



حساب معدل الحركة لنقطة كمية بحجم الذرة باستخدام المجهر النفقي الماسح

فؤاد نمر عجيل¹ و جنان مجيد المخ²

¹قسم الفيزياء، كلية العلوم، جامعة ذي قار، العراق

²قسم الفيزياء، كلية التربية، جامعة البصرة، العراق

الاستلام 21-12-2011، القبول 28-2-2012

المخلص Abstract

في هذا العمل سيتم حساب معدل حركة نقطة كمية بحجم الذرة ملتصقة على سطح صلب باستخدام مجس مجهر STM، ولذلك استند في حساباتنا الى طريقة دالة جرين غير المتزنة لـ Keldysh. حيث وُصِفَها ملتونين الانتقال لنمط الارتفاع الثابت. وتم حساب وفحص معدل الاضمحلال الاهتزازي بسبب إثارة زوج الكترون-فجوة ومعدل التوليد الاهتزازي بسبب تيار النفق غير المرن وكذلك المعدلات الكلية للأثارة الاهتزازية واعادة التهدئة بين مستويات بئر الجهد. هذه المعدلات ترتبط بمفهوم ما يسمى بدرجة الحرارة المؤثرة والتي تدخل جميعها في حساب معدل الحركة كدالة لكل متغيرات المعالجة وبالأخص فولتية الانحياز ودرجة الحرارة وتفاعل اقتران الكترون-اهتزاز.

1. المقدمة Introduction

لمجهر STM هو نتيجة ظاهرة النفق الكمي (quantum tunneling) فعندما يقترب رأس المجس الموصل (tip) من السطح المراد فحصه يسלט فرق جهد بين السطح ورأس المجس يسمح بمرور الالكترونات من خلال نفق في الفراغ بينهما نتيجة تداخل الدوال الموجية، تيار الالكترونات هذا يعرف باسم تيار النفق (tunneling current) الذي يتغير نسبة لارتفاع السطح والكثافة الموضعية للعينة وفرق الجهد المسلط.

استخدم مجهر STM في بداية الامر لتصوير السطوح، لكنه استخدم لاحقاً لاستكشاف الظواهر السطحية ذات المقياس الذري باستخدام مطيافية (التحليل الطيفي) المسح النفقي STS^[2] وكذلك المعالجة الذرية (manipulation of atom)^[3] من خلال الكترونات النفق المنبعثة من رأس مجس STM التي يمكن ان

إن المجالات الواسعة لعلم الإبعاد النانوية والنانوتكنولوجي كانت بسبب حقيقة كون الجسيمات النانوية تتغير صفاتها بشكل مفاجئ عن تلك للمواد الصلدة (bulk material). ولغرض تصنيع التراكيب النانوية فإنه من المفترض أن يعمل الباحث على وضع كل ذرة في الموقع الذي يرغب به للحصول على الخصائص المطلوبة والتي يمكن ان تحصل عن طريق معالجة الذرات المفردة باستخدام المجهر النفقي الماسح STM (Scanning Tunneling Microscopy)^[1]. ان مجهر STM سمح لأول مرة برؤية الذرة وفي الابعاد الثلاثة، وهذا ناتج من قدرته التحليلية العالية التي مكنته من الحصول على صور للذرات داخل المواد بالإضافة الى التحكم في الذرات وتحريكها، ان المستوى العاليي للتحليل غير المسبوق

الالكترونات النفق (tunneling electrons), والمجال الكهربائي (electric field). وفيما يخص المعالجات النانوية فيعتبر مجهر STM احد أكثر الأدوات قوة في استخدامه كأداة للمعالجة لتوليد تفاعلات كيميائية في مجال المعالجات النانوية [5].

من المعروف لدى الباحثين في هذا المجال انه تم مؤخراً تسجيل مختلف النتائج العملية في مجال مجهر (مطيافية) النفق الماسح STM (STS) للجسيمات النانوية الملتصقة على سطوح الصلب وذلك لدراسة الخواص التركيبية والالكترونية لهذه الانظمة. وكانت هنالك العديد من المحاولات لإيجاد معالجة نظرية تخص نظرية مجهر STM بحيث يمكن مقارنة النتائج التي نحصل عليها مع النتائج العملية. قدم Tersoff و Hamann [6] دراسة نظرية لحساب النفق بين سطح حقيقي ورأس مجس STM وذلك لغرض مقارنة النتائج مع الملاحظات العملية للنظام المستخدم, و قدم Person و Baratoff [7] دراسة نظرية لنفق الإلكترون من ذرة رأس المجس المفردة الى جزيئة ملتصقة كيميائياً على سطح معدن. و قدم Mingo و مشاركوه [8] نظرية خاصة بمجهر STM تستند إلى صيغة دالة Keldysh-Green إذتضمنالحل حساب كثافة الحالات المقابلة لرأس المجس والنموذج واستخدموا صيغة Linear (Combination of Atomic Orbitals) LCAO لحساب الالتصاق الكيميائي للذرات على سطوح المعادن وأشباه الموصلات. و وضع Schiller و Hershfield [9] نظرية توضح اعتماد تيار النفق بين رأس مجس STM وذرة ملتصقة على سطح معدن على الفولتية ودرجة الحرارة والموقع حيث استخدمنا نموذج اندرسون لإيجاد صيغة لتيار النفق الضعيف بدلالة دالة جرين للذرة الملتصقة ودالة جرين للسطح وكذلك عناصر مصفوفة النفق. وكذلك قام Ghosh و مشاركوه [10] باستخدام طريقة EAM (Embedded Atom Method) لحساب الطاقة الكلية المعتمدة على تفاعل الجهود. كما قام كل من Chen و مشاركوه [11] بحساب صور STM للنظام باستخدام حسابات الطاقة الكلية للتركيب الالكتروني بالاعتماد على DFT (Density Functional

تستخدم كمصدر بمقياس ذري لعمل اثارات الكترونية واهتزازية ولتنفيذ معالجة الجسيمات الملتصقة (adsorbates) بطريقة يمكن التحكم بها على سطوح المواد. ان هذا الاهتمام الواسع بمجهر STM هو نتيجة الطيف الواسع من تطبيقاته: التصوير (imaging), التحليل الطيفي (spectroscopy) والمعالجة (manipulation). هذا الطيف الواسع من التطبيقات كان بسبب افضلية مجهر STM من حيث مقياس الجسيمات التي يمكن ان يعالجها وتعقيد عملية المعالجة ودقة تحليل المعالجة والتي تعين كلها استراتيجيات المعالجة النانوية, بالإضافة الى تكيف مجهر STM للعمل في بيئات مختلفة مثل الهواء, السوائل, والتفريغ المفرط (UHV), وفي مدى درجات حرارة واسع.

ان عملية معالجة الجسيمات الملتصقة (ذرة, جزيئة, تركيب نانوي ...) باستخدام مجهر STM تعتبر بسيطة تقنياً, حيث يوضع رأس المجس فوق الجسيم الملتصق ويخفض رأس المجس لزيادة التفاعل بينهما, ويحصل فعل ذلك بزيادة تيار النفق. وبذلك يمكن تحريك الجسيم الملتصق إلى الموقع المطلوب. إن تفاعل الجهد بين رأس المجس والجسيم الملتصق يكون قوياً بحيث يمكن للجسيم الملتصق التغلب على حاجز الطاقة (the energy barrier) وبذلك يمكن للجسيم الملتصق أن تتحرك بسهولة على السطح ولكن بدون أن تنتقل من السطح إلى رأس المجس. وعند وصول الجسيم الملتصق إلى الموقع المطلوب يعزل رأس المجس. ان هذه العملية يمكن إعادة ذرة بذرة (atom by atom) [4] لإيجاد التركيب المطلوب.

يمكن تصنيف تقنيات المعالجة للجسيمات الملتصقة برأس مجس STM بشكل عام الى ثلاثة أنواع رئيسية هي: المعالجة الجانبية (lateral manipulation), المعالجة العمودية (vertical manipulation), والمعالجة المحثة بالنفق غير المرنة (inelastic tunneling induced manipulation). كل هذه التقنيات تعتمد على ثلاث ميكانيكيات اساسية لعمليات المعالجة هي: القوى الكيميائية (chemical forces),

التسخين والمعالجة باستخدام STM بطريقة متوافقة مع الوصف الصحيح لتيارات النفق.

ان الهدف من هذا العمل هو دراسة معالجة نقطة كمية بحجم الذرة ملتصقة على سطح صلب Cu(100) باستخدام رأس مجس STM. حيث تم اعتماد طريقة دالة كرين غير المتزنة لـ Keldysh لحساب كل الدوال المتعلقة والمطلوبة لحساب معدل الحركة كدالة لفولتية الانحياز المسلطة بين رأس المجس والسطح ولدرجة الحرارة والتردد الاهتزازي للجسيم الملتصق.

على $\hbar\Omega (b)$ و $E_{dot} (C_{dot})$ و $E_p (C_p)$ و $E_k (C_k)$ التوالي. وللسهولة عادةً تؤخذ بنظر الاعتبار مدار مفرد للنقطة الكمية ونمط فونون مفرد للنقطة الكمية، انظر الشكل (1). ويكتب هاميلتونين الانتقال للحالة الصفرية كالاتي [13]:

$$H_0 = \sum_k E_k C_k C_k + \sum_p E_p C_p C_p + E_{dot} C_{dot} C_{dot} + \hbar\Omega \left(b b + \frac{1}{2} \right). \quad (1)$$

كيميائية مستقلة هي μ_t و μ_s على التوالي. وان الفرق بينهما يطابق قيمة فولتية الانحياز (V):

$$eV = \mu_s - \mu_t. \quad (2)$$

بالرموز $n_t(E)$ و $n_s(E)$ على التوالي، وهي تُعطى بدالة توزيع فيرمي-ديراك:

$$f_\alpha(E) = \left[\exp \left(\frac{E - \mu_\alpha}{k_B T} \right) + 1 \right]^{-1}.$$

تيار مستقر بين رأس المجس والسطح من خلال مدار النقطة الكمية. ان الهاملتونين الكلي للنظام هو [14]:

$$H = H_0 + \sum_k (V_{k dot} C_k C_{dot} + h.c.) + \sum_p (V_{p dot} C_p C_{dot} + h.c.) + \chi C_{dot} C_{dot} (b + b). \quad (4)$$

excitations واعادة التهدئة (deexcitations) على الاشغال المؤقت لإلكترونات النفق في النقطة الكمية الذي يقود الى ازاحة موقع الاتزان لها، هذه العملية تسبب حث

Theory). لقد عمل الباحثون Mii ومشاركوه [12] بتطوير معالجاتهم لاشتقاق صيغ للتيارات المرنة وغير المرنة والعلاقة بين الجزء غير المرن لتيار النفق والاضمحلال الاهتزازي. وقام Ueba ومشاركوه [13] بتطوير نظرية IETS باستخدام طريقة دالة كرين غير المتزنة NEGF (Nonequilibrium Green's function) لـ Keldysh التي من خلالها يمكن الحصول على الوصف الديناميكي والإحصائي للنظام غير المتزن، والتي اعتمد عليها في بحثنا هذا لتعطينا إشغال مستوى الجسيم الملتصق غير المتزن والإشغال الاهتزازي له، وهذا يفتح طريقاً لوصف تأثيرات فرط

2. النظرية Theory

2-1: هاميلتونين الانتقال The Transfer Hamiltonian

ان النظام الكلي يتكون من عدة انظمة هي السطح ورأس المجس ومدار النقطة الكمية بحجم الذرة (atom-sized quantum dot) ملتصقة على السطح وفونون النقطة الكمية والتي طاقاتها (مؤثرات الهدم المقابلة لـ) تعطى بالرموز:

حيث افترض ان كل من السطح ورأس المجس في حالة اتزان حراري عند نفس درجة الحرارة T وان لهما جهود

حيث ان قيمة فولتية الانحياز المحددة V تكون ضرورية لحدوث اثار اهتزازية حقيقية. ويرمز لدوال توزيع الالكترونات في نظامي رأس المجس المعدني والسطح

$$\alpha = t, s \quad (3)$$

ان عناصر مصفوفة النفق الالكتروني (electronic tunneling) $V_{k dot}$ (رأس المجس- النقطة الكمية) و $V_{p dot}$ (السطح-النقطة الكمية) تعطي

ويشير الرمز χ الى ثابت اقتران الكترون-اهتزاز (electron-vibration coupling)، هذا الاقتران يكون مسؤول عن الاثارة الاهتزازية (vibrational)

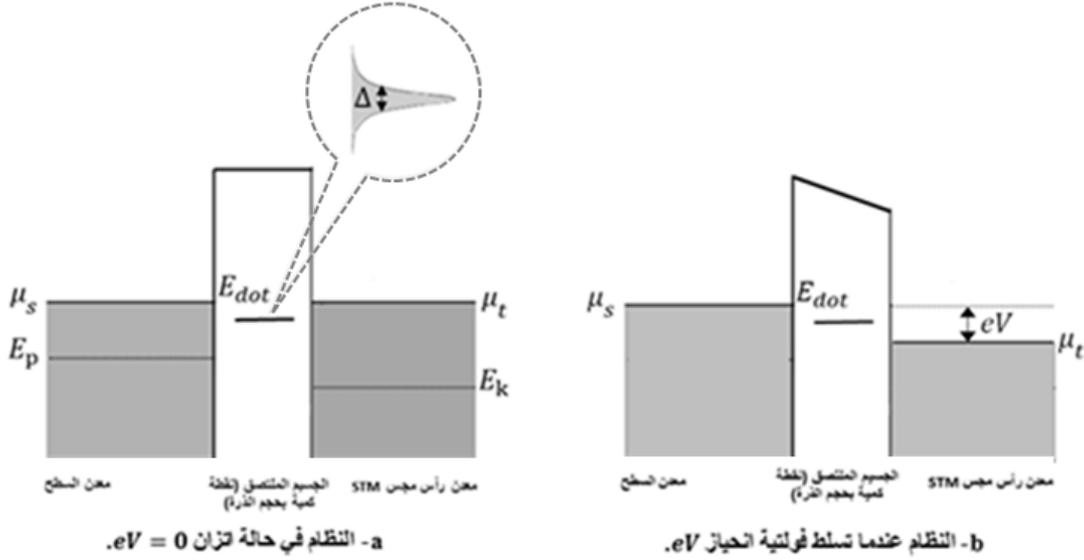
حركة ديناميكية للنقطة الكمية وتفتح قنوات النفق غير المرن عن طريق الاثرات الاهتزازية واعادة التهئية.

ان التعريض الرنيني الذي يسببه التهجين بين رأس المجس والنقطة الكمية Δ_t وكذلك بين السطح والنقطة الكمية Δ_s يعطيان عرض رنيني كلي يعطى بـ :

$$\Delta = \Delta_s + \Delta_t. \quad (5)$$

ولتسهيل عمليات المعالجة يفترض الباحثون عادةً ان كل من Δ_s و Δ_t غير معتمدة على الطاقة [14]:

$$\Delta_\alpha(E) = \pi \sum_{\beta} |V_{\beta dot}|^2 \delta(E - E_\beta) \equiv \Delta_\alpha. \quad \text{for } (\beta = k, \alpha = s), (\beta = p, \alpha = t) \quad (6)$$



الشكل (1): مخطط مستويات الطاقة لنظام رأس مجس STM-الجسيم المنتصق-السطح.

2-2: طريقة دالة Keldysh-Green

استخدمت طريقة دالة كرين غير المتزنة استخدمت طريقة دالة كرين غير المتزنة Keldysh لـ NEGF [14,13] لوصف العملية غير المتزنة لنفق الإلكترون بين رأس المجس والسطح من خلال مستوى النقطة الكمية. هذا الوصف يسمح لنا بالحصول على التغيرات في الطيف (الإلكتروني والاهتزازي) وأعداد الإشغال التي تحدث في النظام بسبب المؤثر الخارجي (المتمثل بفولتية الانحياز المسلطة) الذي تتخلله كل تفاعلات النظام. إن طريقة NEGF لا تعطينا إشغال مستوى النقطة الكمية غير المتزن فقط وإنما كذلك تعطي الإشغال الاهتزازي له. في طريقة (KG) Keldysh-

توصف العملية غير المتزنة Green [15] توصف العملية غير المتزنة (nonequilibrium process) لنفق الإلكترون بين رأس المجس والسطح من خلال مدار النقطة الكمية باستخدام معادلة Dyson ومعادلة الحركة (the kinetic equation) هذا الوصف المقترن للخصائص الديناميكية والإحصائية للنظام غير المتزن يسمح باستخدام طريقة دالة KG لإيجاد الطيف والتغيرات في أعداد الإشغال بسبب المؤثر الخارجي الذي يتخلله التفاعل بين اجزاء النظام. وتعطى معادلة الحركة للإشارات الاهتزازية (الفونونات) [16] بما يلي:

$$\frac{\partial N_{ph}}{\partial t} = \int d\omega \rho_{ph}(\omega) \{ \Gamma_{in}(\omega) - \gamma_{eh}(\omega) \times [n_{ph}(\omega) - n_T(\omega)] \}. \quad (7)$$

يمثل N_{ph} دالة توزيع الفونون (phonon distribution function) و $n_T(\omega)$ هي دالة توزيع الفونون المستقرة (stationary phonon distribution function). وتعطى كثافة الحالات الاهتزازية

دالة إشغال الاهتزاز (vibration occupation) وتمثل $n_{ph}(\omega)$ دالة توزيع الفونون (phonon distribution function) و $n_{ph}(\omega)$ تمثّل دالة إشغال الاهتزاز (vibration occupation)

(vibrational density of states) $\rho_{ph}(\omega)$ وفقاً لما يلي:

$$\rho_{ph}(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_{eh}(\omega)}{(\omega - \hbar\Omega)^2 + \gamma_{eh}^2(\omega)}. \quad (8)$$

يمثل $\gamma_{eh}(\omega)$ معدل الاضمحلال الاهتزازي (vibrational damping rate) بسبب اثاره زوج الكترولون-فجوة:

$$\gamma_{eh}(\omega) = \pi \chi^2 \int dE [n_{dot}(E) - n_{dot}(E + \omega)] \times \rho_{dot}(E) \rho_{dot}(E + \omega). \quad (9)$$

حيث ان $\rho_{dot}(E)$ تمثل كثافة الحالات غير المضطربة (unperturbed quantum) لإلكترونات النقطة الكمية (dot density of states) و $n_{dot}(E)$ تمثل دالة اشغال النقطة الكمية وتعطيان بما يلي:

$$\rho_{dot}(E) = \frac{1}{\pi} \frac{\Delta}{(E - E_{dot})^2 + \Delta^2}. \quad (10)$$

$$n_{dot}(E) = \frac{\Delta_s n_s(E) + \Delta_t n_t(E)}{\Delta_s + \Delta_t}. \quad (11)$$

وفي حالة الاتزان فان:

$$\frac{\partial N_{ph}}{\partial t} = 0. \quad (12)$$

نحصل على العلاقة الاتية:

$$\int d\omega \rho_{ph}(\omega) \Gamma_{in}(\omega) - \int d\omega \rho_{ph}(\omega) \gamma_{eh}(\omega) \times [n_{ph}(\omega) - n_T(\omega)] = 0. \quad (13)$$

علماً بان $n_T(\omega)$ يمثل دالة حالة الاتزان عندما يكون $eV = 0$ والتي تعطى بما يلي:

$$n_T(\omega) = \left[\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1 \right]^{-1}. \quad (14)$$

وان $\Gamma_{in}(\omega)$ تمثل دالة معدل التوليد الاهتزازي (vibrational generation rate function) بسبب تيار الالكترولون غير المرن وتعطى بالاتي^[15]:

$$\Gamma_{in}(\omega) = 2\pi \chi^2 \frac{\Delta_s \Delta_t}{\Delta^2} \int dE \rho_{dot}(E) \rho_{dot}(E + \omega) [n_s(E + \omega) - n_t(E + \omega)][n_s(E) - n_t(E)]. \quad (15)$$

اما الصيغة العامة لمعدل التوليد الاهتزازي بسبب تيار النفق غير المرن وبوجود الاثارة الاهتزازية فتعطى بالاتي:

$$\Gamma_{iet} = \int d\omega \rho_{ph}(\omega) \Gamma_{in}(\omega). \quad (16)$$

واعتماداً على المعادلة (13) يمكن ان نكتب الصيغة التالية لـ $n_{ph}(\omega)$ كالاتي:

$$n_{ph}(\omega) = n_T(\omega) + \frac{\Gamma_{in}(\omega)}{\gamma_{eh}(\omega)}. \quad (17)$$

الاهتزازي (vibrational heating) فوق درجة حرارة النموذج (sample) عن طريق الكترولونات النفق غير المرنة التي تسبب الاثارة الاهتزازية ولذلك يسمى بحد التسخين الاهتزازي، والذي يلعب دور مهم في عملية انتقال النقطة الكمية مع رأس مجس STM^[15].

قبل أن تفتح القناة غير المرنة فان هنالك توزيعاً للفونونات هو $n_T(\omega)$ وعند اللحظة التي عندها تفتح القناة غير المرنة فان التيار غير المرن يعطى إشغالاً إضافياً للفونونات. هذه النتيجة توضح بان المقدار Γ_{in}/γ_{eh} هو البارامتر المؤثر الرئيسي للتسخين

2-3: معدلات الانتقال غير المرن Inelastic Transition Rates

المجس ومع النموذج على التوالي. وتفترض ميكانيكية التسخين الاهتزازي^[16] ان النقطة الكمية تتغلب على حاجز الجهد بالتنشيط الاهتزازي. وان معدل الاثارة

يمكن ان نتصور عملية انتقال النقطة الكمية كمسالة عبور حاجز جهد بين بثري جهد (بئر جهد مزدوج) المتكونين من تفاعل النقطة الكمية مع رأس

تعطى بالاتي:

$$\Gamma_{\uparrow,\downarrow} = \Gamma_{\uparrow,\downarrow}^{ss} + \Gamma_{\uparrow,\downarrow}^{st} + \Gamma_{\uparrow,\downarrow}^{ts} + \Gamma_{\uparrow,\downarrow}^{tt}.$$

رأس المجس. وان معدلات الانتقال $\Gamma_{\uparrow,\downarrow}^{ss}$ و $\Gamma_{\uparrow,\downarrow}^{tt}$ والتي لها تعود الحالة الابتدائية والنهائية الى القطب نفسه تعطى بما يلي:

$$\Gamma_{\uparrow}^{ss,tt} = n_T(\hbar\Omega)\gamma_{eh}^{s,t}.$$

$$\Gamma_{\downarrow}^{ss,tt} = [1 + n_T(\hbar\Omega)]\gamma_{eh}^{s,t}.$$

حيث ان $\gamma_{eh}^{s(t)}$ تمثل معدل الاضمحلال الاهتزازي للسطح (s) (او رأس المجس(t)). وان $n_T(\hbar\Omega)$ تمثل دالة توزيع بوز-انشتاين محسوبة عند $\omega = \hbar\Omega$:

$$n_T(\hbar\Omega) = \left[\exp\left(\frac{\hbar\Omega}{k_B T}\right) - 1 \right]^{-1}. \quad (21)$$

المستوي الذري للنقطة الكمية على السطح. ويمكن كتابة المعدلات الكلية للإثارة الاهتزازية واعادة التهدة بين المستويات المتجاورة للمتنذبذب النوافقي كالاتي [17]:

$$\Gamma_{\uparrow} = n_T(\hbar\Omega)\bar{\gamma}_{eh} + \Gamma_{iet}.$$

$$\Gamma_{\downarrow} = [n_T(\hbar\Omega) + 1]\bar{\gamma}_{eh} + \Gamma_{iet}.$$

$$\bar{\gamma}_{eh} = \frac{\int d\omega \rho_{ph}(\omega)\gamma_{eh}(\omega) n_T(\omega)}{n_T(\hbar\Omega)}. \quad (24)$$

يمثل $\bar{\gamma}_{eh}$ متوسط عرض الخط الاهتزازي. ان الحل المستقر لمعادلة الحركية (12) يعطى بصيغة دالة توزيع بوز-انشتاين المؤثرة وهي [17]:

$$N_{ph} = \left[\exp\left(\frac{\hbar\Omega}{k_B T_{eff}}\right) - 1 \right]^{-1}. \quad (25)$$

ان N_{ph} يمثل عدد الاشغال الاهتزازي المستقر (stationary vibrational occupation number) وان T_{eff} تمثل درجة الحرارة المؤثرة [17,16].

$$T_{eff} = \frac{\hbar\Omega}{k_B} \left[\ln\left(\frac{\Gamma_{\downarrow}}{\Gamma_{\uparrow}}\right) \right]^{-1}. \quad (26)$$

علماً بان قناة فونونات السطح لم تؤخذ بنظر الاعتبار.

2-4: معدل انتقال النقطة الكمية Rate of quantum dot Transfer

الاهتزازي n بطاقة مساوية الى $(n + 1/2)\hbar\Omega$ فوق ارتفاع حاجز الجهد V_B . وان الانتقالات خلال المستويات الاهتزازية توصف باستخدام معادلة باولي العمومية (Pauli master equation):

$$\frac{dp_m(t)}{dt} = (m + 1)\Gamma_{\downarrow} p_{m+1}(t) + m\Gamma_{\uparrow} p_{m-1}(t) - [m\Gamma_{\downarrow} + (m + 1)\Gamma_{\uparrow}] p_m(t). \quad (27)$$

واعادة التهدة. وباستخدام صيغة بولتزمان يمكن الحصول على الصيغة التالية لمعدل انتقال النقطة الكمية [16]:

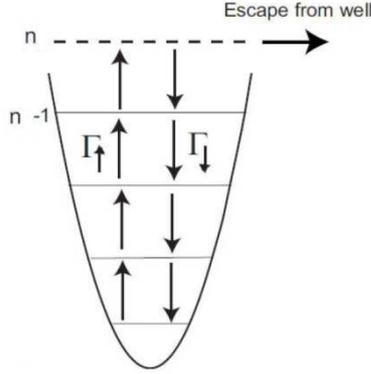
وباستخدام وصف انموذج بئر الجهد المزدوج لانتقال النقطة الكمية (انظر الشكل (2)) فان الحركة الاهتزازية للنقطة الكمية توصف على انها توافقية ويفترض حدوث الانتقال عندما تصل النقطة الكمية الى المستوي

تمثل $p_m(t)$ احتمالية ايجاد النقطة الكمية في الحالة الاهتزازية m عند الزمن t. اما Γ_{\downarrow} و Γ_{\uparrow} يمثلان المعدلات الكلية للانتقال غير المرن للإثارة الاهتزازية

$$R(eV) \approx n\Gamma_{\uparrow} \exp\left[\frac{-(n-1)\hbar\Omega}{k_B T_{eff}}\right]. \quad (28)$$

الاهتزازي. حيث تتغلب النقطة الكمية على حاجز الجهد من خلال تسلق درجات السلم الاهتزازي (vibrational ladder climbing) لإثارات أصرة سطح-نقطة كمية.

إن كون صيغة تعداد المستويات قريبة من توزيع بولتزمان الذي تميزه درجة الحرارة T_{eff} يبرر كون هذه الميكانيكية لانتقال النقطة الكمية تسمى ميكانيكية التسخين



الشكل (2): مخطط يوضح عمليات الاثارة واعادة التهذنة بين المستويات الاهتزازية في بئر الجهد المزدوج. حيث يتعين توزيع شبه-بولتزمان على السلم الاهتزازي كنتيجة للإثارة واعادة التهذنة المؤشرة بالأسهم بين المستويات الاهتزازية المتجاورة.

3. النتائج والمناقشة Results and Discussion

اما النقطة الكمية فقد اخذ ابسط تمثيل مثالي لها وهو صندوق الجهد (potential box) المكعب ذو الجدران الصلدة حيث يعتمد مستوى الطاقة على ابعاد الصندوق (L_x, L_y, L_z) وللحالة الكمية (غير المنحلة) $n_x = n_y = n_z = 1$ وفقاً للعلاقة التالية^[20]:

$$E_{111}(L_{dot}) = \frac{3\pi^2\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{1}{L_{dot}^2}\right). \quad (29)$$

على سطح Cu(100). وبما ان النمط المستخدم في حساباتنا هو نمط البعد الثابت او الارتفاع الثابت حيث تكون الفولتية هي المتغيرة فان الحالة $\Delta_s \gg \Delta_t$ تعني ان النقطة الكمية تكون ملتصقة على السطح.

يتضح من العلاقة (17) ان المقدار $\Gamma_{in}(\omega)/\gamma_{eh}(\omega)$ يمثل المعامل المؤثر للتسخين الاهتزازي فوق درجة حرارة السطح وذلك بسبب الكترونات النفق غير المرنة التي تسبب الاثارة الاهتزازية. وعليه حُسب $\Gamma_{in}(\omega)$ وفقاً للعلاقة (15) وحساب $\gamma_{eh}(\omega)$ وفقاً للعلاقة (9) كدالة لدرجة الحرارة 40 K و $\hbar\Omega = 50 \text{ meV}$ وعند مستوى الطاقة E_{dot}

من المعروف ان راس STM يصنع عادتاً من التتكستن اما الجسيم الملتصق والسطح فيحددان وفقاً للهدف والغاية التي من اجلها تجري عملية القياس. في عملنا هذا سُبستخدم سطح نحاس Cu(100) نظيفاً مع وجود نقطة كمية بحجم الذرة ملتصقة عليه، دالة الشغل لهذا السطح هي $\phi^{[18]} = 4.59 \text{ eV}$ وان قعر حزمة الطاقة للسطح Cu(100) مساوية الى 13.05 eV –^[19].

علماً بان L_{dot} يمثل طول ضلع المكعب وان $L_x = L_y = L_z = L_{dot}$ وان m^* تمثل الكتلة الفعالة والتي تأخذ القيمة $m^* = 0.06 m_e$ لنقطة كمية افتراضية وان m_e تمثل كتلة الالكترن. ولقيمة $L_{dot} = 2 \text{ nm}$ تكون الطاقة المقابلة لها (مقاسة بالنسبة لمستوي فيرمي) مساوية الى $E_{dot}^{[21]} = -100 \text{ meV}$.

ان قوى الاقتران بين النقطة الكمية والسطح $\Delta_s (= 1000 \text{ meV})$ وكذلك بين النقطة الكمية ورأس مجس STM $\Delta_t (= 5 \text{ meV})$ تم اخذها كمقادير ثابتة، وتم دراسة الحالة $\Delta_s \gg \Delta_t$. علماً بان هذه القوى تعتمد بالدرجة الاساس على البعد العمودي لموقع النقطة الكمية

ولفحص تأثير زيادة التردد الاهتزازي للنقطة الكمية الملتصقة على Γ_{\uparrow} و Γ_{\downarrow} تم حساب هذه المعدلات بنفس الترتيب السابق ولكن عند $\hbar\Omega = 100 \text{ meV}$ كما في الاشكال (7) و (8) و (9). وعند مقارنتها مع الاشكال السابقة والتي حسبت لـ $\hbar\Omega = 50 \text{ meV}$ نلاحظ نفس السلوك السابق لـ Γ_{\uparrow} مع فولتية الانحياز لقيم χ المختلفة بينما Γ_{\downarrow} لا تأخذ السلوك ذاته. وهناك نقصان ملحوظ في قيم Γ_{\uparrow} وزيادة ملحوظة في قيم Γ_{\downarrow} مع زيادة قيمة $\hbar\Omega$.

بعد حساب معدلات الاثارة الاهتزازية واعادة التهذئة يمكن حساب ما يسمى درجة الحرارة المؤثرة والتي حسبت باستخدام العلاقة (26) لكل المتغيرات والمعاملات الانفة الذكر وبنفس الترتيب وكما موضح في الشكل (10). والتي منها نجد ان T_{eff} تزداد مع زيادة فولتية الانحياز وبالاخص عندما $eV > \hbar\Omega$ وكل قيم χ . علماً بان فولتية انحياز محددة فان قيم T_{eff} تقل مع زيادة قيم χ . اما مع زيادة درجة الحرارة نلاحظ زيادة T_{eff} مع زيادة فولتية الانحياز ولكن ستكون قوة اقتران الكترون- اهتزاز مهملة وبالأخص عند $T = 200 \text{ K}$. ولغرض فحص تأثير زيادة التردد الاهتزازي للنقطة الكمية الملتصقة تم حساب T_{eff} لكل المتغيرات والمعاملات السابقة ولكن $\hbar\Omega = 100 \text{ meV}$. ويتضح بمقارنة الاشكال ان التردد الاهتزازي للنقطة الكمية له تأثير سائد في تحديد قيم T_{eff} كدالة لفولتية الانحياز وقوة اقتران الكترون- اهتزاز. مع ملاحظة انه لدرجة الحرارة العالية دور في اهمال تاثير قوة اقتران الكترون- اهتزاز على قيم T_{eff} .

لعل الخطوة الحسابية الاله في عملنا هي حساب معدل حركة النقطة الكمية كدالة لفولتية الانحياز وللمعاملات ذاتها المستخدمة اعلاه وكما هو موضح في الشكل (11) والذي حسب لتردد اهتزازي مساوي الى 50 meV ودرجة حرارة 40 K . الواضح من الشكل ان R يزداد مع زيادة فولتية الانحياز ونقصان اقتران الكترون- اهتزاز مع ملاحظة ان معدل الاثارة بين مستويات بئر الجهد يزداد مع زيادة قوة اقتران الكترون- اهتزاز بينما تزداد درجة الحرارة المؤثرة مع نقصان قوة اقتران الكترون- اهتزاز. ولغرض توضيح تصرف معدل الحركة مع قوة اقتران الكترون- اهتزاز

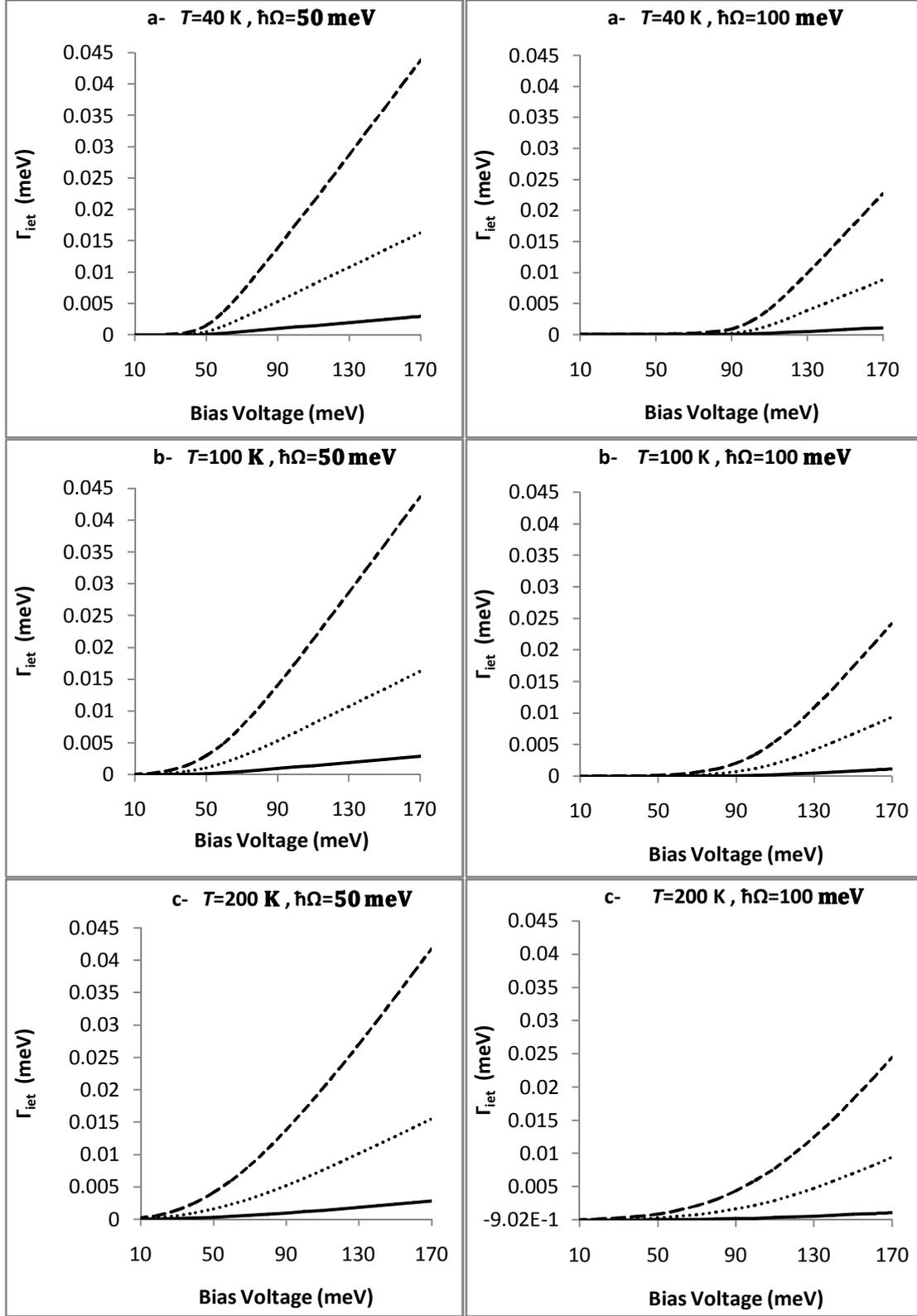
100 meV-. ثم حُسب معدل التوليد الاهتزازي بسبب تيار النفق غير المرن وفقاً للعلاقة (16) وكذلك معدل الاضمحلال الاهتزازي بسبب اثارة زوج الكترون- فجوة $\bar{\gamma}_{eh}(\omega)$ وفقاً للعلاقة (24) وذلك كدالة لاقتران الكترون- اهتزاز $\chi = 100, 300, 500 \text{ meV}$. ان المقدار $\Gamma_{iet}/\bar{\gamma}_{eh}$ يمكن ان يعد ايضاً حداً للتسخين. تم فحص تغير Γ_{iet} كدالة لفولتية الانحياز ولقيم χ المشار اليها اعلاه ولكن لدرجات حرارة مختلفة هي 40 K و 100 K و 200 K على التوالي، عند $E_{dot} = 100 \text{ meV}$ - وكما هو موضح في الشكل (3). والتي منها يمكن ان نستنتج انه لمستوى طاقة محدد ودرجة حرارة محددة يزداد Γ_{iet} مع زيادة χ وبشكل ملحوظ مع فولتية الانحياز. وانه مع زيادة درجة الحرارة تصبح Γ_{iet} غير معتمدة على درجات الحرارة المستخدمة والتي جميعها تعتبر واطئة نسبياً. ولفحص اعتماد Γ_{iet} على التردد الاهتزازي للنقطة الكمية اختيرت القيمة $\hbar\Omega = 100 \text{ meV}$ واعادة الحسابات واستعراضها بالترتيب نفسه. حيث يتضح بمقارنة الاشكال ان السلوك العام لمعدل التوليد الاهتزازي بسبب تيار النفق غير المرين يزداد مع زيادة V و χ ولكنه بشكل عام يقل مع زيادة التردد الاهتزازي للنقطة الكمية. ان تصرف منحنى Γ_{iet} مع فولتية الانحياز يمكن تمييزه الى سلوكين مختلفين لـ $eV < \hbar\Omega$ حيث يكون Γ_{iet} غير معتمد على الفولتية ولقيم χ المختلفة بينما لـ $eV > \hbar\Omega$ يكون واضح ومعتمد على χ وكذلك $\hbar\Omega$. الجدير بالذكر ان النقطة $eV = \hbar\Omega$ تسمى عادتاً في ادبيات الموضوع جهد العتبة (Threshold potential).

يمكن حساب معدلات الاثارة الاهتزازية واعادة التهذئة باستخدام العلاقات التقريبية (22) و (23). حيث حسبت Γ_{\uparrow} و Γ_{\downarrow} كدالة لفولتية الانحياز ولقيم χ و T الانفة المذكور وعند $\hbar\Omega = 50 \text{ meV}$ و $E_{dot} = 100 \text{ meV}$ - وكما موضح في الاشكال (4) و (5) و (6) والتي منها يمكن ملاحظة زيادة Γ_{\uparrow} و Γ_{\downarrow} مع زيادة فولتية الانحياز وقوة الاقتران χ . بينما تزداد Γ_{\uparrow} وتقل Γ_{\downarrow} مع زيادة درجة الحرارة.

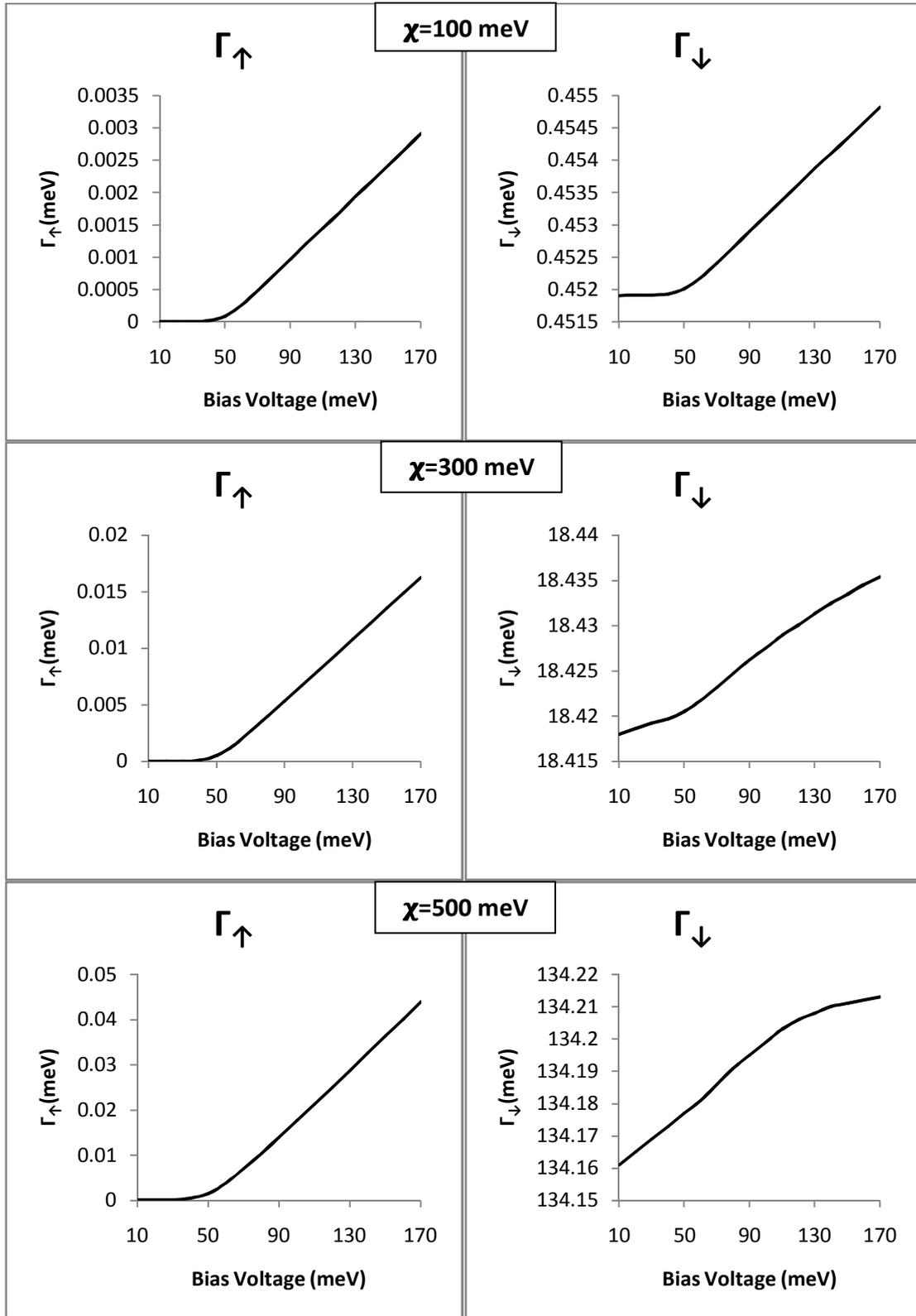
سيطرة" على معدل حركة الجسيم الملتصق على سطح باستخدام رأس مجس مجهز STM بالإضافة الى العوامل الاخرى المستخدمة في المعالجة وبالأخص التردد الاهتزازي للجسيم الملتصق حيث يعتبر جهد العتبة جهد مميز للنظام ينقل معدل الحركة او ما يسمى ايضاً بمعدل التفاعل (reaction rate) من حالة تأصر الى اخرى.

وكذلك درجة الحرارة تم استعراض تغير $\log(R)$ مع فولتية الانحياز في الشكل (12). ان الشكل (12) يوكد انه مع زيادة درجة الحرارة يزداد معدل الحركة للنقطة الكمية. امامع زيادة التردد الاهتزازي للجسيم الملتصق فان معدل الحركة يقل وبالأخص مع زيادة درجة الحرارة وقوة اقتران الكترون-اهتزاز.

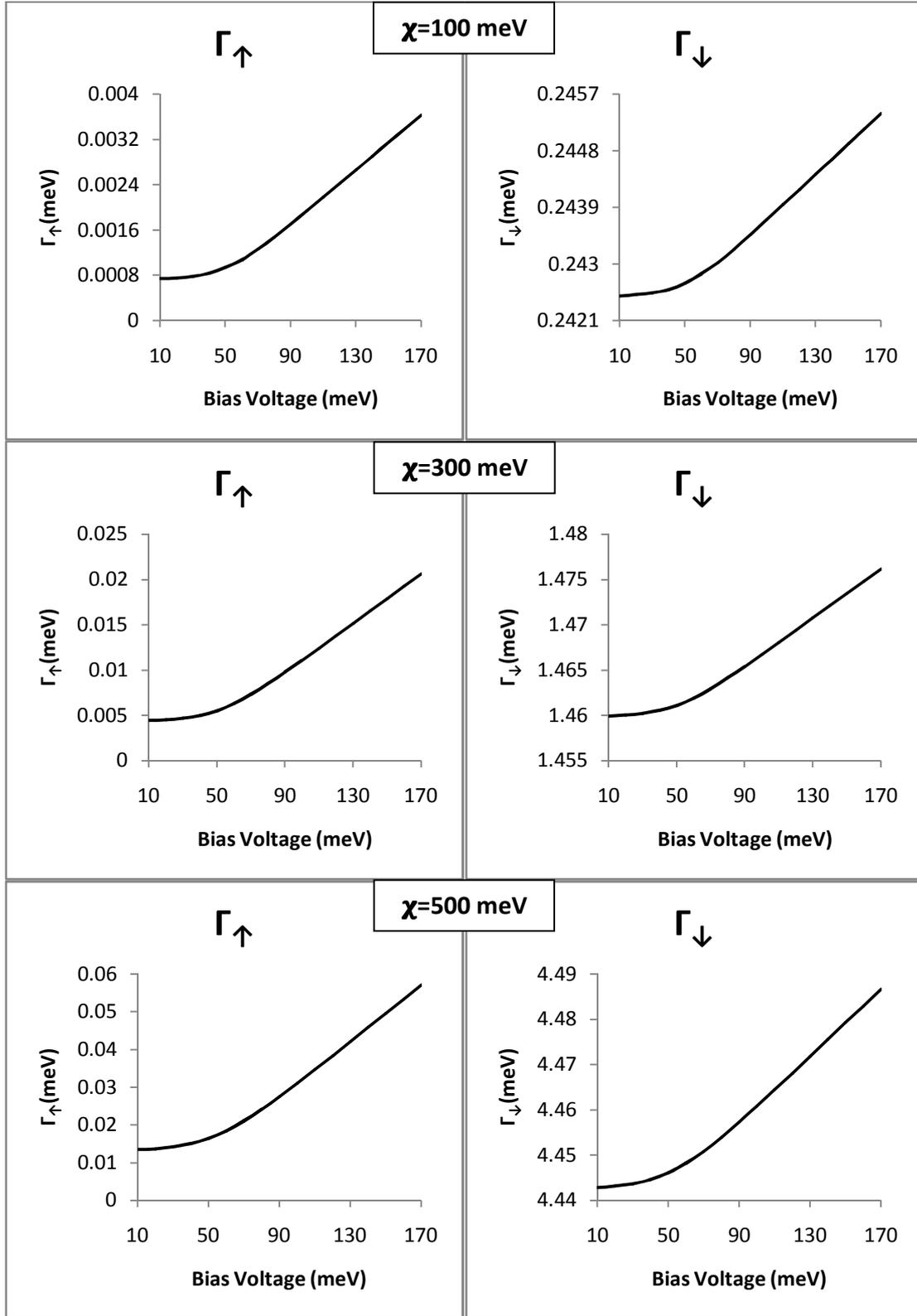
مما سبق نستنتج ان كل من قوة اقتران الكترون-اهتزاز ودرجة الحرارة يمكن ان يكونان "عوامل



الشكل (3): معدل التوليد الاهتزازي بسبب تيار النفق غير المرنة كدالة لفولتية الانحياز ودرجة الحرارة واقتران الكترون-اهتزاز عندما $\Delta_t = 5 \text{ meV}$, $\Delta_s = 1000 \text{ meV}$, $E_{dot} = -100 \text{ meV}$. ---- $\chi = 500 \text{ meV}$ $\chi = 300 \text{ meV}$ — $\chi = 100 \text{ meV}$

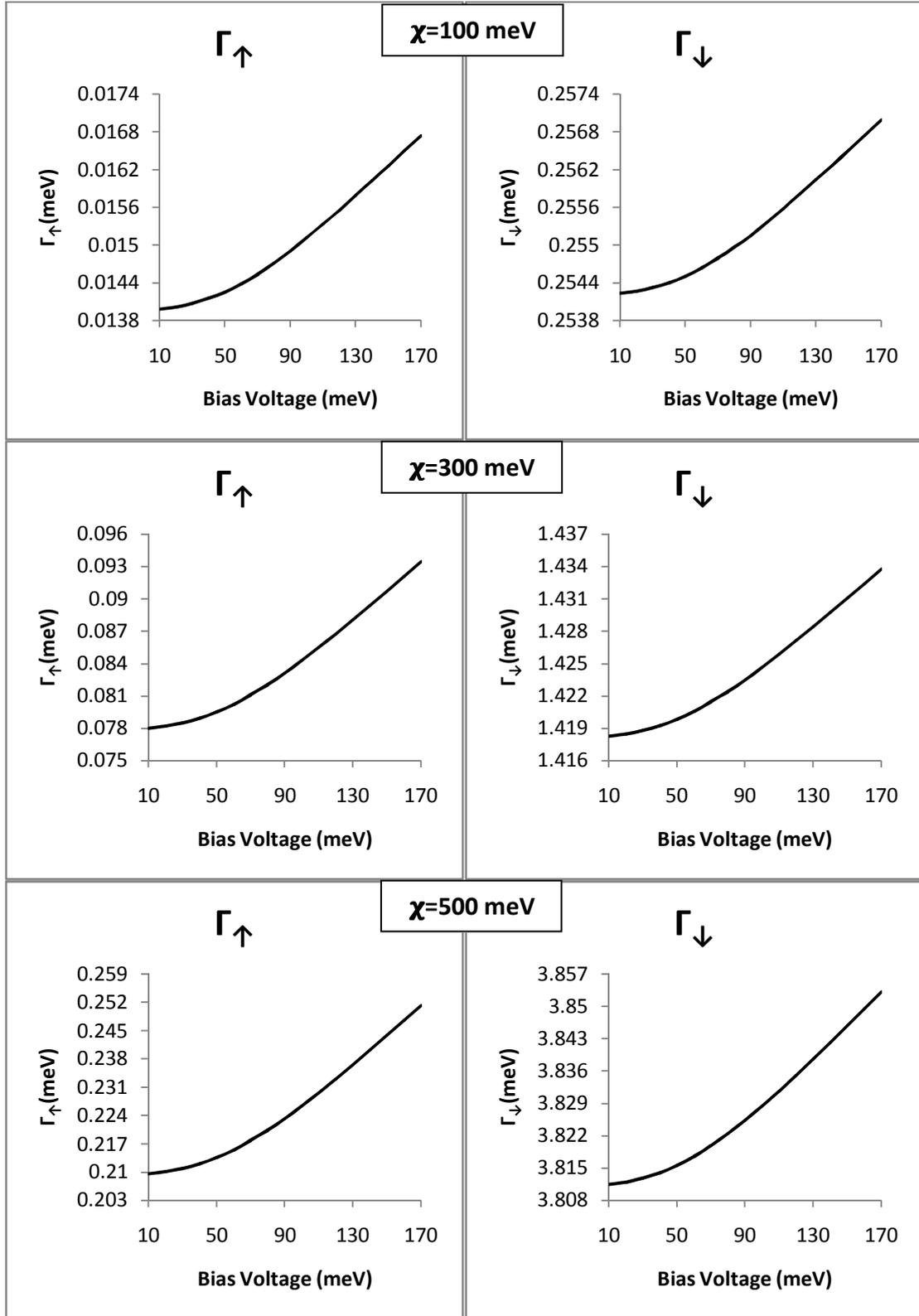


الشكل (4): معدلات الاثارة واعادة التهيئة بين المستويات المتجاورة لتبئر الجهد كدالة لفولتية الانحياز وقوة اقتران الكترون-اهتزاز عندما $\Delta_t = 0.5$ meV, $\Delta_s = 1000$ meV, $E_{dot} = -100$ meV, $T = 40$ K, $\hbar\Omega = 50$ meV

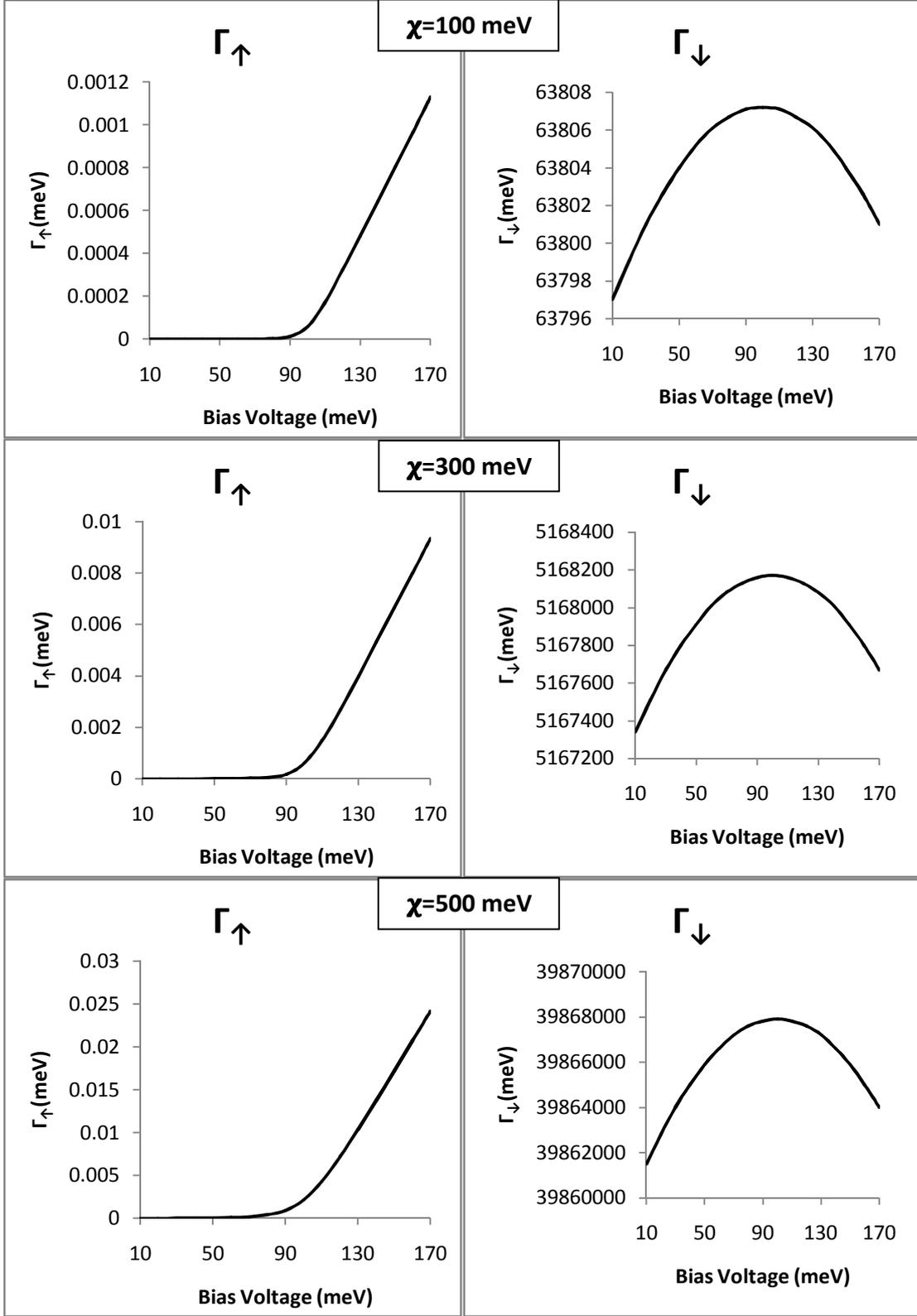


الشكل (5): معدلات الاثارة واعادة التهيئة بين المستويات المتجاورة لظفر الجهد كدالة لفولتية الاحياز وقوة اقتران الكترون-امتزاز عندما

$$\Delta_t = 5 \text{ meV}, \Delta_s = 1000 \text{ meV}, E_{dot} = -100 \text{ meV}, T = 100 \text{ K}, \hbar\Omega = 50 \text{ meV}$$

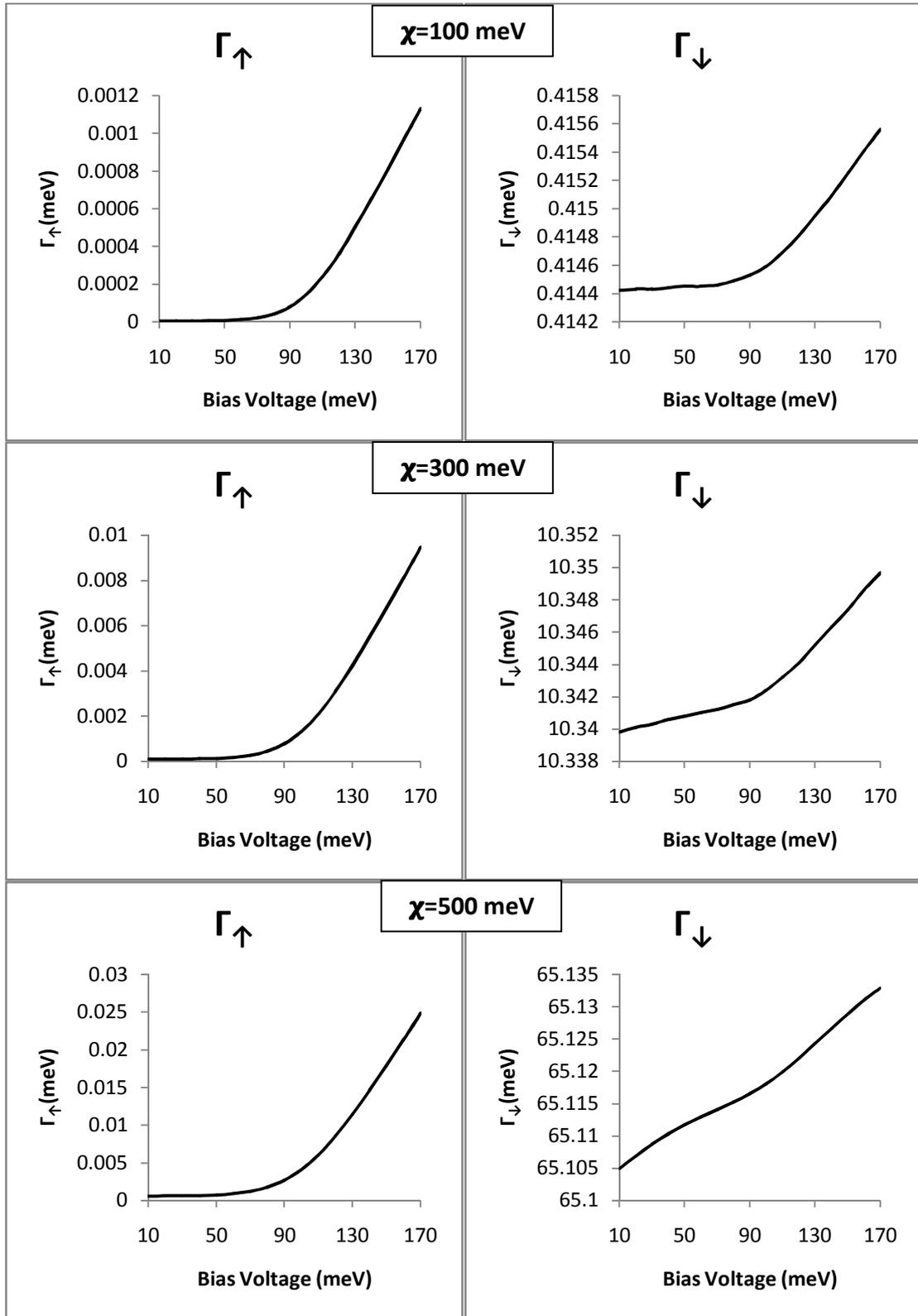


الشكل (6): معدلات الاثارة واعادة التهدئة بين المستويات المتجاورة لبلير الجهد كدالة لفولتية الانحياز وقوة اقتران الكترون-اهتزاز عندما $\Delta_t = 5 \text{ meV}$, $\Delta_s = 1000 \text{ meV}$, $E_{dot} = -100 \text{ meV}$, $T = 200 \text{ K}$, $\hbar\Omega = 50 \text{ meV}$.

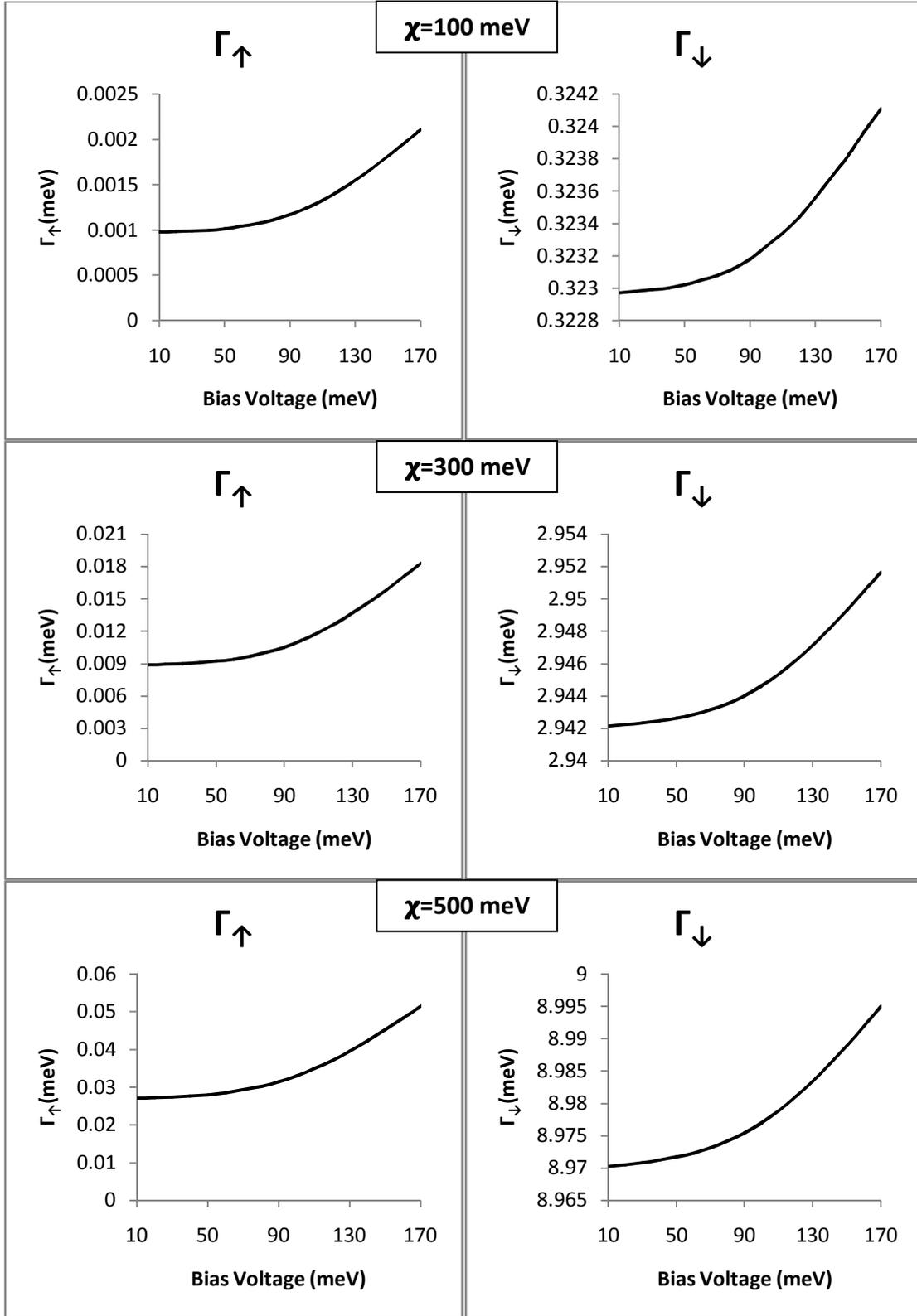


الشكل (7): معدلات الاثارة واعادة التهدئة بين المستويات المتجاورة لبلير الجهد كدالة لفولتية الانحياز وقوة اقتران الكترون-اهتزاز عندما

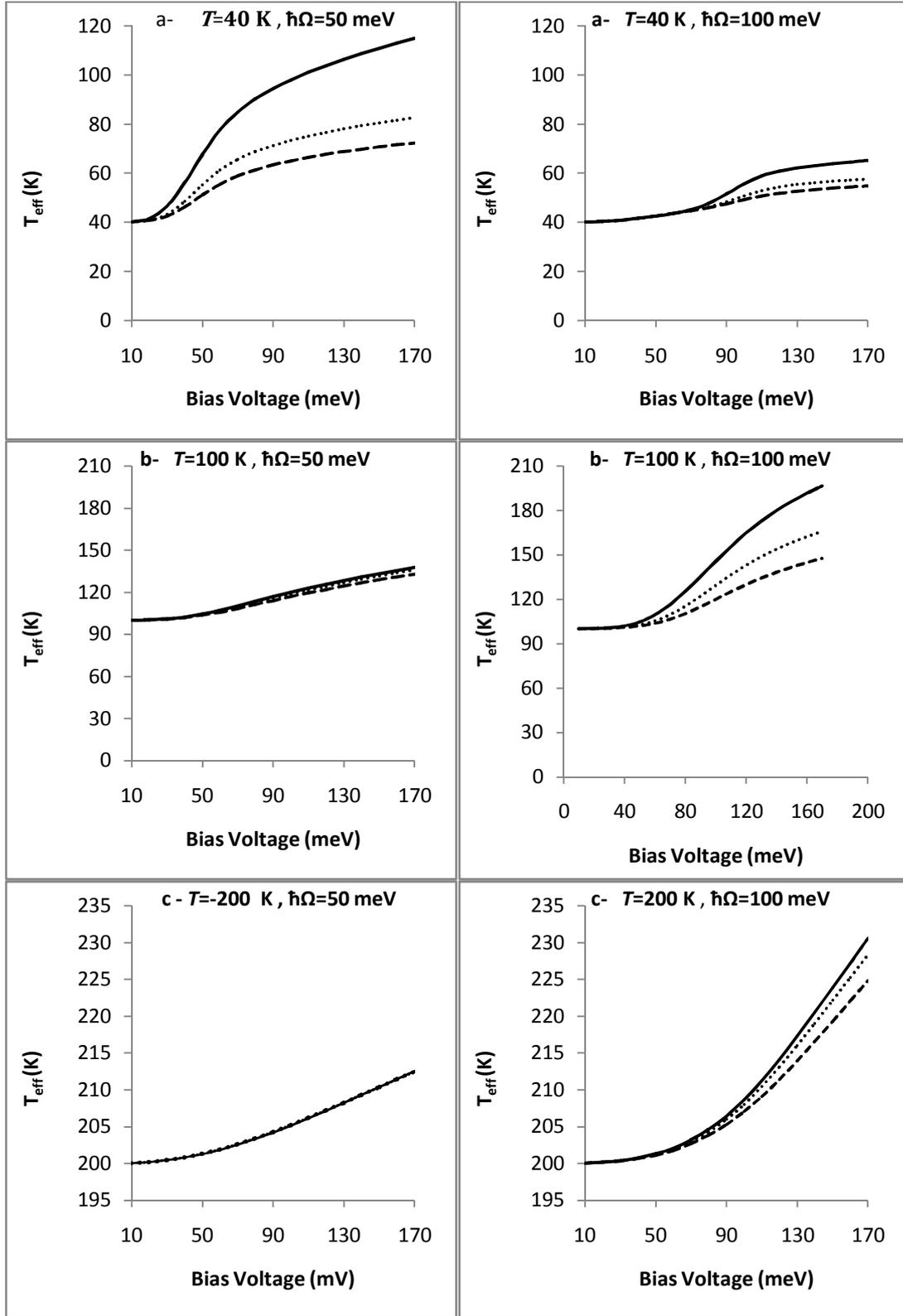
$$\Delta_t = 5 \text{ meV}, \Delta_s = 1000 \text{ meV}, E_{dot} = -100 \text{ meV}, T = 40 \text{ K}, \hbar\Omega = 100 \text{ meV}$$



الشكل (8): معدلات الاثارة واعادة التهدئة بين المستويات المتجاورة لبلير الجهد كدالة لفولتية الانحياز وقوة اقتران الكترون-اهتزاز عندما $\Delta_t = 5 \text{ meV}$, $\Delta_s = 1000 \text{ meV}$, $E_{dot} = -100 \text{ meV}$, $T = 100 \text{ K}$, $\hbar\Omega = 100 \text{ meV}$



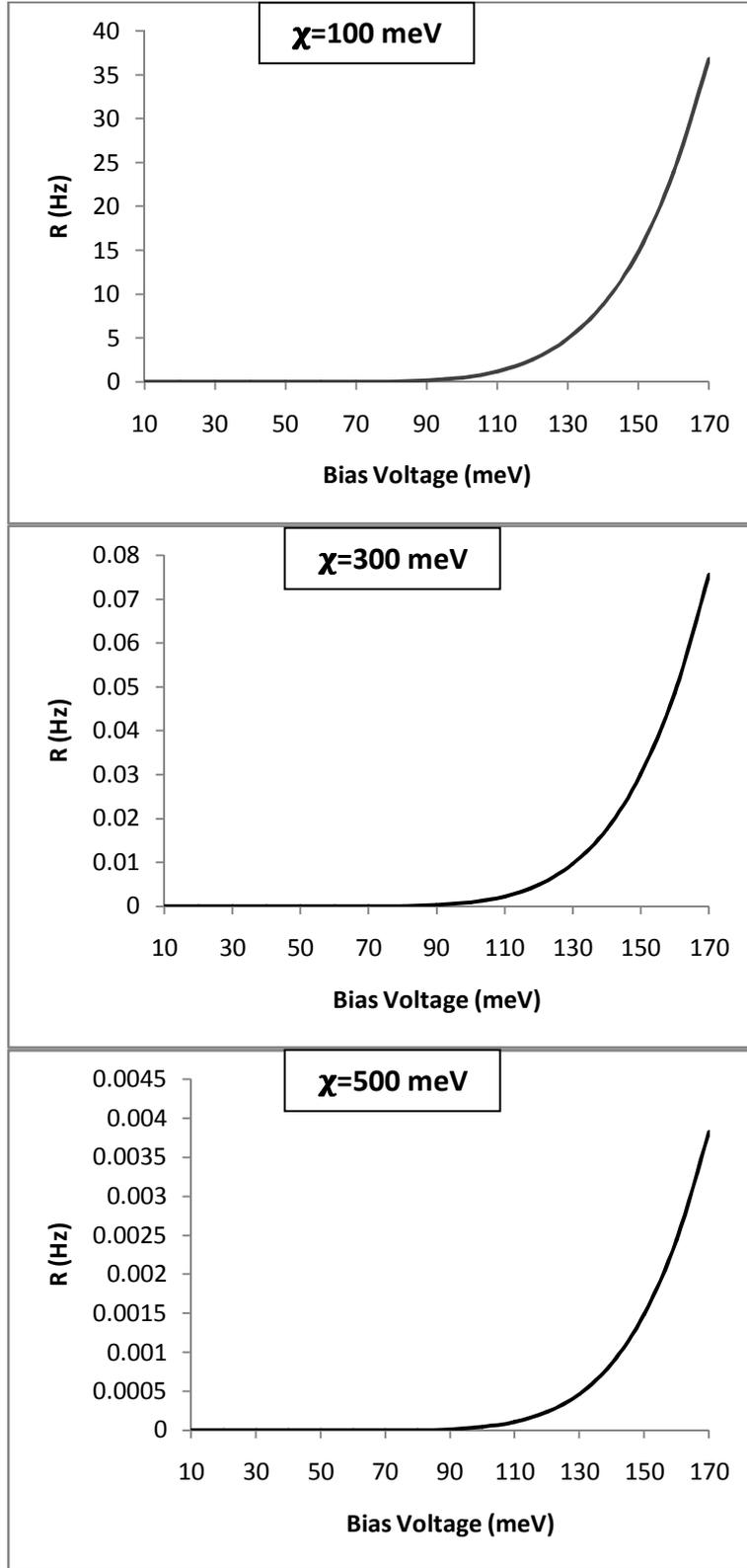
الشكل (9): معدلات الاثارة واعادة التهدئة بين المستويات المتجاورة لبلير الجهد كدالة لفولتية الانحياز وقوة اقتران الكترون-اهتزاز عندما $\Delta_t = 5 \text{ meV}$, $\Delta_s = 1000 \text{ meV}$, $E_{dot} = -100 \text{ meV}$, $T = 200 \text{ K}$, $\hbar\Omega = 100 \text{ meV}$.



الشكل (10): درجة الحرارة المؤثرة كدالة لفولتية الانحياز وقوة اقتران الكترون-اهتزاز عندما

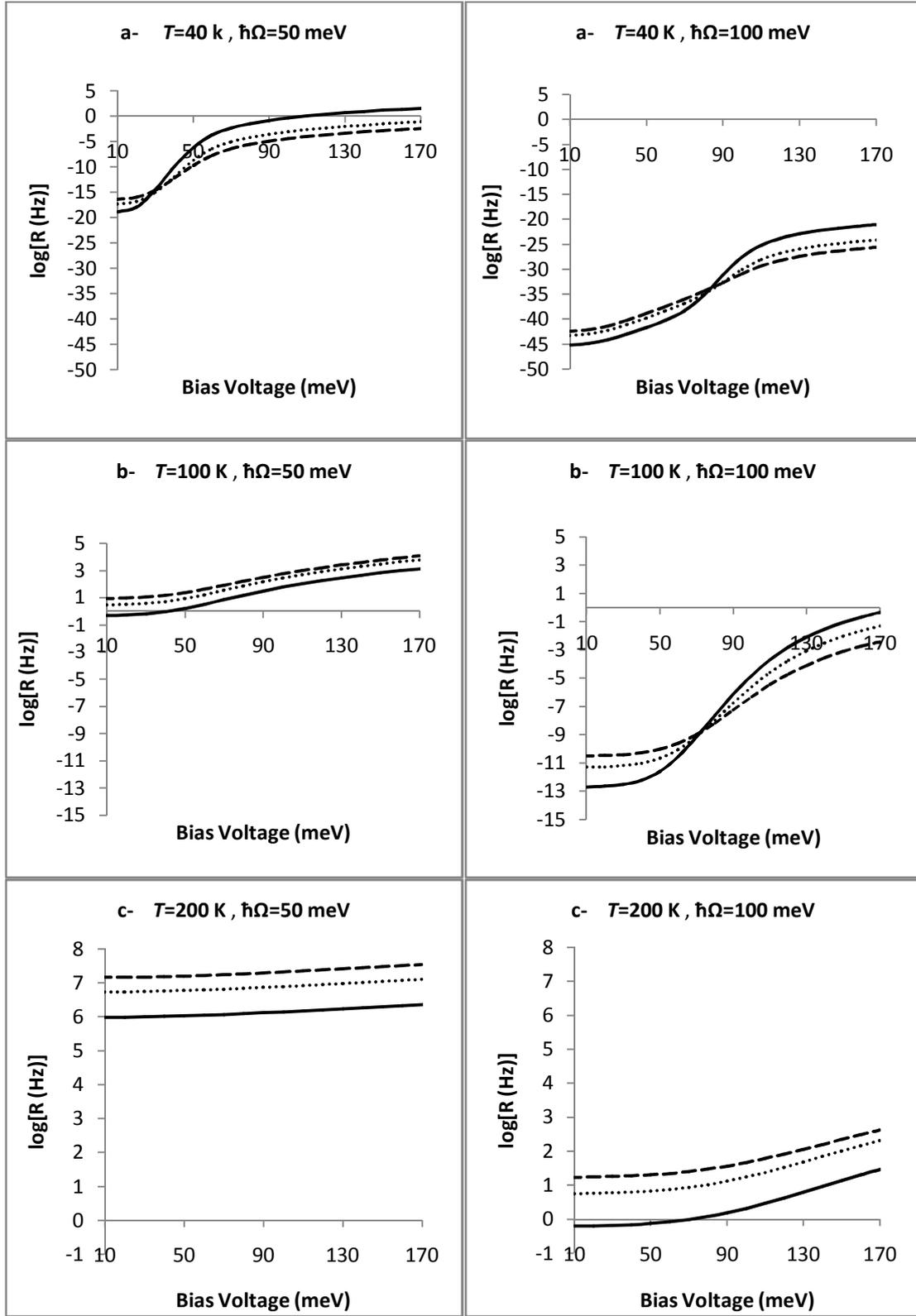
$$\Delta_t = 5 \text{ meV}, \Delta_s = 1000 \text{ meV}, E_{dot} = -100 \text{ meV}$$

$$\text{.....} \chi = 500 \text{ meV}, \text{.....} \chi = 300 \text{ meV}, \text{—} \chi = 100 \text{ meV}$$



الشكل (11): معدل الحركة كدالة لفولتية الانحياز وقوة اقتران الكترون-اهتزاز عندما

$$\cdot \Delta_t = 5 \text{ meV}, \Delta_s = 1000 \text{ meV}, E_{dot} = -100 \text{ meV}, T = 40 \text{ K}, \hbar\Omega = 50 \text{ meV}$$



الشكل (12): لوغاريتم معدل الحركة كدالة لفولتية التحيز ودرجة الحرارة والقران الكترون-اهتزاز عندما

$$\Delta_t = 5 \text{ meV}, \Delta_s = 1000 \text{ meV}, E_{dot} = -100 \text{ meV}, \hbar\Omega = 50 \text{ meV} \chi =$$

----- 500meV, $\chi = 300 \text{ meV}$ — $\chi = 100 \text{ meV}$.

References

1. C. J. Chen, "Introduction to Scanning Tunneling Microscopy", New York, Oxford University Press, 2008.
2. J. Tersoff and D. R. Hamann, Phys. Rev. B **31**, 805 (1985).
3. R. M. Feenstra, J. A. Stroscio, and A. P. Fein, Surf. Sci. **181**, 295 (1987).
4. A. Deshpande, H. Yildirim, A. Kara, D. P. Acharya, J. Vaughn, T. S. Rahman, and S.-W. Hla, Phys. Rev. Lett. **98**, 028304 (2007).
5. H.-V. Roy, C. Kallinger, B. Marsen, and K. Sattler, J. Appl. Phys. **83**, 4695 (1998).
6. J. Tersoff, and D.R. Hamann, Phys. Rev. B **31**, 805 (1985).
7. B. N. J. Persson and A. Baratoff, Phys. Rev. Lett. **59**, 339 (1987).
8. N. Mingo, L. Jurczyszyn, F. J. Garcia-Vidal, R. Saiz-Pardo, P. L. de Andres, F. Flores, S. Y. Wu, and W. More, Phys. Rev. B **54**, 2225 (1996).
9. A. Schiller, and S. Hershfield, Phys. Rev. B **61**, 9036 (2000).
10. C. Ghosh, A. Kara, and T. Rahman, Surf. Sci. **502**, 519 (2002).
11. X.-R. Chen, A. Oshiyama, and A. Oshiyama, Phys. Rev. B **67**, 033408 (2003).
12. T. Mii, S. Tikhodeev, and H. Ueba, Surf. Sci. **502**, 26 (2002).
13. H. Ueba, T. Mii, and S. G. Tikhodeev, Surf. Sci. **601**, 5220 (2007).
14. T. Mii, S. Tikhodeev, and H. Ueba, Surf. Sci. **502**, 26 (2002).
15. S. G. Tikhodeev and H. Ueba, Phys. Rev. B **70**, 125414 (2004).
16. S. Gao, M. Persson and B. I. Lundqvist, Phys. Rev. B **55**, 4825 (1997).
17. S. Tikhodeev and H. Ueba, Surf. Sci. **587**, 25 (2005).
18. E. V. Chulkov, Surf. Sci. **437**, 330 (1999).
19. J. Merino and O. Gunnarsson, Phys. Rev. B **69**, 115404 (2004).
20. C. Kittel, "Introduction to Solid State Physics", Published by Johan Willey and Sons, 1986.
21. C. Delerue and M. Lannoo, "Nanostructures: theory and modeling", Springer, 2004.