , B.V. King and R. J. Mcdonal Surf. Sci., 347 (1996) 61.

Created with nitroPDF professional
download the free trial online at nitropdf.com/professional

15- V. Esaulov, S. Ustaze, M. Maazouz, L. Guillemot and R. Verucchi, Surf. Sci., 380 (1997) 521.

16- A. G. Borisov, D. Teillet – Billy, and J. P. Gauyacq, Phys. Rev. Lett. , Vo. 68, No. 18 (1992).

17- M. Baron, T. Bernhard, M. Gruyters and H. Winter Surf. Sci. 600 (2006) 3924 – 3927.

18- J. Y. Kim, J. Y. Park, J. H. Seo, C. N. Whang, H. J. Kang S. S. Kim, D. S. Choi and K. H. Chae, Surf. Sci. 531 (2003) L340 – L346.

19- M. Kurahashi and Y. Yamauchi, Surf. Sci.590 (2005) 21-30.

20- T. Kravchuk, V. A. Esaulov, A. Hoffman and R. C. Monreal Nuclear Instruments and Methods in Physics

Research B 232 (2005) 27 – 31

21- S. E. Finberg , J. V. Lakin and R. D. Diehl, Surf. Sci. 496 (2002) 10 – 20.

22 - X. Chen, Z. Sroubek and J. A. Yarmoff, Surf. Sci. 602 (2008) 620 – 629.

23- N. Nieuwjaer , C. Benazeth, P. Benoit – Cattin ,P. Cafarelli and M. Richazd – ViazdNuclear Instruments and Methods in Physics Research B 230 (2005) 317 – 322.

24- J . M . AL – Mukh , Ph.D . Thesis , College of ScienceUniversity of Basrah, Basrah, Iraq

, 1997 (and referencesthere in). Scattering of Ions off Adsorbate – Covered

25--J . M . AL-Mukh , Ph . D .Thesis , University of Basrah, Coollege of science , Department , Basrah , Iraq , (1997).

4-R . J . W . E . Lahaye and H . Kang , physical Review B . 67 ,

033401 , (2003).

26- R. Taranko , E. Taranko and M. Wiertel Vacuum , Vol.72

Created with nitroPDF professional
download the free trial online at nitropdf.com/professional

27- - Qasim S. K. Al - Shook, M.Sc . Thesis , Department of physics , University of Basrah , Basrah , Iraq ,(2010).

28 - Thikra S . Dh . Al-Naser , M.Sc . Thesis , Department of physics , University of Basrah , Basrah , Iraq ,(2003).

G. Witte, K. Weiss, P. Jakob, J. Braun, K. L. Kostov, and Ch. Wo¨ll, Phys. Rev. Lett. 80, 121 ,(1998).

29- G . Vidali , G . Ihm , H.-Y. Kim , and M. W. Cole, Surf . Sci Rep.12 , 133,(1991).

30- A . P. Graham , M . F. Bertino , F . Hofmann , J . P.Toennies and Ch .Woll , J . Chem . phys . 106 , 6194,(1997).

31J.Braun,D.Fuhrmann,M.Bertino,A.P.Graham,J.P.Toennies,Ch Woll,A.Bilic,and.B.GumhaHer,J.Chemphys.106,9922 ,(1997).

32- G . Benedek , J. Ellis , N. S. Luo , A . Reichmuth , P.Ruggerone , and J . P. Toennies , Phys. Rev . B 48 , 4917 ,(1993); C . Kaden , P.Ruggerone , J . P. Toennies, G . Zhang , and G. Benedek , ibid. 46, 13 509 ,(1992).

33- G . Vidali , G . Ihm , H.-Y. Kim , and M. W. Cole, Surf . Sci Rep.12 , 133,(1991).

34- P. Zeppenfeld , M . Bu¨chel , R . David , G . Comsa , C . Ramseyer, and C . G . radet,phys . Rev . B 50 , 14667 , (1994).

35- H .winter , frogress in surface science 63 , 177-247,(2000).

36- R .A . Baragiola , in "Low Energy Ion-Surface interactions " edited by J .W. Rabalais (Wiley , New York1994).Chapter4.

37-Z . Sroubek , in :Inelastic particle – Surface collisions , Eds . E .Taglauer and W . Heiland , Vol . 17 of springer series in Chemical physics (springer , Berlin)P.277, (1981).

Created with nitroPDF professional
download the free trial online at nitropdf.com/professional

.

Created with nitroPDF professional
download the free trial online at nitropdf.com/professional