تأثير مجال الليزر على عملية الالتصاق الكيميائي لجزيئة ثنائية الذرة على سطح الصلب

ماجد عبد الله ناطق و جنان مجيد المخ
قسم الفيزياء / كلية التربية/ جامعة البصرة
ISSN –1817 –2695
((الاستلام 2011/3/24، القبول 2011/5/29))

الملخص

قدم في هذه الدراسة أنموذج حسابي لدراسة الالتصاق الكيميائي لذرتين متفاعلتين على سطح صلب بوجود مجال الليزر. ولدراستنا هدف أساسي هو دراسة تأثير مجال الليزر في تحديد حالتي التأين والتفكك لغرض وصف ديناميكية تفاعل جزئية – سطح. لقد أستند أنموذجنا الحسابي إلى صيغة أعداد الإشغال المعتمدة على مجال الليزر . إذ اشتقت صيغة لأعداد الإشغال وكذلك طاقة الالتصاق الكيميائي لذرتين متفاعلتين (باعتبار الجزئية ثنائية الذرة) قريبتين من السطح أخذين بنظر الاعتبار تأثيرات التبادل على كل ذرة بين الذرتين بالاضافه إلى التأثيرات الصورية لكل ذرة. تميز هذا الأنموذج بوضوح اعتماد العلاقات على كل المتغيرات التي تخص النظام ومواصفات مجال الليزر الذي يعطي وصفاً دقيقاً لديناميكية تفاعل جزئية – سطح (بمعنى الشحنة والبرم على الذرتين المتفاعلتين) كدالة للمسافة العمودية من السطح وكذلك للمسافة بين الذرتين . طبق أنموذجنا الحسابي لنظام $H_2/W(100)$ ، إذ فحصت ديناميكية تفاعل جزئية – سطح من خلال حساب أعداد الإشغال وكل دوال الالتصاق الكيميائي كدالة لكل المتغيرات حينما تكون المسافة بين الذرتين موازية للسطح . ووجد أن لشدة الليزر تأثيراً في تحديد حالة التفاعل بين الذرتين والسطح إذ يزداد التنافر بين الذرتين كلما زادت شدة الليزر. لقد أخذنا تأثير التوجيه بنظر الاعتبار من خلال دوال التعريض بسبب الاقتران مع مستويات السطح وكذلك بسبب مجال الليزر . حسبت لكل الدوال التي تصف ديناميكية النظام كدالة للمتغيرات أعلاه بالاضافه إلى زاوية التوجيه . وبمقارنة تأثير مجال الليزر وتأثير التوجيه أتضح أن لشدة مجال الليزر تأثيرا سائدا . وعليه يصبح من المؤكد أن مجال الليزر وكذلك تأثيرات التوجيه تعتبر أداة للتحكم في عمليتي التأين والتفكك التي تحدث على سطح الصلب .

الكلمات ألمفتاحيه: الالتصاق الكيميائي لذرتين متفاعلتين على سطح الصلب – مجال الليزر – ديناميكية تفاعل جزيئه - سطح – أنموذج أندرسون

1- مقدمة Introduction

من المفترض عند التصاق الذرات والجزيئات على السطوح ، التمييز بين الالتصاق الكيميائي و الفيزياوي اعتمادا على الأواصر المتكونة بين السطح والجسيمات الملتصقة . كلا الحالتين تعتمد على عملية تكون الآصرة حتى لو كانت ضعيفة نسبيا و تتميز حالة التأصر بشكل عام بأقل طاقة للنظام . وبشكل عام كل ذرة أو جزيئة ملتصقة يحصل لها أتزان مع السطح الذي يعني أن معدل الطاقة (الطاقة المعتمدة على حركة الذرة التي تعتمد على المسافة البينية وكذلك الطاقة الداخلية للجزيئة) سوف يتلاءم مع درجة حرارة السطح [2] . وعليه فأن الطاقة الفائضة في درجات الحرية هذه سوف تتبدد إلى السطح و أن درجات الحرية هذه تحدد احتمالية اللصق Sticking (Probability) . إذا انتقلت طاقة حركية ابتدائيه (عمودية) كافية عند التصادم الأول إلى درجات الحرية هذه فأن الجزئية تنتقل على السطح وخلال انتقالها هذا يمكن أن تضرب السطح عدة مرات وبذلك تنتقل الطاقة أكثر و أكثر إلى السطح حتى يحدث الاتزان [3-6] في حالة الالتصاق على السطح الذي يصاحبه عملية تفكك هنالك قناة أضافية تنتقل الطاقة بها

وهي تحول الطاقة الحركية والداخلية للجزيئة إلى طاقة انتقالية للأجزاء المتفككة على السطح .

إن تفاعل الهيدروجين مع سطوح المعادن يعد من أهم الأنظمة في فيزياء السطوح وذلك لبساطة النظام وبالتالي توفر الدراسات العملية والنظرية التي تدرس تغير طاقة النظام وديناميكية التصاق وفصل الهيدروجين على سطوح المعادن . هذه الدراسات أسهمت في فهم المبادئ الأساسية لعملية تكوين وكسر الأواصر على السطوح [7] وعلاقة هذه العمليات بدرجة حرارة السطح ودرجة التغطية ومواقع الالتصاق على السطوح وتأثير ذلك على تحديد نوع الالتصاق فيما إذا كان ذرياً أو جزيئياً [8] .في حالة الالتصاق الكيميائي لجزيئة ثنائية الذرة على سطوح المعادن الانتقالية وجد أن اعادة ترتيب التوزيع الالكتروني للنظام يقود الى تفكك الجزيئات لتكوين جسيمات ملتصقة جديدة .

وضحنا فيما سبق أهمية الالتصاق الكيميائي للجزيئات على سطوح الصلب وتحديد كل العوامل المؤثرة على عملية الالتصاق بدون تأثير مجال الليزر . فعند وجود مجال ليزر خارجي مسلط على عملية الالتصاق هذه يصبح من السهل استخدام الليزر كأداة للتحكم بعملية الالتصاق من خلال تغير مميزات مجال الليزر المستخدم ، ويقصد هنا بمواصفات مجال الليزر كل من التردد والشدة . إن الدراسات العملية والطرائق النظرية التي تدرس تفاعلات هيدروجين – سطح في تطور مستمر إذ إنه باستخدام التطورات الأخيرة في تقنية الليزر وحزمة الجزيئات أصبح من الممكن تعيين الطاقة الانتقالية والحالات الابتدائية الاهتزازية والدورانية للجزئية الساقطة على سطح محدد التي يمكن أن تستطير أو تلتصق على السطح [9] وكذلك معالجة مسألة القلع من السطح [10,11].

يمكن أن يعمل مجال الليزر على جعل الشحنة الالكترونية تتموقع في منطقة السطح ويكون لها تأثير ملحوظ على تفاعل جسيم ملتصق- سطح . وفي حالة توفر حالات وسطية مملوءة وفارغة فأن تهيج الفجوات بسبب مجال الليزر وكذلك الالكترونات يمكن أن يستخدم لتعزيز عملية الالتصاق أو القلع للجسيمات المشحونة الملتصقة [12] .

ولما كانت أداة الليزر أداة ذات مواصفات دقيقة جدا (إذ يمكن من خلال تغير التردد والشدة تحديد عملية انتقال الشحنة وبالتالي ديناميكية أي تفاعل على سطح الصلب) أصبح لها مؤخرا دور مهم في التكنولوجيا النانوية من خلال التحكم بالحالات الالكترونية للنظام خلال عملية التفاعل [13,14] .

إن للتوجيه الزاوي (Angular orientation) للجزيئة الساقطة بأتجاة السطح دوراً كبيراً في تغيير درجات الحرية بمعنى تغيير الحالات الاهتزازية والدورانية للجزيئة مع تغيير زاويا توجيه الجزيئة بالنسبة للسطح [20] فأن التوجيه يمكن أن يستخدم كمرشح كمي) [15] (quantum filterللتحكم بالحالات الالكترونية بالاضافه إلى مجال الليزر للسيطرة على ديناميكية تفاعل هيدروجين _ سطح بمعنى السيطرة على عمليتي التفكك و التأين على السطح [19-16] والتي تعتمد أيضا على مميزات مجال الليزر والحالة الابتدائية للنظام .

إن الهدف الرئيس لهذه الدراسة هو فحص عملية الالتصاق الكيميائي لجزئية H_2 على سطح W(100) بوجود مجال الليزر . ولتحقيق أغراض الدراسة كان لابد من الاهتمام بكل الدوال التي تصف ديناميكية النظام كدالة لمواصفات الليزر . واضعين في الحسبان قيم التردد والشدة التي لا يمكن أن تسبب ارتفاع درجة الحرارة أو تحدث ضرراً (Damage) على السطح [20]

2- الأنموذج الرياضي The Mathematical Model

في هذه الفقرة سيتم استعراض الأنموذج الرياضي الخاص بالالتصاق الكيميائي الجزيئي على سطح الصلب بوجود مجال ليزر خارجي مؤثر وذلك بالاستفادة من المعالجة النظرية المقدمة في المصادر [23-21] ، والخاصة بالالتصاق الكيميائي الذري على سطح الصلب بوجود مجال ليزر خارجي مؤثر وكذلك من المعالجة النظرية المقدمة في المصادر [1,24-25] والتي تعالج تفاعل ذرتين متماثلتين بينهما مسافة محددة باعتبارها جزيئه ثنائية الذرة

متفاعلة مع السطح ، إذ تحسب كل دوال الالتصاق الكيميائي كدالة للمسافة بينهما وكذلك المسافة العمودية بين الذرة الواحدة وسطح المعدن . سنعالج أولا الحالة التي يكون فيها الخط الواصل بين الذرتين موازياً لسطح المعدن، بمعنى إهمال تأثيرات التوجيه .

تمت في المصادر [21-23] الاستفادة من المعالجة الديناميكية للوصول إلى صيغة أستاتيكية لأعداد إشغال $n_a^{\pm\sigma}$ للمستويات الذرية $E_a^{\pm\sigma}$ كدالة للمسافة العمودية **Z**

$$n_a^{\sigma} = \frac{1}{\pi}\frac{\Delta_c^{\sigma}}{\Delta_c^{\sigma}+2\Delta_L}\int_{u_0}^{E_F}\frac{\Delta_c^{\sigma}+2\Delta_L}{(E-E_a^{\sigma}(z))^2+(\Delta_c^{\sigma}+2\Delta_L)^2}dE + \frac{1}{\pi}\frac{\Delta_L^{\sigma}}{\Delta_c^{\sigma}+2\Delta_L}\int_{u_0}^{E_F}\frac{\Delta_c^{\sigma}+2\Delta_L}{(E-E_a^{\sigma}(z)-\hbar\omega)^2+(\Delta_c^{\sigma}+2\Delta_L)^2}dE + \frac{1}{\pi}\frac{\Delta_L^{\sigma}}{\Delta_c^{\sigma}+2\Delta_L}\int_{u_0}^{E_F}\frac{\Delta_c^{\sigma}+2\Delta_L}{(E-E_a^{\sigma}(z)+\hbar\omega)^2+(\Delta_c^{\sigma}+2\Delta_L)^2}dE \quad \dots (1)$$

عن السطح الصلب لذرة منفردة قريبة أو ملتصقة على السطح. بوجود مجال الليزر وكدالة لمعاملات مجال الليزر (التردد ω والشدة W_L) .

إذ تكتب صيغ أعداد الإشغال [21-23] كالأتي :-

3- الالتصاق الكيميائي لجزيئة ثنائية الذرة بوجود مجال الليزر

The Chemisorption of Diatomic Molecule in the Presence of Laser Field

a- الأنموذج الهاملتوني The Model Hamiltonian

عندما تقترب جزيئة (وهي كما أوضحنا عبارة عن ذرتين متماثلتين متفاعلتين) بالقرب من سطح الصلب [25] فأن الذرة الواحدة سوف تعاني من تأثير الاضطراب بسبب الذرة الثانية وسطح المعدن. وطبقا لأنموذج أندرسن وبأخذ التفاعلات الخاصة بالاقتران (coupling interaction) والتبادل(correlation and exchange interactions) فأن الهاملتونين يمكن أن يكتب كالأتي [24]:

$$H = \sum_{\sigma}\sum_{k}E_k^{\sigma}n_k^{\sigma} + \sum_{\sigma}\sum_{i=1}^{2}E_i^{\sigma}n_i^{\sigma} + \sum_{i=1}^{2}Un_i^{\uparrow}n_i^{\downarrow} + \sum_{\sigma}\sum_{k}\sum_{i=1}^{2}(V_{ik}C_{i\sigma}^{*}C_{k\sigma}+H.C) + \sum_{\sigma}(V_{12}C_{1\sigma}^{*}C_{2\sigma}+H.C) + \frac{1}{2}J_0(C_{1\sigma}^{*}C_{2\sigma}^{*}C_{1\sigma}C_{2\sigma}+H.C) \quad \dots(2)$$

تمثل الحدود الثلاثة الأولى من الهاملتونين أعلاه الذرتين والسطح قبل حدوث الاقتران.الجدير بالذكر أن (i=1,2) تشير الى رقم الذرة.

ويمكن تحديد تفاعلات الاقتران بالآتي[29-27]:

1- التفاعل المباشر V_{12} بين الذرة 1 والذرة 2 حيث تظهر هذه الطاقة بسبب انتقال الشحنة الالكترونية وإعادة توزيعها بين الذرتين[30] .

2- التفاعل غير المباشر V_{ik} بين الذرتين عبر مستويات حزمة الطاقة للسطح بسبب الاضطراب الحاصل لوجود الذرتين بالقرب من السطح [31-32] .الجدير بالذكر أن هذا التفاعل يرمز له عادة بالرمز $\lambda_{12}^{\pm\sigma}$ حيث يكون دالة للبرم بسبب اعتماده على داله التعريض Δ_i^{σ} وفقا لما يلي [33] :-

$$\lambda_{12}^{\pm\sigma}(E,Z,X) = -i\Delta_i^{\sigma}(E,Z)\sin(KX)/KX \quad \dots(3)$$

وبإهمال اعتماد Δ_i^{σ} على الطاقة [49] فأن داله التعريض تأخذ ألصيغه الآتية [35] :-

$$\Delta_i^{\sigma}(X,Z) = \Delta_{0i} e^{-2\alpha_i^{\sigma} Z} \quad \ldots(4)$$

يمثل Δ_{0i} دالة التعريض عند السطح (Z=0) بينما تعطى α_i^{σ} (بالوحدات الذرية) بالصيغة التالية [36]:-

$$\alpha_i^{\sigma}(X,Z) = \sqrt{2\left|E_i^{\sigma}\right|} \qquad (5)\ldots$$

أما E_i^{σ} فسنأتي على تعريفها لاحقا .وتعرف K الواردة في العلاقة (3) وفقا لما يأتي :

$$K = \sqrt{2u_0} \quad (\text{in a.u.}) \qquad \ldots.(6)$$

إذ تمثل u_0 قعر حزمة الطاقة للمعدن

إما تفاعلات التبادل فيمكن تحديدها بالآتي :

1- طاقة تفاعل كولوم ألتنافري بين الإلكترونين ذات البـــرم المتعاكس في الذرة الواحدة U

[48-50]والتي عرفت بالعلاقة (4).

2-طاقة التبادل J_0 التي تظهر بسبب تبادل برم الإلكترون بين الذرتين الملتصقتين [51] وتعرف الطاقة J_0 من خلال

وفيما يلي ملاحظات مهمة لابد من أدراجها:

1- تعتمد الطاقات V_{12} و S و J_0 وبالتالي الطاقة J على قيمة X والتي تمثل المسافة بين الذرتين فيما تعتمد U على البعد العمودي بين الذرة i والسطح من خلال الإزاحة الصورية (العلاقتان (4) (5)).

2- استفيد من البرنامج المعروف (Get Data Graph Digitizer) للحصول على جدول بقيم V_{12} و J كداله للمسافة X حيث تم الحصول على 72 نقطة وذلك بالاعتماد على منحنيات العلاقة بين كل من V_{12}و J مع X المأخوذة من المصدر [40] .

3- تشير قيم حد التبادل المؤثر J الكبيرة السالبة إلى أن طاقة الربط بين الذرتين تنافرية ولاسيما بالقرب من الـــسطح ممـــا يساعد على حدوث عملية التفكك ومن ثم الالتـــصاق علـــى السطح . أما القيم السالبة الصغيرة أو الموجبة فتشير إلى أن التفاعل بينهما تجاذبي إذ لا يمكن أن يحدث التفكك ويحـــدث بذلك التصاق كيميائي جزيئي [24] .

اعتمادا على العلاقة (2) فأن المستويات الذرية $E_i^{\pm\sigma}$ للذرتين 1و2 تعطى بمايلي [24] :

$$E_1^{\pm\sigma} = E_1^{\infty} + Un_1^{\mp\sigma} - Jn_2^{\pm\sigma} \quad \ldots(8)$$

حساب حد التبادل المؤثر J (effective exchange) :-

$$J = J_0 + 2SV_{12} \qquad \ldots(7)$$

إذ تمثل S تكامل التداخل بين الدوال الموجية للذرتين القريبتين من السطح [2-1] .

$$E_2^{\pm\sigma} = E_2^{\infty} + Un_2^{\mp\sigma} - Jn_1^{\pm\sigma} \quad \ldots(9)$$

تعطى E_i^{∞} بمايلي

$$E_1^{\infty} = E_2^{\infty} = \Phi - V_I \ldots(10)$$

تمثل Φو V_I دالة الشغل لحزمة الطاقة ومستوي التأين للذرة .

b- أعداد الإشغال *The Occupation Numbers*

تعطى صيغة عدد الإشغال للذرة (i=1,2) بالعلاقة الآتيـــة [37]:

$$n_i^{\sigma} = \int_{u_0}^{E_F} \rho_i^{\sigma}(E)dE \ldots(11)$$

يمثل E_F موقع مستوي فيرمي.إما ρ_i^{σ} فتمثل كثافة الحالات على الذرة الملتصقة وللبرم σ

وتكتب ρ_i^{σ}للنظام الموصوف بالشكل (1) وللذرتين كما يلي [24] :-

$$\rho_1^{\pm\sigma}(E)=\frac{1}{2\pi}\left\{\frac{(1+Y^{\pm\sigma}/V^{\pm\sigma})\Delta_1^{\pm\sigma}}{(E-E_+^{\pm\sigma})^2+(\Delta_1^{\pm\sigma})^2}+\frac{(1-Y^{\pm\sigma}/V^{\pm\sigma})\Delta_1^{\pm\sigma}}{(E-E_-^{\pm\sigma})^2+(\Delta_1^{\pm\sigma})^2}\right\} \quad \ldots(12)$$

$$\rho_2^{\pm\sigma}(E)=\frac{1}{2\pi}\left\{\frac{(1-Y^{\pm\sigma}/V^{\pm\sigma})\Delta_2^{\pm\sigma}}{(E-E_+^{\pm\sigma})^2+(\Delta_2^{\pm\sigma})^2}+\frac{(1+Y^{\pm\sigma}/V^{\pm\sigma})\Delta_2^{\pm\sigma}}{(E-E_-^{\pm\sigma})^2+(\Delta_2^{\pm\sigma})^2}\right\} \quad \ldots(13)$$

علما بأن الطاقات $E_+^{\pm\sigma}$و $E_-^{\pm\sigma}$ تعرف كالأتي :

$$E_+^{\pm\sigma}=E_i+\Delta E_{img}+Un^{\mp\sigma}-Jn^{\pm\sigma}+V^{\pm\sigma} \quad \ldots(14)$$

$$E_-^{\pm\sigma}=E_i+\Delta E_{img}+Un^{\mp\sigma}-Jn^{\pm\sigma}-V^{\pm\sigma} \quad \ldots(15)$$

تمثل الدالة ΔE_{img} الإزاحة الصورية [50] . وتعطى $V^{\pm\sigma}$ بما يلي :

$$V^{\pm\sigma}=\sqrt{V_{12}^2+(Y^{\pm\sigma})^2} \quad \ldots.(16)$$

وبأخذ التفاعل غير المباشر λ_{12}^{σ} بنظر الاعتبار فأن التفاعل V_{12} يصبح :

$$V_{12}^{\sigma^2}=\left|V_{12}+\lambda_{12}^{\pm\sigma}\right|^2 \quad \ldots(17)$$

وأن

$$Y^{\pm\sigma}=Ud^{\mp\sigma}+Jd^{\pm\sigma} \quad \ldots(18)$$

وتعرف الدوال d^{σ}و n^{σ}وفقا لمايلي :

$$d^{\sigma}=\frac{1}{2}(n_1^{\sigma}-n_2^{\sigma}) \quad \ldots(19)$$

$$n^{\sigma}=\frac{1}{2}(n_1^{\sigma}+n_2^{\sigma}) \quad \ldots(20)$$

وبأستخدام الصيغة الموضحة بالعلاقة (12) التي تتضمن تأثير الليزر وصيغ $\rho_i^{\sigma}(E)$الموضحة بالعلاقتين (12)و(13) يمكن أن نكتب :

$$\rho_1^{\sigma}(E)=\sum_{n=0,\pm1}\sum_{j=+,-}C_{nj1}^{\sigma}\frac{\Delta_{T_1}^{\sigma}}{(E-E_j^{\sigma}+n\hbar\omega)^2+(\Delta_{T_1}^{\sigma})^2} \quad \ldots(21)$$

حيث أن(j(=+,-تشير إلى صيغة الطاقة E_j^{σ} المعرفة بالعلاقات (14)و(15). وأن الدوال C_{nji}^{σ} تكتب كالآتي :

$$C_{0j1}^{\sigma}=\frac{1}{2\pi}(1+j\frac{Y^{\sigma}}{V^{\sigma}})\frac{\Delta_1^{\sigma}}{\Delta_{T_1}^{\sigma}} \quad \ldots(22)$$

$$C_{-1j1}^{\sigma}=\frac{1}{2\pi}(1+j\frac{Y^{\sigma}}{V^{\sigma}})\frac{\Delta_L}{\Delta_{T_1}^{\sigma}} \quad \ldots(23)$$

$$C_{+1j1}^{\sigma}=C_{-1j1}^{\sigma} \quad \ldots(24)$$

وبالتعويض عن $\rho_1^\sigma(E)$ من العلاقة (21) في العلاقة (11) وحل المعادلات تحليليا نحصل على :

$$n_1^\sigma = \sum_{n=0,\pm1}\sum_{j=-,+} C_{nj1}^\sigma \left\{ \tan^{-1}\frac{(E_F - E_j^\sigma + n\hbar\omega)}{\Delta_{T_1}^\sigma} - \tan^{-1}\frac{(u_0 - E_j^\sigma + n\hbar\omega)}{\Delta_{T_1}^\sigma} \right\} \quad \ldots(25)$$

علما بأن $\Delta_{T_1}^\sigma$ يعرف كالأتي [42] :

$$\Delta_{T_i}^\sigma = \Delta_i^\sigma + 2\Delta_L \qquad (i=1,2) \quad \ldots(26)$$

يمثل Δ_L التعريض بسبب مجال الليزر المسلط و اعتمادا على صيغة دالة التعريض يكتب كدالة لـــ Z كالأتي [42]:

$$\Delta_L = \Delta_{0L} e^{-4\alpha_L Z} \quad \ldots(27)$$

يمثل Δ_{0L} التعريض بسبب مجال الليزر عند السطح واعتمادا على تعريف دالة التعريض يمكن أن يكتب كالاتي :

$$\Delta_{0L} = \pi\bar{\rho}W_L^2 \quad \ldots(28)$$

و أن W_L تمثل شدة المجال في حين يعطى معامل الاضمحلال α_L [21,37] بمايلي:-

$$\alpha_L = \sqrt{2V_I} \quad (\text{in a.u.}) \quad \ldots(29)$$

وبأتباع الخطوات السابقة نجد أن صيغة عدد الإشغال للذرة 2 حيث تكتب $\rho_2^\sigma(E)$ وفقا للعلاقة (13) كالأتي :-

$$\rho_2^\sigma(E) = \sum_{n=0,\pm1}\sum_{\substack{j=+,m=-\\ j=-,m=+}} C_{nj2}^\sigma \frac{\Delta_{T_2}^\sigma}{\left(E - E_m^\sigma + n\hbar\omega\right)^2 + \left(\Delta_{T_2}^\sigma\right)^2} \quad \ldots(30)$$

ويمكن بالطريقة بنفسها (مع ملاحظة أن صيغة $\rho_1^\sigma(E)$ تختلف عن صيغة $\rho_2^\sigma(E)$) أن نجد صيغة عدد الإشغال للذرة 2 وبذلك يمكن أن نكتب :

$$n_2^\sigma = \sum_{n=0,\pm1}\sum_{\substack{j=+,m=-\\ j=-,m=+}} C_{nj2}^\sigma \left\{ \tan^{-1}\frac{(E_F - E_m^\sigma + n\hbar\omega)}{\Delta_{T_2}^\sigma} - \tan^{-1}\frac{(u_0 - E_m^\sigma + n\hbar\omega)}{\Delta_{T_2}^\sigma} \right\} \quad \ldots(31)$$

إذ تعرف $\Delta_{T_2}^\sigma$ وفقا للعلاقة (41) .للحصول على أعداد الإشغال الأربعة $n_i^{\pm\sigma}$ ومستويات الطاقة $E_i^{\pm\sigma}$ المقابلة لها يجب حل نظام المعادلات (25) و(31) و(8) و(9) حلا توافقيا ذاتيا (self consistent).

C_ طاقة الالتصاق الكيميائي للذرتين المتفاعلتين

The Chemisorption Energy of the Interacted atoms

تعرف طاقة الالتصاق الكيميائي للذرتين المتفاعلتين الملتصقتين على السطح بالعلاقة التالية [21]:

$$E_{ch}(V_{12},J) = \sum_\sigma\sum_i \int_{u_0}^{E_F} E\rho_i^\sigma(E)dE - \sum_{i=1}^{2} Un_i^\sigma n_i^{-\sigma} + J\sum_\sigma n_1^\sigma n_2^\sigma \quad \ldots(32)$$

وباستخدام صيغ $\rho_i^\sigma(E)$ الواردة من العلاقات (21) و(30) فأن طاقة الالتصاق الكيميائي يمكن أن تكتب كالأتي :

$$E_{ch}(V_{12},J) = \sum_\sigma \left[\sum_{n=0,\pm1}\sum_{j=+,-} C_{nj1}^\sigma \Delta_{T_1}^\sigma \int_{u_0}^{E_F} \frac{E}{\left(E - E_j^\sigma + n\hbar\omega\right)^2 + \left(\Delta_{T_1}^\sigma\right)^2} dE \right.$$

$$\left. + \sum_{n=0,\pm1}\sum_{\substack{j=-,m=+\\ j=+,m=-}} C_{nj2}^\sigma \Delta_{T_2}^\sigma \int_{u_0}^{E_F} \frac{E}{\left(E - E_m^\sigma + n\hbar\omega\right)^2 + \left(\Delta_{T_2}^\sigma\right)^2} dE \right]$$

$$-\sum_{i=1}^{2} U n_i^{\sigma} n_i^{-\sigma} + J\sum_{\sigma} n_1^{\sigma} n_2^{\sigma} \qquad \ldots(33)$$

وبحل التكاملات تحليلياً وترتيب الحدود نحصل على العلاقة التالية :

$$\begin{aligned}
E(V_{12},J) = {} & \sum_{\sigma}\sum_{n=0,\pm1}\sum_{j=+,-} C_{nj1}^{\sigma}\left(E_j^{\sigma}-n\hbar\omega\right)\left\{\tan^{-1}\frac{E_F-E_j^{\sigma}+n\hbar\omega}{\Delta_{T_1}^{\sigma}}-\tan^{-1}\frac{u_0-E_j^{\sigma}+n\hbar\omega}{\Delta_{T_1}^{\sigma}}\right\} \\
& +\sum_{\sigma}\sum_{n=0,\pm1}\sum_{j=+,-} C_{nj1}^{\sigma}\frac{\Delta_{T_1}^{\sigma}}{2}\ln\left[\frac{\left(E_F-E_j^{\sigma}+n\hbar\omega\right)^2+\left(\Delta_{T_1}^{\sigma}\right)^2}{\left(u_0-E_j^{\sigma}+n\hbar\omega\right)^2+\left(\Delta_{T_1}^{\sigma}\right)^2}\right] \\
& +\sum_{\sigma}\sum_{n=0,\pm1}\sum_{(j=+,m=-)} C_{nj2}^{\sigma}\left(E_m^{\sigma}-n\hbar\omega\right)\left\{\tan^{-1}\frac{E_F-E_m^{\sigma}+n\hbar\omega}{\Delta_{T_2}^{\sigma}}-\tan^{-1}\frac{u_0-E_m^{\sigma}+n\hbar\omega}{\Delta_{T_2}^{\sigma}}\right\} \\
& +\sum_{\sigma}\sum_{n=0,\pm1}\sum_{\substack{(j=+,m=-)\\(j=-,m=+)}} C_{nj2}^{\sigma}\frac{\Delta_{T_2}^{\sigma}}{2}\ln\left[\frac{\left(E_F-E_m^{\sigma}+n\hbar\omega\right)^2+\left(\Delta_{T_2}^{\sigma}\right)^2}{\left(u_0-E_m^{\sigma}+n\hbar\omega\right)^2+\left(\Delta_{T_2}^{\sigma}\right)^2}\right] \\
& -U\sum_{i} n_i^{\sigma} n_i^{-\sigma} + J\sum_{\sigma} n_1^{\sigma} n_2^{\sigma} \qquad \ldots(34)
\end{aligned}$$

يتضح من الطرف الأيمن من العلاقة (34) أن الحدين الأول والثاني تخص الذرة 1 أما الحدان الثالث والرابع فهما يخصان الذرة 2 فيما يمثل الحدان الخامس والسادس طاقة الالتصاق الكيميائي بسبب تفاعل كولوم ألتنافري (intra-atomic Coulomb interaction) في كل ذرة وتفاعل التبادل المؤثر لتبادل البرم بين الذرتين (inter-atomic exchange interaction) على التوالي .

4- فحص الالتصاق الكيميائي للنظام $H_2/W(100)$

Investigation of the Chemisorption for the H_2 /W(100) System

سنقوم في هذه الفقرة بدراسة وفحص الالتصاق الكيميائي لجزيئه الهيدروجين على سطح التنكستن إذ إن دالة الشغل لسطح التنكستن W(100) مساوية إلى 4.58eV [41] وأن قيمة u_0 تقع ضمن قيم الحزمة العريضة . كما أن جهد التأين لذرة الهيدروجين يساوي V_I= -13.6 eV بينما يساوي جهد الألفة V_A= -0.74 eV، علما بأن هذه الجهود مقاسه بالنسبة لمستوي الفراغ (Vaccum Level) . الجدير بالذكر هنا أن محور الجزئية موازٍ للسطح بمعنى أن تأثيرات التوجيه (Orientation Effects) لم تؤخذ بنظر الاعتبار.

5- الحل العددي The Numerical Solution

لغرض الحصول على أعداد الإشغال $n_i^{\pm\sigma}$ ومستويات الطاقة الذرية المقابلة $E_i^{\pm\sigma}$ ودوال الالتصاق الكيميائي وكل الدوال المتعلقة ، كان لابد من حل المعادلات (8) و(9) و(25) و(31) حلا ذاتيا توافقيا ، إذ تم التأكد من أستقرارية الحل العددي عند كل خطوة حسابية . يحسب البرنامج كل الدوال لقيم محددة لـ X و $\hbar\omega$ و W_L كدالة لقيم Z التي تتغير من $0A^0$ إلى $10A^0$ ، إذ اعتبرت كل الدوال المحسوبة عند قيم محددة لـ Z محددة كشروط ابتدائية لحساب الدوال الخاصة بقيمة Z اللاحقة .

إن دراسة الالتصاق الكيميائي بشكل عام يسهل عملية اختيار الشروط الابتدائية التي تقع عند أكبر قيمة لـ $Z(=10A^0)$ حيث تكون الذرتان بعيدتين عن السطح ولقيمة

محددة للمسافة بينهما . وعليه يمكن استخدام قيم طاقة التأين والألفة للذرة المفردة المعزولة أخذين تأثير التبادل ضمن الذرة الواحدة والتبادل في البرم للذرتين بنظر الاعتبار . أن أعداد الإشغال للمستويات الذرية الأربعة في الذرتين المتفاعلتين عند $Z=10A^0$ تكون مساوية إلى :

$$n_1^{\sigma} = n_2^{\sigma} = 1.0$$
$$n_1^{-\sigma} = n_2^{-\sigma} = 0.0 \qquad (35)$$

في حين تحسب المستويات الذرية المقابلة وعند المسافة نفسها وفقا للعلاقة الآتية :-

$$E_1^{\sigma} = E_2^{\sigma} = (\Phi - V_I) - J$$
$$E_1^{-\sigma} = E_2^{-\sigma} = (\Phi - V_I) + U \qquad (36)$$

الجدير بالذكر أن مرجع الطاقة E=0 في حساباتنا يقع عند مستوي فيرمي Fermi Level وأن اختيار البرم عشوائي كما أن كل التأثيرات التي تم الإشارة اليها بالفصل الثاني أخذت بنظر الاعتبار. لغرض الحصول على أستقرارية عالية للحل العددي تمت مراعاة التقطيع في قيم Z حيث اعتبرنا $\Delta Z = 0.1A^0$ لكل قيم Z المحصورة بين ($10A^0$ و $4A^0$) بينما اعتبرنا $\Delta Z = 0.001A^0$ لقيم Z المحصورة بين ($4A^0$ و $0A^0$) .

6- حساب أعداد الإشغال بوجود مجال الليزر

Occupation Number Calculation in the Presence of Laser Field

لا يخفى على الباحثين في هذا المجال أن حساب أعداد الإشغال $n_i^{\pm\sigma}$ يعني الحصول على مستويات الطاقة الخيالية الذرية $E_i^{\pm\sigma}$ ومستويات الطاقة الخيالية الجزيئية $E_{\pm}^{\pm\sigma}$ وكل دوال الالتصاق الكيميائي المتعلقة بها والتي جميعها تعد مدخلات لحساب طاقة الالتصاق الكيميائي [32]. وبمقارنة هذه الأشكال مع مجموعة الأشكال الخاصة بشدة W_L=0.1 a.u نجد أن قيم أعداد الإشغال عند السطح تقل مع زيادة شده مجال الليزر ولكل قيم X و ω . هذه الإعداد موضحة بالشكل (1) لقيمتي W_L ولقيم $\hbar\omega = 1,3,5eV$ حيث تقل قيم أعداد الإشغال مع نقصان X وزيادة التردد لقيمة محددة من قيم W_L . من المعروف أن من أهم الملاحظات التي يجب أن تسجل هو تأثير مجال الليزر على المسافة Z_{ch} التي يحدث عندها تغير حالة النظام من الحالة المغناطيسية M إلى الحالة غير المغناطيسية M ، إذ يعد مجال الليزر أداة مناسبة لتغير حالة الشحنة والبرم للجسيم الملتصقة على السطح. يوضح الجدول (1) قيم Z_{ch} كدالة لمعاملات مجال الليزر وقيم X المختلفة والتي يتضح منها أنه لقيمة W_L=0.1a.u ولقيمة محددة من قيم ω نقصان Z_{ch} مع زيادة X ، بينما تزداد Z_{ch} مع زيادة التردد لقيمة محددة من X . إما عندما تزداد شدة مجال الليزر تبقى الملاحظات إعلاة صحيحة فيما يخص زيادة التردد والمسافة بين الذرتين .

7- حساب طاقة الالتصاق الكيميائي *The Chemisorption Energy Calculation*

حسبت سطوح الجهد وفقا للعلاقة (34) وكذلك طاقة التفاعل ΔE كدالة لقيم X ولمعاملات الليزر المختلفة،من المعروف انة لا يمكن أن نسجل ملاحظة دقيقة حول تأثير معاملات الليزر على عملية التصاق الذرتين المتفاعلتين وبالتالي عملية التفكك التي يمكن أن تحدث على السطح ألا عند حساب ما يعرف بطاقة التفاعل ΔE . تعرف طاقة التفاعل ΔE على أنها التغير في قيم طاقة الالتصاق الكيميائي $E_{ch}(V_{12}, J)$ بين الحالة $V_{12} = J = 0$ (عند قيم X الكبيرة) وحالة $J \neq 0$ و $V_{12} \neq 0$ والتي يمكن حسابها لكل قيم X وعند Z=0 وفقا للعلاقة التالية [45 :-]

$$\Delta E(X) = E_{ch}(V_{12}, J, X) - E_{ch}(V_{12} = 0.0461eV, J = 0.0114eV, X = 6.001) \quad ...(37)$$

يوضح الشكل (2) حساب ΔE للنظام المستخدم كدالة لـ X ولكل قيم معاملات مجال الليزر . الجدير بالذكر أن اختيار قيم W_L لم يكن اعتباطياً حيث أن قيم W_L=0.1a.u. تعطى قيمة لـ Δ_{0L} أصغر من $\Delta^{\sigma}_{0i} = 3.0eV$ (وهي ثابتة لكل الحسابات) بينما تعطي W_L=0.2a.u قيمة لـ Δ_{0L} أكبر من $\Delta^{\sigma}_{0i} = 3.0eV$. من المعروف أن أشارة ΔE تحدد نوع التفاعل فيما إذا كان تنافرياً أو تجاذبياً ،حيث أن ΔE = + يعني أن التفاعل تنافري بينما ΔE = - يعني أن التفاعل تجاذبي . يؤكد الشكل (2, b) حصول عملية التفكك للذرتين المتفاعلتين عند قيم $X \le 2.5$ ولكل قيم التردد ω عندما W_L=0.2a.u . بينما يؤكد الشكل (a) أن تغير حالة التفاعل من تجاذب إلى تنافر (بالمقارنة مع المنحنى الخاص بعدم وجود الليزر) بينما لا يظهر أي تأثير للتردد مع زيادة شدة المجال . ما سبق يؤكد أن مجال الليزر يعد كأداة لحدوث عملية التفكك والالتصاق كذرات مفردة على السطح .

8- المعالجة النظرية لتأثير التوجيه

The Theoretical Treatment of the Orientation Effect

وبأخذ تأثير التوجيه لحالة التوجيه لجزئية H_2 الثنائية الذرة ، إذ أن مسافة الذرة 1 تكون مساوية إلى قيمة Z التي تتغير في معالجاتنا من $10A^0$ إلى $0A^0$ ، بمعنى أن Z_1=Z . أما مسافة الذرة 2 فهي تتغير تبعا للعلاقة Z_2=Z+Z' حيث أن Z' ترتبط بزوايا التوجيه $\left(\theta = \frac{\pi}{6}, \frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{3}, \frac{\pi}{2}\right)$ بالعلاقة $Z' = X\sin\theta$.

وعليه فأن كل العلاقات التي تخص الذرة 2 الواردة في الفقر الثالثة والمعتمدة على المسافة تكون معتمدة على المسافة الجديدة Z_2 ونخص بالذكر دوال الالتصاق الكيميائي (دوال التعريض) والإزاحة الصورية .

ولغرض فحص تأثير التوجيه في حساب طاقة التفاعل ΔE ، تم في الأشكال من (3) إلى (6) استعراض حساباتنا كدالة للمسافة بين الذرتين وللترددات $\hbar\omega = 1,3,5$ eV وللشدتين W_L= 0.1,0.2 a.u. . يتضح من هذه الأشكال أنة عندما W_L= 0.1 a.u. تزداد قيم طاقة التفاعل مع نقصان المسافة X حتى تصل إلى قيمه X التي بحدود $2.5\ A^0$ عندها تقل طاقة التفاعل مع نقصان قيمه X . يمكن تفسير ما سبق على أساس حدوث " حالة انتقال " (transition state) حيث تكون دوال التعريض بسبب الاقتران مع مستويات السطح أكبر من دوال التعريض بسبب مجال الليزر لكل قيم X أقل من $2.5A^0$. في حين لقيمة W_L= 0.2 a.u. تزداد طاقة التفاعل مع نقصان قيمة X ولكل قيم زوايا التوجيه حيث تكون دوال التعريض للذرة 2 بسبب مجال الليزر أصغر من دوال التعريض بسبب الاقتران مع مستويات الطاقة للسطح ولكل قيم X . وبمقارنة الأشكال المقابلة لقيم θ المختلفة نجد أن تأثير الليزر هو السائد مع ملاحظة أن موقع " حالة الانتقال " على محور X يقل كلما زادت زاوية التوجيه عندما تكون W_L= 0.1 a.u . الجدير بالذكر أن المنحنى (الأزرق) في الأشكال من (3) إلى (6) يمثل قيم ΔE التي تم حسابها كدالة لـ X و لزاويا التوجيه المثبتة على الأشكال في حالة عدم وجود مجال الليزر وذلك لغرض المقارنة مع حساباتنا في حالة وجود مجال الليزر . هذه المنحنيات تؤكد أيضا صحة حساباتنا حيث يكون تصرف ΔE تذبذبياً مع تغير X [64] مع ملاحظة اختلاف سعة التذبذب مع زوايا التوجيه .

9- الاستنتاجات The Conclusions

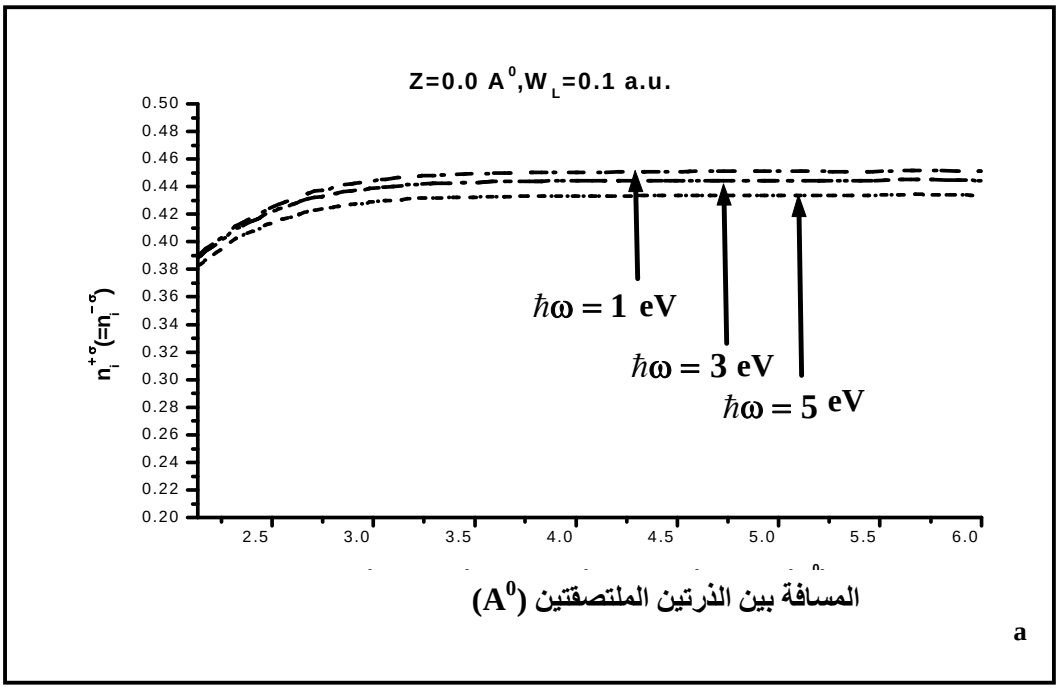
1- يمكن استخدام مجال الليزر من خلال تغيير تردده كأداة للتحكم بدرجة تأين الذرتين المتفاعلتين وبالتالي تحديد نوع الحلول فيما أذ كانت مغناطيسية أم غير مغناطيسية بمعنى تحديد محصلة البرم على كل ذرة .

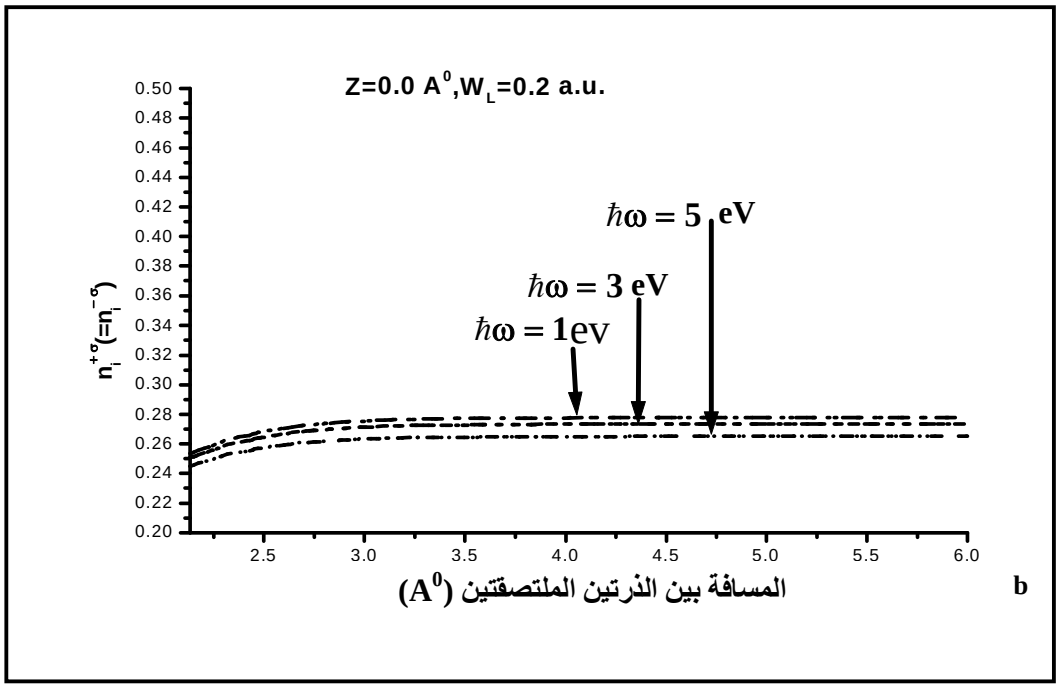
2- يمكن استخدام مجال الليزر من خلال تغيير شدته كأداة للتحكم بنوع التفاعل بين الذرتين الملتصقتين على السطح سواء أكان تنافرياً أم تجاذبياً . فكلما زادت شدة المجال كان التفاعل تنافرياً بمعنى ستكون دائما هناك فرصة لحدوث

عملية التفكك . أن المستويات الذرية للذرة 2 والتي تكـــون أعداد إشغالها عالية يمكن تصورها على أساس أنها مدارات تأصر جزيئية وأن المستويات الذرية للـــذرة 1 ذات أعـــداد الإشغال الأقل يمكن تصورها على أساس أنها مـــدارات لا تأصر جزيئية وأن عملية أعادة توزيع الشحنة الالكترونيـــة بين هذه المدارات عبر مدارات السطح هي المسؤولة عـــن عملية التفكك .

3- بأخذ تأثيرات التوجيه بنظر الاعتبار بالإضافة إلى تأثير مجال الليزر أتضح أن تأثير التوجيه يكون سائد عند الشدة الواطئة (بالمقارنة مع حالة عدم وجود مجال الليزر) بينمـــا تأثير مجال الليزر يكون سائد عند الشدة الأعلى نسبيا .

4- اعتمادا على ماسبق يمكن أن نستنتج أن مجال الليـــزر والتوجيه يعدان كلاهما معا أداة للـــتحكم بعمليتـــي التـــأين والتفكك للجزيئات الملتصقة على سطح الصلب

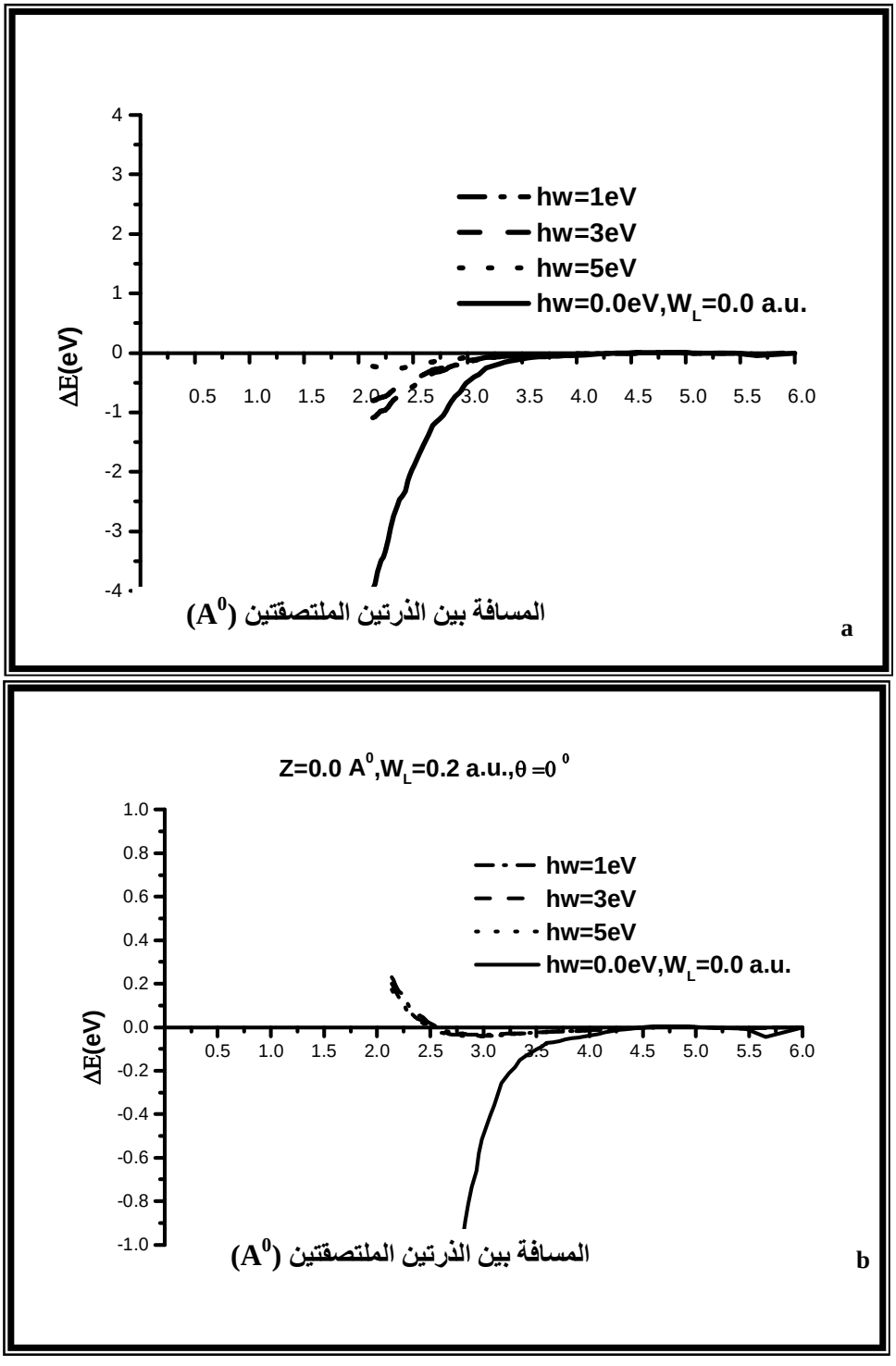




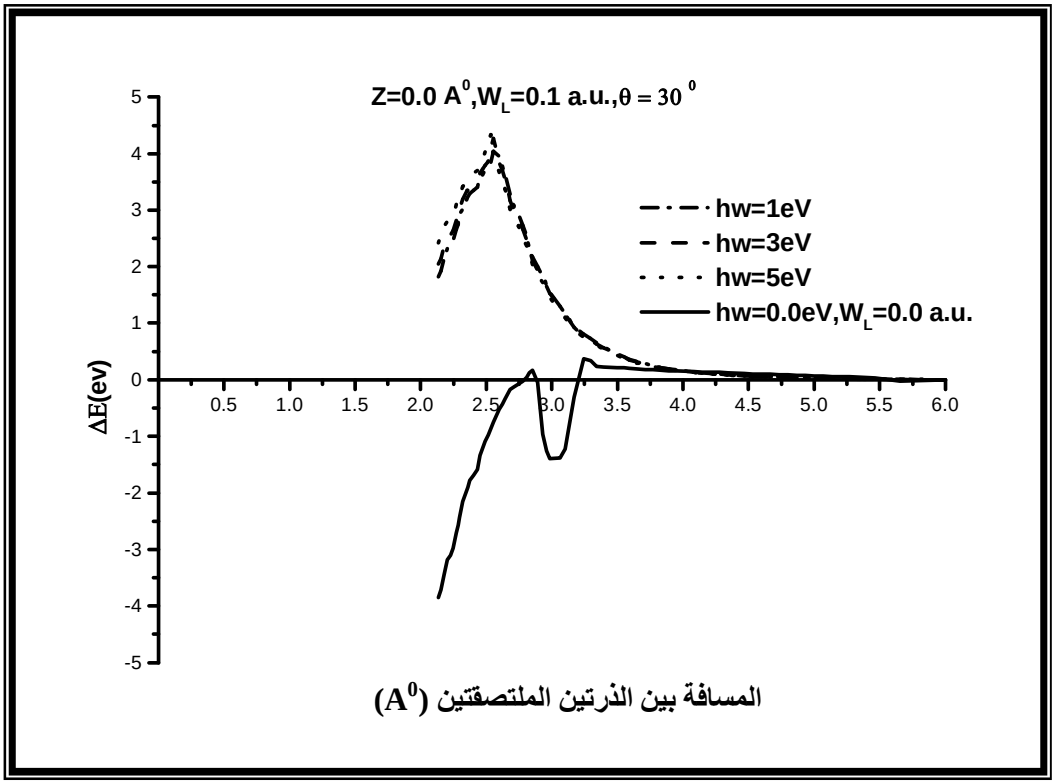
الشكل (1) يوضح تغير $n_i^{+\sigma}(=n_i^{-\sigma})$ **كدالة للمسافة بين الذرتين الملتصقتين عند السطح ولترددات مختلفة ولشدة الليزر (a)** W_L=0.2 a.u. **(b)**، W_L=0.1 a.u.

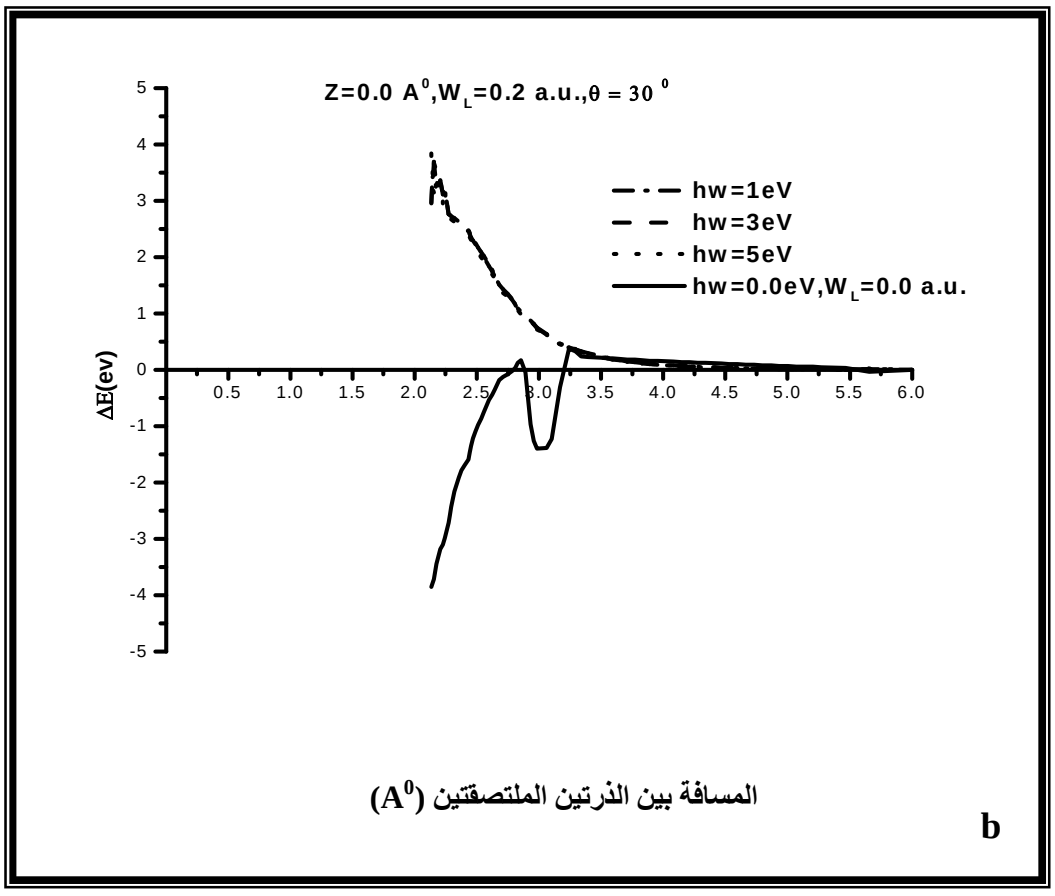
الجدول رقم (1) يوضح قيم Z_{ch} كدالة للمسافة بين الذرتين ولمعاملات مجال الليزر

	$Z_{ch}(A^0)$					
	0.1a.u W_L =			**W_L=0.2a.u.**		
$X(A^0)$	$\hbar\omega = 1eV$	$\hbar\omega = 3eV$	$\hbar\omega = 5eV$	$\hbar\omega = 1eV$	$\hbar\omega = 3eV$	$\hbar\omega = 5eV$
2.1335	---------	----------	----------	----------	----------	----------
2.3202	1.054	1.062	1.070	1.064	1.093	1.1170
2.4312	0.809	0.823	0.830	0.834	0.874	0.886
2.5116	0.618	0.636	0.723	0.737	0.710	0.721
2.6213	0.518	0.538	0.547	0.577	0.621	0.637
2.7095	0.326	0.331	0.385	0.410	0.426	0.481
2.8534	0.223	0.233	0.264	0.312	0.340	0.392
2.9834	0.169	0.193	0.227	0.288	0.317	0.363
3.1699	0.143	0.163	0.196	0.267	0.301	0.342
3.3404	0.132	0.159	0.189	0.262	0.295	0.334
4.6645	0.124	0.144	0.170	0.249	0.285	0.321
6.0010	0.117	0.135	0.172	0.250	0.286	0.322

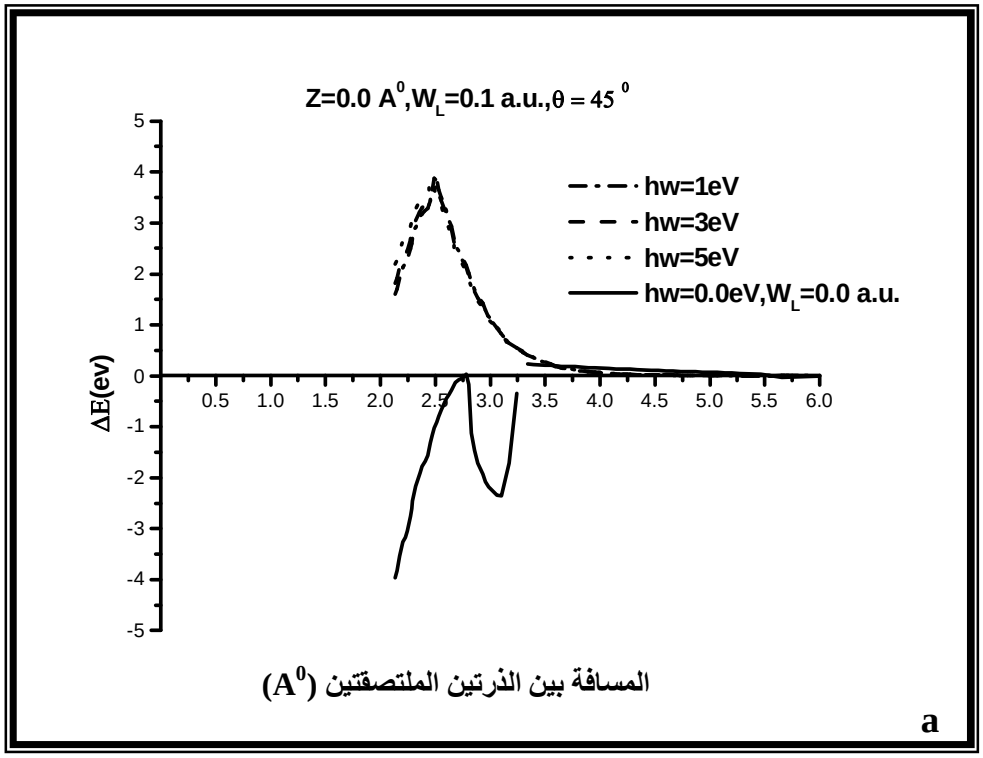


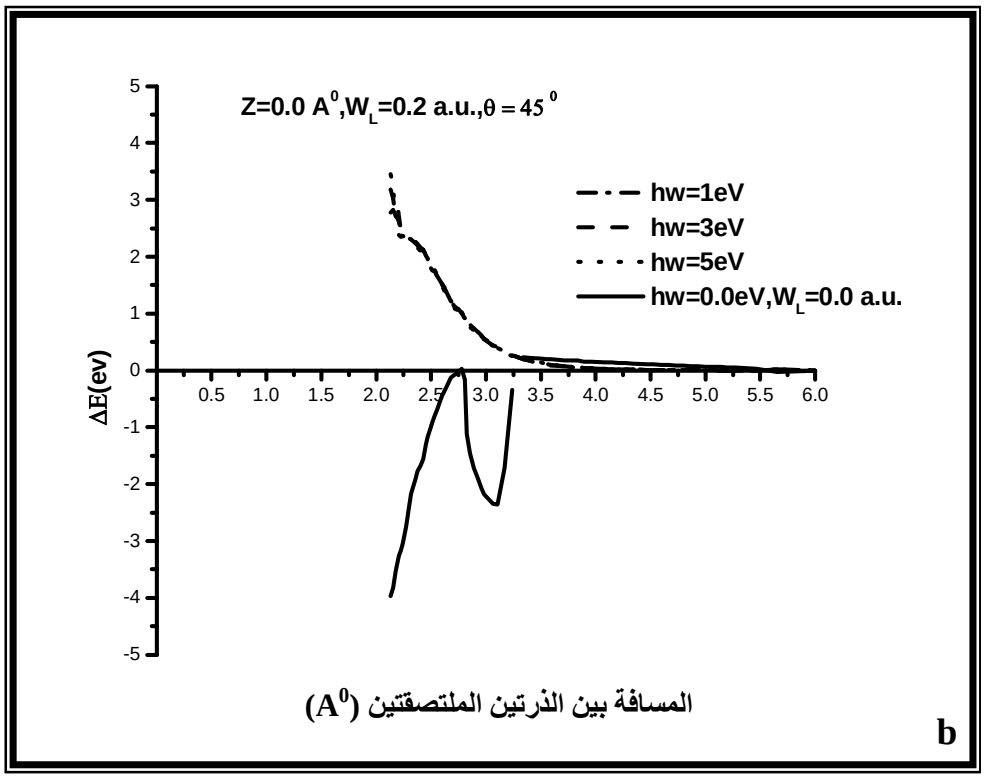
الشكل (2) يوضح طاقة التفاعل عند السطح كدالة للمسافة بين الذرتين الملتصقتين ولترددات مختلفة وشدة مجال الليزر (a) W_L=0.1 a.u. (b) W_L=0.2 a.u.



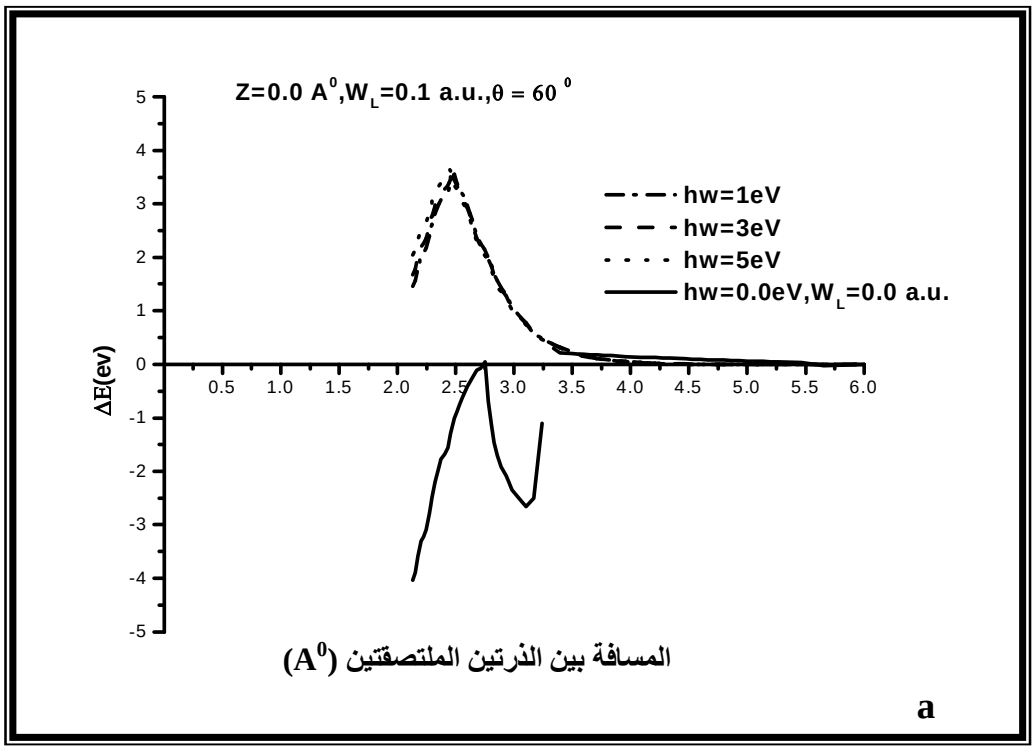


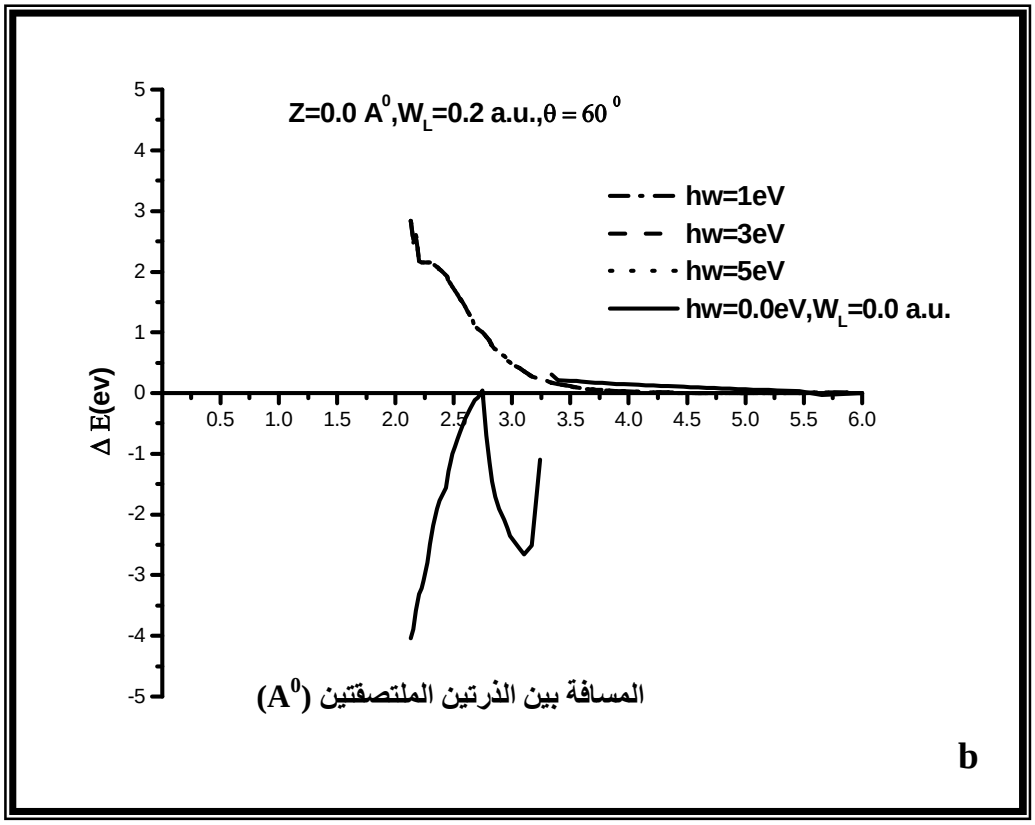
الشكل (3) يوضح طاقة التفاعل كدالة للمسافة X ولترددات مختلفة ولزاوية التوجيه $\theta = 30^0$ ، عندما
W_L= 0.2 a. u. (b) W_L= 0.1 a. u (a)





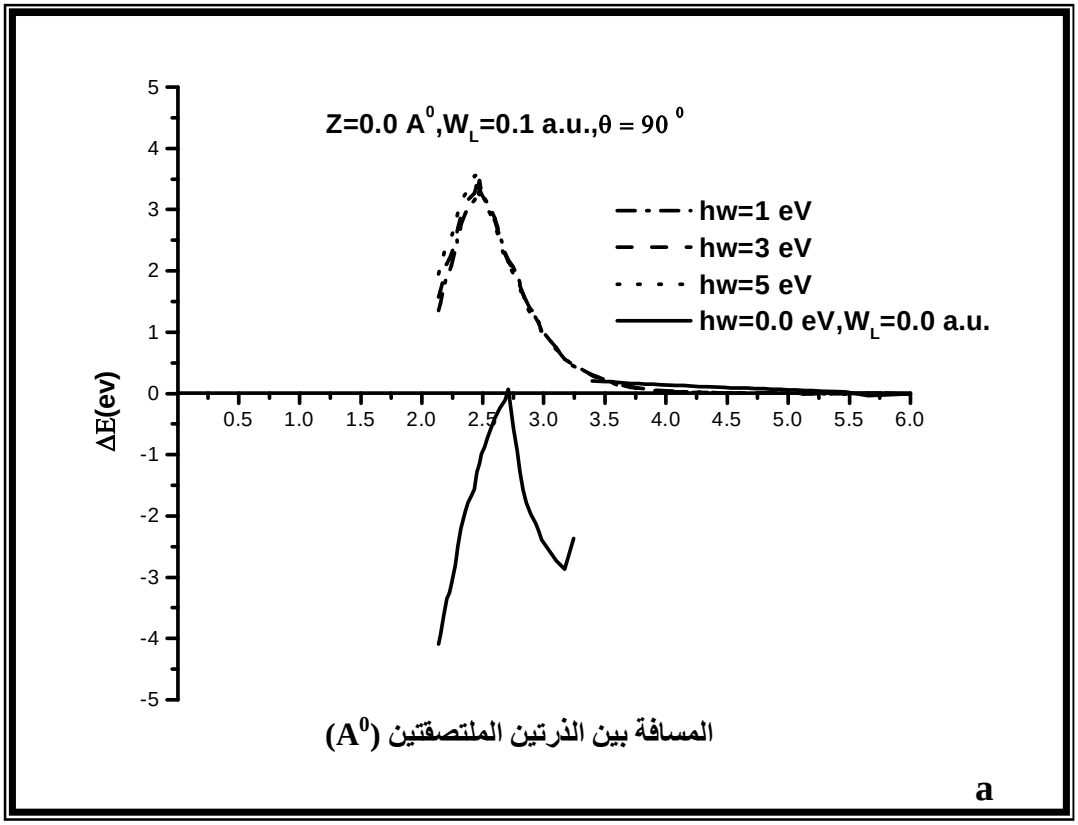
الشكل (4) يوضح طاقة التفاعل كدالة للمسافة X ولترددات مختلفة ولزاوية التوجيه $\theta = 45^0$ ، عندما
W_L= 0.2 a. u. (b) W_L= 0.1 a. u (a)

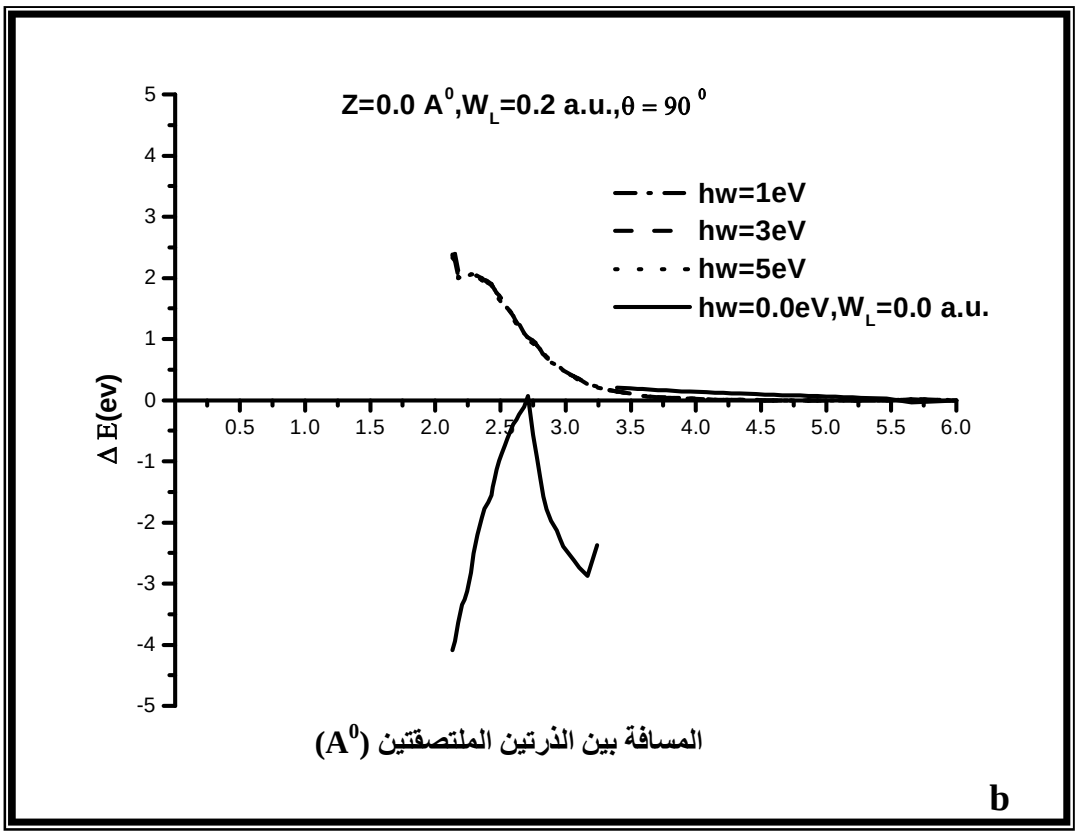




الشكل (5) يوضح طاقة التفاعل كدالة للمسافة X ولترددات مختلفة ولزاوية التوجيه $\theta = 60^0$ ، عندما .

W_L= 0.2 a. u. (b) W_L= 0.1 a. u (a)





الشكل (6) يوضح طاقة التفاعل كدالة للمسافة X ولترددات مختلفة ولزاوية التوجيه $\theta = 90^0$ ، عندما .

W_L= 0.2 a. u. (b) W_L= 0.1 a. u (a)

10 – المصادر

References

1- M. K. Shamer ," Theoretical study in the Molecular Chemisorption for Diatomic Molecular on Transition Metal surface ",M.Sc.Thesis , University of Basrah, College of Education, Basrah , Iraq(2006).

2- L.Romm, G.Kate,+R.Kosloff, and M. Asscher, J. Phys. Chem. B, 101, 2213-2217, (1997).

3- D. Drakova and G. Doyen, Surface Science 226, 263-285,(1990)

4- A. D.van Langeveld , A. de Koster and R. A. van Santen,
Surface Science 225,143- 150. (1990).

5- B.Gumhalter, K. Hermann and K Wandelt, Vacuum/ Vol. 41,Nos. 1-3, 192- 194(1990)

6- S. Schubert, U. lmke and W. Heiland, Vacuum/ Vol. 41, Nos. 1-3, 252 - 194(1990).

7- Pio K. Schmidt, K. Christmann, Georg Kresse, Jurgen Hafner,
Markus Lischka and Axel GroB, Physical Review Letters, Vol.87, No.9,(2001) .

8- G. Kresse, Physical Review B 62 ,8295,(2000).

9- T.F.George, J. Lin, A. C. Beri and W. C. Murphy, Progress in Surface Science, Vol. 16, pp 139 – 274, (1984); Alexandre S. Leal,Claudio, Gouvea dos Santos, Cristina
M.Quintella and Heloiza H.R.Schor , J. Braz. Chem. Soc.,Vol. 10, No. 5, 359-362, (1999) .

10- Chi-Fong Lei, " Using Ultrafast Extreme-Ultraviolet Pulses for Time- Resolved
Dynamics of Molecules Chemisorbed on Metal Surfaces", PhD. Thesis, University of Michigan, (2003).

11- Jonghyak Kim, " Quantum State-Resolved Studies of Sticking and Elastic Scattering of H_2 from Cu(100)", Ph.D Thesis, University of Texas, Austin, (2006) .

12- W. C. Murphy and T. F. George, Journal of Physical Chemistry ,86, 4481, (1982) .

13-T. Klamroth, Dominik Kroner and Peter Saalfrank, Phys. Rev. B 72,205407 (2005) .

14- V. Ho. W. K. Choi, C. L. Heng and V. Ng, Mater. Phys. Mech. 442-45, (2001).

15- Wilson Agerico Dino, Hideaki Kasai and Ayao Okiji, Dynamics
quantum filtering in hydrogen – surface reactions, Surface Science 418, L39-L44,(1998) .

16- X. Chu and Shih-I Chu, Phy. Rev. A 70,061402 (R)(2004).

17- S. I. Chu, J. Chem. Phys. 123,062207 (2005) .

18- D. A. Telnov and Shih-I Chu, Phy. Rev. A 76,03412 (2007).

19- D. Pavicic, K.F. Lee, D. M. Rayner, P. B. Corkum and D. M. Villeneuve, Phys. Rev. Lett. 98, 243001 (2007) .

20- Maged A. Nattiq**,"** Laser Field Effect on the Chemisorption Process of Diatomic
molecule on Solid Surface ", M.Sc. Thesis, University of Basrah , College of
Education , Basrah , Iraq(2010).

21- I. Q. Taha,"Atom-(Ion)-Surface Charge Exchange
Processes in the Presence Laser Field", 'Ph.D. Thesis, University of Basrah , Basrah , Iraq(2008). (and references There in),

22-I.Q.Taha,J.M.AL.Mukh and S.I.Easa,Journal of Basrah
Researches(Sciences), Vol.35.No.6(2009)

23-I.Q.Taha,J.M.AL.Mukh and S.I.Easa,Journal of Basrah
Researches(Sciences),Vol.36,No.4,(2010).

24-Y.Muda,Bull-Nara, Univ. Educ., Vol.32,NO.2,85(1983)

25-H. A. Jassem ,"Theoretical study in the Molecular Chemisorptions on Metal
Surface",Ph.D. Thesis, University of Basrah , Basrah , Iraq(2003).

26 - J. W. Gadzuk, Physical Review. B 79, 073411 (2009).

27 -V. S. Stepanyuk, L. Niebergall, A. N. Baranov, W. Hergert and P. Bruno, Computational Materials Science 35, 272 – 274 (2006) .

28- V. S. Stepanyuk, L. Niebergall, R.C. Longo, W. Hergert, P. Bruno, Phys. Rev. B 70, 075414(2004) .

29-O. Pietzsch, A. Kubetzka, M. Bode, R. Wiesendanger, Phys. Rev. Lett. 92, 057202 (2004) .

30-J.C.Slater,"Quantum Theory of Molecules and Solid",Vol.1,McG raw- Hill BookCompany,INC,New York,(1960).

31-T.B.Grimley,Proceeding of Physical Society,90,751-764,1967.

32- J. A. Lebosse, J. Lopez and J. Rousseau-Violet,
Surface Science 81, L329-L332, (1979); J.C. Lebosse, J.Lopez and J.Rousseau-Violet, Surface science 81, 329-332, (1979).

33 -S.Alexander and P.W. Anderson,Physical Review . 133,6,A1594, (1964).

34 -D.M.Newns,Physical Review,178,1123,(1969).
35-B.Kjollerstorm,D.J.Scalapino and J.R.Shrieffer, Physical Review,148(2),665,(1966).
36-T.B.Grimley and V.C.Jyothibhasu,Surface Science,124,305,(1983).
37 -J.M.AL.Mukh,Ph.D.Thesis, University of Basrah, College of Science, Physics Department, Basrah, Iraq (1997).
38-Haider Qassim AL-Edany,"Filed Desorption of Ions(toms) from Solid Surface " , M.Sc.Thesis, University of Basrah, College of Education, Basrah, Iraq (2002).
39-J.R. Schrieffer and D.C. Mattis, Physical Review, 140,A1412, (1965).
40 J.C.Slater, Quantum Theory of Molecules and Solid, Vol.2.McG raw-HillBookCompany, INC, New York,(1960).
41-A.Modinos,in "Field Thermionic and Secondary Electron Emission Spectroscopy",(Plenum Press,new York),(1985).

Laser Field Effect on the Chemisorption Process of Diatomic molecule on Solid Surface

Maged A. Nattiq , Jenan M. AL-Mukh
University of Basrah , college of education , department of physics

Abstract

In this study ,a mathematical model to study the chemisorption of two interacting atoms on solid surface in the presence of laser field is presented . Our study has aim only , the study the effect of laser field on determining the ionization and dissociation states to describe the molecule – surface interaction dynamics . Our mathematical model is based on the occupation numbers formula that depends on the laser field and which is derived according to Anderson model for single atom adsorbed on solid surface. Occupation numbers formula and chemisorption energy formula are derived for two interacting atoms (as a diatomic molecule)as they approach to the surface taking into account the correlation effects on each atom and between atoms as well as the image effect on each one . This model is characterized by the obvious dependence of the relations on the system variables and the laser field characteristics which gives precise description for the molecule – surface interaction dynamics (i.e. the charge and spin on the interacting atoms) as a function of the normal distance from the surface and the distance between atoms .Our mathematical model is applied to the H_2/W(100) system for academic and experimental reasons, where the molecule-surface interaction dynamics is investigated by calculating the occupation numbers and all the chemisorption functions as a function of all variables when the distance between the atoms is parallel to the surface.It is found that the type of interaction between the atoms and surface , whether it is repulsive or attractive , is determined by the laser strength where the repulsion between the two atoms increases with the laser strength increasing . The orientation effects are taken into account throughout the broadening functions due to the coupling with surface energy levels and as well as due to the laser field.Extended calculations for all functions, that describe the system dynamics, are presented as a function of all variables as well as the orientation angle. By comparing the orientation effect and laser field effect, it is concluded that the laser field effect is dominant .It is found that by taking the orientation effects, the interaction is repulsive for both strength values that used (0.1a.u.,0.2a.u.) in this research as compared with the case of incorporating laser field only or orientation effect only. So it makes sure that the laser field as well as the orientation effects can be consider as a tool to control the ionization and dissociation processes that happen on the solid surface .