نموذج حسابي لعملية تبادل الشحنة في استطارة آيونات عن سطح مغطى بالذرات الملتصقة

ذكرجنا

ى ن

ص مج

بار يد

النا الم

صر خ

فزلطفيجيئ؟ – تكي بطكة نظي ب – جئ لع بطك ا شذب

ا شذب – ك ح ف

الاستلام 2003/10/18, القبول 2004/5/16

كخ ش:

لغرض دراسة استطارة ايون من سطح غير نظيف، استخدم المؤثر الهاملتوني لاندرسون بحيث تضمن التأثيرات الموضعية واشتمل على التفاعلات الرنينية: الأول تفاعل شبه رنيني بين المستوى الذري للأيون المستطير والمستوى الذري للذرة الملتصقة والاخر تفاعل رنيني بين المستوى الذري للآيون المستطير ومستويات حزمة المعدن وكذلك بين المستوي الذري للذرة الملتصقة ومستويات المعدن بينما اهملت تأثيرات التبادل.لقد بدء أولا بفحص معادلات الحركة الثلاث بحيث تحقق قانون حفظ الشحنة ثم تمت معالجتها باستخدام تقريب مبسط إذ حل نظام المعادلات حلاً عددياً الامر الذي ساعدنا على دراسة تأثير كثافة الحالات السطحية. وبعد فحص المظاهر العامة لهذه العملية اتضح انها تطابق الملاحظات العملية، كما استنتجنا انه لغرض فهم استطارة آيونات عن سطوح غير نظيفة كان لا بد من اخذ تغيرات اطوار التفاعلات غير المباشرة بنظر الاعتبار.

1. المقدمة Introduction

يعد موضوع التصاق الذرات على السطح وتأثير ذلك على عمليات تبادل الشحنة من اهم الموضوعات في فيزياء السطوح. ولا تكاد تخلو التجارب العملية الخاصة بعمليات تبادل الشحنة من حدوث التصاق ذرات غريبة على السطح الامر الذي يؤدي إلى تغير النتائج العملية.

لقد عكست نتائج الدراسات العملية التأثير الكبير لوجود الجسيمات الملتصقة على السطح وعلى عملية تبادل الشحنة بين ذرة وسطح[1]. ولقد اكدت المناقشات النوعية لنتائج هذه الدراسات وجود نوعين من التأثيرات.

1. **التأثير غير الموضعي:** والذي يأخذ بنظر الاعتبار تغير دالة الشغل العياني، ولا تأخذ ترابط Couplings تبادل الشحنة وجود الجسيمات الملتصقة بنظر الاعتبار.
2. **التأثير الموضعي:** وهذه التأثيرات تطابق وجود اضطراب Perturbation لتبادل شحنة رنيني في منطقة متموقعة حول الجسيم الملتصق ولمزيد من التفاصيل مراجعة المصدر[1].

لقد كانت الغاية ومنذ بداية العمل بهذه الدراسة وضع انموذج حسابي يعتمد على مفاهيم فيزياوية أساسية والابتعاد عند ايجاد الحلول عن التقريبات التي تستخدم عادة لتسهيل العمليات الرياضية، لذلك كان الحل العددي هو نقطة البداية.

2. النظام والهاملتونين المستخدم The System and the Hamiltonian Used

نفرض ان ايون يستطير من سطح معدن مغطى بالذرات الملتصقة وبتغطية منخفضة [2] بحيث يكون المستوى الذري (مستوى التكافؤ) للأيون الساقط والمستوى الذري (مستوى التكافؤ او مستوى الألفة) للذرة الملتصقة في حالة رنين مع مستويات حزمة التوصيل للمعدن. ويمكن القول ان هناك عمليتي تبادل شحنة رنينية، الاولى هي شبه – رنينية بين المستوى الذري للأيون الساقط والمستوى الذري للذرة الملتصقة والأخرى هي رنينية بين المستوى الذري للأيون الساقط ومستويات حزمة المعدن وكذلك بين المستوى الذري للذرة الملتصقة ومستويات المعدن.

أما الهاملتونين المستخدم فهو متمثل بصيغة هاملتونين Anderson – Newns والذي يهمل تفاعل كولوم التنافري [2,3] بينما يأخذ بنظر الاعتبار تفاعل الذرة الملتصقة مع الأيون الساقط ومع السطح، لذلك يأخذ الهاملتونين الصيغة الآتية [4]:

$$H(t) = E_a C_a^+ C_a + E_d C_d^+ C_d + \Sigma_K E_K C_K^+ C_K + \left[V_{ad}(t) C_a^+ C_d + V_{da}(t) C_d^+ C_a\right] + \Sigma_K \left[V_{dk} C_d^+ C_K + V_{Kd} C_K^+ C_d\right] + \Sigma_K \left[V_{aK}(t) C_a^+ C_k + V_{Ka}(t) C_k^+ C_a\right] \quad \ldots (1)$$

إذ ان الأحرف a و d تشير إلى الآيون الساقط والذرة الملتصقة على التوالي. بينما يشير K إلى مستويات المعدن. إذ ان C_i و C_i^+ تمثل مؤثر الهدم والخلق وان $i = a, d, k$. ويمثل E_a مستوى الطاقة الذري للآيون الساقط غير المعتمد على الزمن إذ أهملت تأثيرات الإزاحة الصورية [5] التي تكون معتمدة على الزمن، وتمثل E_d مستوى الطاقة الذري للذرة الملتصقة وهي كمية غير معتمدة على الزمن. كما تمثل $V_{ak}(t)$ و V_{dk} عناصر مصفوفة التفاعل بين مستويات المعدن مع كل من المستوى الذري للجسيم الساقط والمستوى الذري للجسيم الملتصق على التوالي ويعد V_{dk} مقداراً ثابتاً ايضاً غير معتمد على الزمن.

اما التفاعل $V_{ad}(t)$ فيمثل تفاعل الأيون الساقط والذرة الملتصقة. ومن المعروف ان اعتماد $V_{ak}(t)$ و $V_{ad}(t)$ على الزمن يظهر من خلال المسار الكلاسيكي [5] للذرة المتحركة وتأخذ هذه التفاعلات الصيغ الآتية [6]:

$$V_{ad}(t) = V_{ad}\, e^{-|t|/t_C} \quad \ldots (2)$$

$$V_{ak}(t) = V_{ak}\, e^{-|t|/t_C} \quad \ldots (3)$$

إذ ان t_C يمثل زمن التصادم Collision Time والذي يحسب وفقاً للعلاقة الآتية:

$$t_C = \frac{r_0}{v_\perp} \quad \ldots (4)$$

ويمثل r_o و $v_\perp$ مدى التفاعل Interaction Range والمركبة العمودية لسرعة الجسيم الساقط على التوالي، مما سبق يؤكد ان t_C يميز زمن تفاعل أيون – سطح. ومن الجدير بالذكر ان حساب عناصر مصفوفة V_{ak} وكذلك V_{ad} يرتبط بمدى التفاعل r_o وذلك طبقاً لحسابات DV – Xα [6].

3. الأنموذج الحسابي العددي Numerical Model Calculation

3.1 اشتقاق معادلات الحركة Equations of Motion Derivative

من المعروف ان الخطوة التي تلي وضع المؤثر الهاملتوني المناسب للنظام قيد الدراسة هو اشتقاق معادلات الحركة، لذلك سنعرّف المؤثرات ($C_a(t)$ و $C_k(t)$ و $C_d(t)$ بتمثيل هايزنبرك Heisenberg Representation والتي تحقق معادلات هايزنبرك للحركة (بالوحدات الذرية):

$$\frac{\partial C_a(t)}{\partial t} = i[H, C_a(t)] \quad \ldots (5)$$

$$\frac{\partial C_a(t)}{\partial t} = i[H, C_a(t)] \quad \ldots (6)$$

$$\frac{\partial C_K(t)}{\partial t} = i[H, C_K(t)] \quad \ldots (7)$$

وبتعويض صيغة المؤثر الهاملتوني (معادلة(1)) والاستفادة من خاصية تبادل المؤثرات [7] حصلنا على معادلات الحركة الآتية:

$$i\dot{C}_a(t) = E_a C_a(t) + V_{ad}(t) C_d(t) + \sum_K V_{ak}(t) C_k(t) \quad \dots (8)$$

$$i\dot{C}_d(t) = E_d C_d(t) + V^*_{ad}(t) C_a(t) + \sum_K V_{dk} C_K(t) \quad \dots (9)$$

$$i\dot{C}_K(t) = E_K C_k(t) + V^*_{dk}(t) C_d(t) + V^*_{ak}(t) C_a(t) \quad \dots (10)$$

إذ تم التأكد من ان معادلات الحركة أعلاه تحقق ما يلي [9]:

$$\frac{d}{dt} n_a(t) = -\frac{dn_d(t)}{dt} - \sum_K \frac{d n_k(t)}{d t} \quad \dots (11)$$

والذي يعني ان معدل تغير كثافة ألالكترون الذرية Atomic Electron Density للأيون المستطير يعادل معدل التغير على السطح بوجود الذرة الملتصقة. إذ ان $n_i(t)$ تمثل عدد اشغال المستوى i ويعطى بما يلي:

$$n_i(t) = C_i^+(t) C_i(t) \quad \dots (12)$$

3.2 الحل العددي للمعادلات (10 –8):

The Numerical Solution for Equations (8 -10)

لغرض حل المعادلات (10 – 8) عددياً كان لابد من تحويل كل عملية جمع إلى تكامل وذلك بفرض ما يلي [10]:

$$C_K(t) = \nu^*_k \overline{C}_K(t) \quad \dots (13)$$

$$V_{ak}(t) = \nu_k U_a(t) \quad \dots (14)$$

إذ ان $U_a(t)$ دالة تعتمد على الزمن ترتبط بالمسار الكلاسيكي للجسيم الساقط. أما التفاعل V_{dk} فسوف يكتب بصيغة تناظر صيغة $V_{ak}(t)$ في العلاقة اعلاه وكالآتي:

$$V_{dk} = \nu_k U_d \quad \dots (15)$$

وتمثل U_d دالة غير معتمدة على الزمن يمكن عدها كمعامل تعديل adjustable parameter. اما ν_κ فتمثل عنصر مصفوفة الاضطراب المعتمد على الطاقة أي ان $\nu_k \equiv \nu(E)$.

وبتعويض الفرضيات أعلاه في نظام المعادلات للحركة نحصل على ما يأتي:

$$i\dot{C}_a(t) = E_a C_a(t) + V_{ad}(t) C_d(t) + U_a(t) \Sigma_k |\nu_k|^2 \overline{C}_k(t) \quad \dots (16)$$

$$i\dot{C}_d(t) = E_d C_d(t) + V^*_{ad}(t) C_a(t) + U_d \Sigma_k |\nu_k|^2 \overline{C}_k(t) \quad \dots (17)$$

$$i\dot{\nu}^*_k \overline{C}_K(t) = E_k \nu^*_k \overline{C}_k(t) + U^*_d \nu^*_k C_d(t) + U^*_a \nu^*_K C_a(t) \quad \dots (18)$$

وبالاستفادة من صيغة كثافة الحالات للسطح المعتمدة على الطاقة [2]:

$$\rho_s(E) = \sum_K |\nu_k|^2 \delta(E - E_K) \quad \dots (19)$$

نحصل على المعادلات الآتية:

$$i\dot{C}_a(t) = E_a C_a(t) + V_{ad}(t) C_d(t) + U_a(t) \int \rho_s(E) \overline{C}(E,t) dE \quad \dots (20)$$

$$i\dot{C}_d(t) = E_d C_d(t) + V^*_{ad}(t) C_a(t) + U_d \int \rho_s(E) \overline{C}(E,t) dE \quad \dots (21)$$

$$i\dot{\overline{C}}(E,t) = E_k \overline{C}(E,t) + U_d^* C_d(t) + U_a(t) C_a(t) \quad \ldots (22)$$

حيث ان:

$$\overline{C}(E,t) \equiv \overline{C}_K(t)$$

يمكن حل نظام المعادلات المترابط أعلاه بطريقة عددية باستخدام طريقة رانج – كوتا وبشروط ابتدائية محددة وكالآتي:

$$C_a(t_0 = -\infty) = (0.0, 0.0)$$

$$C_d(t_0) = (1.0, 0.0) \quad \ldots (23)$$

$$\overline{C}(E,t_0) \approx \sqrt{f(E,T)}$$

إذ ان f(E, T) تمثل دالة توزيع فيرمي التي تعطى بما يأتي:

$$f(E,T) = \frac{1}{1 + e^{-E/K_B T}} \quad \ldots (24)$$

وأن T(= 300 ^{0}K) و K_B يمثلان درجة الحرارة وثابت بولتزمان على التوالي.
أما كثافة الحالات السطحية فيمكن ان تأخذ صيغة القطع الناقص Semielliptical Form [11] وكالآتي:

$$\rho_s(E) = \frac{1}{\pi\beta}\sqrt{1 - \left(\frac{E - E_F}{2\beta}\right)^2} \quad \ldots (25)$$

إذ ان E_F (= E = 0) يمثل موقع مستوى فيرمي وأن β معامل مرتبط بعرض الحزمة (4β =). كما ويمكن كتابة $U_a(t)$ على غرار المعادلة (3) وكالآتي:

$$U_a(t) = U_{a0} e^{-|t|/t_C} \quad \ldots (26)$$

وأن U_{a0} مقدار ثابت يمثل شدة التفاعل بين المستوى E_a ومستويات المعدن عند t = 0 ومن الجدير بالذكر ان الطاقة مقاسة بالنسبة لمستوى فيرمي ($E_F = 0$) كما تم استخدام الوحدات الذرية.

4. تطبيق لنظام حقيقي Application to Real System

سيتم في هذه الفقرة حساب عدد اشغال المستوى الذري للأيون الساقط $n_a(t)$ وكذلك عدد اشغال المستوى الذري للذرة الملتصقة $n_d(t)$ للنظام H^+/Al_3O حيث يستطير أيون الهيدروجين الموجب من سطح الألمنيوم (111) Al بوجود ذرات الأوكسجين الملتصقة عليه. أما قيم المعاملات المختلفة فقد اعتمدنا في تحديدها على نتائج حسابات DV–Xα التي حسبت لـ r_0 = 2.5 a.u. وكانت كالآتي: E_a = -1 eV و E_d= - 4 eV. أما المعاملات غير الآسية في صيغ التفاعلات فهي V_{ad} = 2 eV و U_{a0}= 1eV بينما استخدم U_d بوصفه عامل تعديل (Adjustable Parameter). وفيما يخص عرض الحزمة فأنه افترض ليكون مساوياً إلى 15 eV بحيث تملأ إلتكرونات التوصيل نصف هذه الحزمة. ان هذه المعالجة تتميز بوجود زمنين مهمين هما:

1. الزمن t_C الذي يمثل زمن التصادم والذي ترتبط قيمته بمركبة السرعة العمودية بحيث يقابل قيم t_C > 10 a. u مدى السرع الواطئة طبقاً للعلاقة (4).
2. إن مقياس الزمن Time Scale لانتقال الشحنة بين الايون الساقط والذرة الملتصقة يتمثل بالكمية المتغيرة مع الزمن$^{-1}$(V_{ad} (t)) المتمثل بالخط المتقطع في الشكل (1) بوصفها دالة للزمن، بينما يمثل الخط المتصل تصرف V_{ad} (t) مع الزمن إذ ان V_{ad} تساوي 2 eV و4 eV في الأشكال a و b على التوالي ولـ t_C = 30 a.u. وتؤكد الأشكال أن زيادة V_{ad} تؤدي إلى زيادة قوة التفاعل المباشر بين الأيون الساقط والذرة الملتصقة ولكنها تتناقص عندما يبتعد الجسم الساقط عن السطح.

أما زيادة قيمة t_C إلى 60 a.u. (بمعنى نقصان مركبة السرعة العمودية للجسم الساقط) فانها تعني زيادة نصف عرض منحني التفاعل V_{ad} (t) وزيادة مقياس الزمن لانتقال الشحنة (لاحظ الشكل (2)). ومن المعروف ان لقوة التفاعل بين الأيون الساقط والذرة الملتصقة دوراً كبير في عملية تبادل الشحنة وبالأخص عند اقرب تجاور أي عند t = 0.0 حيث تكون V_{ad} (t) أكبر ما يمكن.

لقد تم حساب $n_a(t)$ و n_d (t) بوصفها دالة للزمن وللمعاملات نفسها الخاصة بالنظام ولقيمتين من قيم t_C (30 a.u و 60 a.u.) ولـ U_d = 0.001 و U_{a0} = 1 eV و V_{ad} = 2 eV وكما هو موضح في الشكل (3). وتؤكد هذه الأشكال أهمية منطقة الأقرب تجاور والتي تعتبر المنطقة المؤثرة فعلاً على اعداد الأشغال n_a و n_d، إذ ان زيادة زمن التصادم يعني نقصان السرعة ومن ثم زيادة الفترة الزمنية التي يبقى عندها المستوى الذري للأيون الساقط قريباً من السطح بحيث تحدث انتقالات متكررة بين E_a ومستويات الحزمة (التي من ضمنها E_d)، أنظر الشكل (3b). ومن الجدير بالملاحظة ان قيمة n_a عند t = 0 في الشكل (3 a) تساوي تقريباً 0.22 بينما عند t = 150 a. u. (أي بعيداً عن السطح) فتكون مساوية لقيمة n_a الابتدائية (n_a (t_0) = 0.0)، الذي يمكن ان يفسر على اساس حدوث اعادة تأين (أي انتقال الشحنة من المستوى الذري للأيون الساقط إلى مستويات المعدن) خلال مسار الخروج من منطقة الاستطارة. ولدراسة تأثير قيمة معامل التعديل U_d على حساباتنا لابد اولا من مناقشة المعنى الفيزياوي لـ U_d بالاعتماد على العلاقة (15) إذ يمكن اعتبار U_d كعامل يتناسب مع قوة تفاعل المستوى الذري للذرة الملتصقة مع مستويات المعدن. ولذلك فإن زيادة هذا العامل تعني زيادة تفاعل الذرة الملتصقة مع مستويات المعدن.

لقد تم حساب n_a (t) و n_d(t) كدالة للزمن وللمتغيرات نفسها التي وردت في الشكل (3 a) ولكن لـ U_d= 0.01 ولقيمتين من قيم V_{ad}. هذه الحسابات موضحة بالشكل (4) والتي تؤكد نقصان عدد أشغال المستوى الذري للذرة الملتصقة وبشكل واضح لكل قيم t . وهذه نتيجة منطقية إذ ان زيادة قوة التفاعل U_d تعني زيادة التداخل أو التفاعل بين المستوى E_d ومستويات الحزمة ومن ثم زيادة احتمالية عملية تبادل الشحنة بينهما. بينما تؤكد قيم n_a (t) اعتمادها على التفاعل (V_{ad} (t) اكثر من اعتمادها على قوة التفاعل U_d (بالمقارنة مع الشكل (3 a)).

ولفحص تأثير زيادة التفاعل V_{aK} على عمليات تبادل الشحنة ثم حساب n_a (t) و n_d (t) بوصفهما دالة للزمن ولنفس المتغيرات والمعاملات التي وردت في الشكل (3a) ولكن لـ $V_{ad} = 4$ eV.

الشكل (5a) يستعرض حساباتنا هذه التي توضح زيادة اشغال المستوى E_a ونقصان عدد اشغال E_d وبالأخص عند منطقة اقرب تجاور وكأن العملية هي عملية تفاعل مستويين Two Levels Interaction. وبإهمال تفاعل المستوي الذري للأيون الساقط مع مستويات الحزمة للمعدن (انظر الشكل (5 b)) نحصل على تصرف مشابه للشكل (5a). مما سبق نستنتج انه عند زيادة التفاعل المباشر يمكن بالمقارنة اهمال التفاعل غير المباشر للأيون الساقط مع مستويات الحزمة. ومن الجدير بالذكر ان بعض الباحثين [1] يعملون على اهمال هذا التفاعل لغرض تسهيل حل نظام معادلات الحركة حلا عددياً او تحليلياً.

من المعروف ان الكمية التي يتم ملاحظتها عملياً خلال عمليات تبادل الشحنة بين ايون او ذرة مستطيرة من سطح (سواء اكان السطح نظيفاً أم مغطى بالذرات الملتصقة بدرجة محددة) هي عدد أشغال المستوي الذري للأيون المستطير (n_a (∞) (أي عند وصوله إلى الكاشف عند $t = \infty$) الذي يعد أداة لنقل معلومات محددة عن السطح بينما لا يلاحظ عملياً عدد أشغال مستويات المعدن التي يقع المستوي الذري للذرة الملتصقة من ضمنها، ولذلك سوف نركز في أستعراضنا للنتائج القادمة على قيم n_a فقط.ان هناك الكثير من الدراسات تهمل مسار الدخول على اعتبار ان التفاعلات تكون أكثر تأثيرا عند منطقة أقرب تجاور، المنطقة التي تحدد مسار الخروج ومن ثم درجة تأين الأيون المستطير. بمعنى ان الزمن الابتدائي يكون $t_0 = 0.0$.

ولدراسة تأثير القيمة الابتدائية للزمن على حساباتنا تم حساب(n_a (t وبوصفها دالة للزمن وللحالتين $|E_a - E_d| = 0$eV و $|E_a - E_d| = 3$eV و لـ $t_C = 30$a.u. وكما هو موضح بالشكل (6 a) الذي يؤكد أن n_a (∞) للحالة $|E_a - Ed| = 0$eV (إذ يكون E_a و E_d في حالة رنين) أكبر من n_a (∞) للحالة $|E_a - E_d| = 3$eV (إذ يكون E_a و E_d) في حالة شبه رنين).

أن ما سبق يمثل نتيجة متوقعة معروفة لاستطارة أيون عن سطح صلب ولذلك نحن نتوقع زيادة (n_a (∞ للحالة الأولى عند زيادة زمن التصادم إلى 60a.u. ولكن الشكل (6b) يوضح العكس. ما سبق يتناقض مع المنطق التالي: عند استطارة أيون (موجب) من سطح معدن نظيف فأن عدد الأشغال يزداد مع نقصان السرعة، إذ ان نقصان السرعة يعني طول الفترة الزمنية التي يقضيها الأيون بالقرب من السطح عند منطقة اقرب تجاور وبالتالي توفر الزمن الكافي لعملية تبادل الشحنة.

إن الملاحظات التي حصلنا عليها من ملاحظة الشكل (6) تؤكد حدوث تصرف أو سلوك (غير مألوف عند استطارة ايون من سطح نظيف) يتعلق بكون السطح غير نظيف وكذلك بمدى السرع الواطئة $t_C > 10$ a.u. ولغرض تحديد هذا التصرف اكثر تم حساب n_a (∞) بوصفها دالة لـ t_C وللتفاعلات $V_{ad} = 2$ eV و $U_{a0} = 1$ eV و $U_d =$ 0.01 وللحالتين

$|E_a - E_d| = 0$eV و $|E_a - E_d| = 3$eV وللمديات $0 > t_C > 10$ a. u (الشكل 7a) و 10 a.u. $< t_C <$70 a.u. (الشكل 7b). ان تصرف المنحنيات مع قيم t_C (بمعنى زيادة قيم n_a (∞) مع نقصان السرعة) في الشكل (7a)هو التصرف نفسه لاستطارة أيون من سطح نظيف مع ملاحظة أن قيم (n_a (∞ للحالة $|E_a - E_d| = 3$eV اكبر مما للحالة $|E_a - E_d| = 3$eV ولكل مدى قيم $0 < t_C < 10$ a.u. (مدى السرع $\infty > v < 0.25$a.u.)، بينما يوضح الشكل (7b) أن قيم n_a(∞) للحالة $|E_a - E_d| = 3$eV تتناقص مع نقصان السرعة بينما يظهر المنحني الخاص بالحالة $|E_a - E_d| = 0$eV تصرف تذبذبي Oscillatory يعزى إلى كون عملية تبادل الشحنة بين المستوى E_a = - 5 eV والمستوي E_d = -5 eV عملية الرنينة.

إن التفاعل V_{ak} (t) يعد من التفاعلات المهمة في عمليات تبادل الشحنة بين أيون (أو ذرة) مع سطوح المعادن وهو التفاعل السائد في تفاعل أيون (أو ذرة) مع سطح نظيف وان قوة هذا التفاعل U_{ao} تعتبر من العوامل المهمة(كسرعة الجسيم المستطير وموقع E_a بالنسبة لمستوى فيرمي) التي ترفع من قيمة أشغال الأيون بالشحنة الإلكترونية.

ولغرض فحص زيادة قوة التفاعل U_{ao} ودراسة تأثيره على قيم (∞) n_a تمت إعادة الحسابات الموضحة بالشكل (7) ولكن لـ eV 10= U_{a0}. هذه النتائج موضحة في الشكل (8a) الذي يؤكد الملاحظات السابقة مع ان الشكل (8b) يوضح نقصان أكثر (∞)n_a مع نقصان السرعة وللحالتين 0eV = $|E_a - Ed|$ و $|E_a - Ed| = 3eV$.

5. الاستنتاجات Conclusions

بعد استعراض نتائج هذه المعالجة كان لا بد من تحديد استنتاجاتنا وملاحظاتنا حولها.

أولا: لقد تمت إعادة كتابة المعادلات (8–10) (والتي لا يمكن حلها عدديا) باستخدام التقريب الموضح بالعلاقات (13–15) وباستخدام تعريف صيغة كثافة الحالات السطحية إذ تم تحويل كل عملية جمع إلى عملية تكامل على الطاقة. تم حل المعادلات التفاضلية الخطية(20–22) عدديا باستخدام طريقة رانج–كوتا من الدرجة السادسة وقورنت النتائج مع نتائج الحل باستخدام طريقة رانج–كوتا من الدرجة الرابعة، وكانت الحلول العددية من الطريقتين متطابقة وذات أستقرارية ودقة عالية تم التأكد منها مع كل خطوة حسابية.

ثانيا: لقد أكدت نتائج حساباتنا أهمية أخذ التفاعلات الثلاثة المهمة بنظر الاعتبار دون إهمال أي منها. ومن المعروف ان تفاعل المستوي الذري للأيون الساقط مع مستويات المعدن

V_{ak} (t) يرتبط بعرض المستوي E_a بينما يرتبط تفاعل المستوي الذري للذرة الملتصقة مع مستويات المعدن V_{dk} بعرض المستوي E_d. في حين يمثل V_{ad} (t) التفاعل المباشر بينهما الذي يرتبط بمقياس الزمن الخاص بانتقال الشحنة بين المستويين E_a، E_d.

ثالثاً : من الجدير بالذكر، ان فصل الطاقة عن الزمن باستخدام التقريب الموضح بالعلاقات (13– 15) يعنني اننا افترضنا ان اعتماد التفاعل V_{ak} (t) على الطاقة يأتي من اعتمادها على E_k وهي كمية غير معتمدة على الزمن. وفي هذه الحالة فأن الجهد ينفصل إلى دالتين كما هو موضح بالعلاقات (14) و(15). وبعمل ذلك نكون قد استثنينا كل تأثيرات التغيرات التي تحدث في طور التفاعلات V_{ak} (t) و V_{dk} [11]. أن للتغير الحاصل في الطور أثناء التفاعل أهمية كبيرة وبالأخص عند اخذ المركبة الموازية لسرعة الجسيم الساقط بنظر الاعتبار وبالأخص عند دراسة تأثيرات الاحتكاك على السطح [12]. أثناء تفاعل الذرات او الأيونات مع سطوح الصلب.

رابعاً: تم على الجانب العملي لموضوع الداسة عمل مسح علمي شامل يخص استطارة أيونات من سطوح غير نظيفة وبطاقات واطئة لفهم وفحص ميكانيكية انتقال الشحنة تحت هذه الظروف (وكما هو موضح في الفقرات (1.4) و (1.5) من المصدر [1]). وكان لهذا المسح دور مهم في تشجيعنا على تقديم معالجة نظرية أخرى وكما سينضح من العمل المقبل.

خامساً: واخيراً كان لابد (بعد التأكد من صحة كل الخطوات الحسابية في معالجتنا) من البحث عن أسباب ظهور التصرف غير المتوقع لـ (∞) n_a كدالة لـ t_C (كما هو موضح في الأشكال (7) و (8)) والذي يتناقض مع المظاهر العامة المعروفة لعمليات تبادل الشحنة. إذ تأكد لنا ان ما ورد في النقطة ثالثاً هي من النقاط المهمة التي يجب فحصها ودراستها مستقبلاً.

References:

1. Thikra S. Al Naser M. Sc. Thesis Department of Physics, College of Education, University of Basrah, Basrah, Iraq, 2003. (and references there in).
2. J.M. Al–Mukh, Ph. D. Thesis, College of Science, University of Basrah, Basrah, Iraq. 1997. (and references there in).
3. Haider Qassim Al–Edany, M.Sc. Thesis, Department of Physics, University of Basrah, Basrah, Iraq, 2002.
4. M. Kato, D. J. O'Connor, K. Yamamoto and R. Souda, Surf. Sci. 363, 150, 1996.
5. A. B. Mohmood, M.Sc. Thesis, College of Science University of Basrah, Basrah, Iraq. 1988. (and references there in).
6. K. L. Sebastian, N. C. Jyothi Bhasu and T. B. Grimley, Surf. Sci. 110, L 571 – L 577, 1981.
7. H. Adachi, M. Tsukada and C. Satoko, Journal of the physical Society of Japan Vol. 45, No. 3, 1978.
8. Amnon Yariv, "An Introduction to Theory and Applications of Quantum Mechanics", Copyright by John Wiley and Sons, 1982.
9. W. L. Clinton and Sepra Pal, Surf. Sci. 226, 89 –92, 1990.
10. C. Stampfl, J. Neugebaure and M. Scheffler, Surf. Sci. 307 –309, 8, 1994.
11. K. W. Sulston. A. T. Amos and S. G. Davison, Surf. Sci. 197, 555 – 566, 1988.
12. M. Plihal and David C. Langreth, Physical Review B, Vol. 58, No. 4, 2191, 1998.
13. J. C. Tully, M. Gomez and M. Head – Gordon, J. Vac. Sci. Technol. A 11, 1914, 1993.

Model calculation for the charge Exchange process in the scattering of lon off Adsorbate - Covered Surface

Th. S. Al - Naser **J. M. Al - Mukh**

Physics Department

College of Education, Basrah University, Basrah, Iraq.

Abstract:

To study the scattering of ion from adsorbate - covered solid surface, the Anderson Hamiltonian operator is used which incorporates the local effects and consists of resonant interactions: the first one is the quasi- resonance interaction between the atomic levels of the scattered ion and of the adatom. The second is resonance between the atomic level of the scattered ion and the band levels, and between the atomic level of the adatom and the band levels, while the correlation effects are neglected. Firstly, the three equations of motion are checked to satisfy the law of charge conservation. Then simple approximation is used which make it easy for us to solve them numerically including the surface density of states. The general features are investigated and found to be agree with the experimental observations. It was also concluded that the phases variation of the indirect interactions must be taken into account for better understanding.