

تأثير الحجب (جهد كولوم المحجوب) على معاملي فان در فالز طويل المدى والإعاقة لتفاعل ذرة الهيدروجين مع سطح صلب

سناء كاظم خلف ماجد محمد جاسم

قسم الفيزياء، كلية التربية، جامعة البصرة

البصرة - العراق

E-Mail : majid_alsamer@yahoo.com

ISSN -1817 -2695

(الاستلام 2008/4/23 ، القبول 2008/7/13)

الملخص:

في هذا البحث تم حساب معامل فان در فالز طويل المدى C_3 لتفاعل ذرة هيدروجين مع مجموعة من السطوح الصلبة (الموصلة وشبه الموصلة والعازلة) وحساب معامل الاعاقة $f_3(R)$ لتلك التفاعلات ، وذلك عندما يكون الاكترون يتحرك في جهد كولوم المحجوب ولاطوال مختلفة من طول الحجب D . تتطلب هذه الدراسة حساب الدوال الموجية القطرية عدديا لذرة الهيدروجين باستخدام دالة الجهد المحجوب ولعدة اطوال للحجب والحصول على قيم دقيقة للطاقة المميزة E عند كل طول للحجب D ، حيث تدخل هذه الدوال في حساب استقطابية ثنائي القطب الديناميكية والتي اشتقت بطريقة (KPS) التي مزجت بين طريقتي الاضطراب والتغاير، تم استخدام دالة تغايرية تحتوي على اثنين من العوامل التغايرية ، ومنها حصلنا على اثنين من ترددات الانتقال المؤثرة w_i وشدات التذبذب المؤثرة z_i المقابلة لها. استخدمت هذه القيم الاخيرة في حساباتنا لمعامل فان در فالز C_3 ومعامل الإعاقة $f_3(R)$ لذرة الهيدروجين تحت تأثير الحجب. لقد قورنت نتائجنا لقيم C_3 والمحسوبة عند تأثير الحجب المهم ($D=\infty$) وكانت مطابقة لنتائج باحثين آخرين.

الكلمات المفتاحية : الحجب ، جهد كولوم المحجوب، معامل فان در فالز ، معامل الإعاقة

المقدمة:

طول الحجب (Screening Length) . عندما تكون قيمة D كبيرة جدا أي ان $(D \rightarrow \infty)$ فإن المقدار الاسي تصبح قيمته واحداً وبذلك نحصل على جهد كولوم المتجرد لذرة الهيدروجين $(-1/r)$.

في هذا البحث تم استخدام الصيغة الاولى من جهد كولوم المحجوب في حساب الدوال الموجية القطرية لذرة الهيدروجين حيث تستخدم هذه الدوال في حساب ترددات الانتقال المؤثرة وشدات التذبذب المؤثرة المقابلة لها والتي تدخل في حساب معامل فان در فالز طويل المدى ومعامل الاعاقة . ان الذرة الملتصقة على السطح الصلب طبيعياً يمكن عدها مقيدة تحت تأثير جهدين متحدين الاول جهد الاستقطاب التجاذبي طويل المدى (Long - Range Attractive Potential) او تفاعل فان در فالز طويل المدى ، والثاني هو الجهد التنافري قصير المدى (Short - Range Repulsive Potential) الناشئ من تداخل غيمة الاكترونات

نظرا لأهمية جهد كولوم المحجوب ولما له من تطبيقات في فيزياء البلازما [1,2] وفي الفيزياء النووية [3,4] وكذلك في فيزياء الحالة الصلبة [5,6,7] فقد حظي بأهتمام عدد كبير من الباحثين . كما أن جهد كولوم المحجوب يمتاز بوضوح الأساس الفيزيائي وبسهولة صيغته ووجود حلول رياضية كاملة لحالته المقاربة (وهي حالة جهد كولوم المتجرد) ، ويكتب بالصيغتين التاليين :

$$V(r) = -\frac{1}{r} e^{-r/D} \quad \dots\dots(1)$$

$$V(r) = -\frac{1}{r} e^{-r/D} - \frac{1}{D} \quad \dots\dots(2)$$

ان الصيغة الاولى لهذا الجهد تدعى بـ (Static Screened Coulomb Potential)، اما الصيغة الثانية فتدعى بـ (Shifted Static Screened Coulomb Potential) حيث ان D تمثل

حيث ان $\alpha_2(iw)$ و $g(iw)$ هما استقطابية ثنائي القطب الديناميكية ودالة العزل للسطح الصلب على التوالي، وكلاهما دوال للترددات الخيالية . لقد ادخل حد الاعاقة في الصيغة الخاصة بجهد الاستقطاب التجاذبي طويل المدى من قبل , Dzyaloshinskii و Lifshitz and Pitaevskii [12] و Parsegian [13] و Tikochinsky [14] ، وبذلك أصبحت الصيغة المتضمنة حد الاعاقة تكتب بالشكل التالي [15] :

$$V(r) = -\frac{C_3 f_3(R)}{R^3} \quad \dots(5)$$

حيث ان $f_3(R)$ معامل الاعاقة (Retardation Coefficient) الذي يعطى بالعلاقة التالية [15]:

$$f_3(R) = \frac{1}{4\pi C_3} \int_0^{\infty} \alpha_2(iw) \exp(-2\alpha_{FS} wR) Q(\alpha_{FS} wR) dw \quad \dots\dots\dots(6)$$

الفيزيائي تعد عملية عكسية لعملية القلع وتدخل في فهم طبيعة تركيب سطوح المواد الصلبة [9,10]. في الالتصاق الفيزيائي تكون القوى الوحيدة الرابطة بين الجسيمات الملتصقة والسطح هي قوى فان درفالز التجاذبية، حيث لا يكون هناك اعادة توزيع ملحوظ للكثافة الالكترونية على الذرة الملتصقة وكذلك على السطح [10]. لهذه الاسباب انصب اهتمام عدد كبير من الباحثين لدراسة جهد كولوم المحجوب حيث اعتمدت حساباتهم على الحسابات التجريبية التي استندت الى صيغ مختلفة من الدوال الموجية مثل Harris و Rousel ، وتوجد عدة حسابات اعتمدت على طريقة التصحيح ومن الباحثين الذين استخدموا هذه الطريقة Grant و Iafra ، اضافة الى حسابات عددية دقيقة أخرى قام بها Rogers [3].

لاستقطابية متعدد الاقطاب الديناميكية ، وقد تم الاخذ بنظر الاعتبار الحالة الخاصة التي تكون عندها درجة القطبية $L=1$ المقابلة لحالة ثنائي القطب. حصلنا على الشكل التالي لاستقطابية ثنائي القطب الديناميكية التي تعطى بدلالة الدوال الموجية الفظرية لذرة الهيدروجين وكالتالي :

بين الذرة والسطح [8] . في هذا البحث تناولنا حساب الجهد الاول الذي يعطى بالعلاقة التالية [4] :

$$V(r) = -\frac{C_3}{R^3} \quad \dots\dots(3)$$

حيث ان C_3 هو معامل فان در فالز طويل المدى ، R المسافة الفاصلة بين الذرة والسطح الصلب . ان هذه الصيغة اشتقت لأول مرة من قبل العالم Lennard – Jones [9] ، الا ان هذه الصيغة لا تتضمن حد الاعاقة الذي يظهر عند المسافات الفاصلة الكبيرة R بين الذرة والسطح الصلب.

ان معامل فان در فالز يعطى بالعلاقة التالية [11] :

$$C_3 = \frac{1}{4\pi} \int_0^{\infty} \alpha_2(iw) g(iw) dw \quad \dots\dots(4)$$

حيث ان :

$$Q(x) = 2x^2 + 2x + 1 \quad , \quad x = \alpha_{FS} wR \quad , \quad \alpha_{FS} : \text{ ثابت}$$

$(\alpha_{FS} = 1/137.0359895)$ التركيب الدقيق .

يكتسب جهد كولوم المحجوب اهمية خاصة في عدد من المجالات فهو يعرف بجهد ديبياي – هيكل Debye-Huekel في فيزياء البلازما وبجهد ياكواوا Yakawa في الفيزياء النووية إضافة الى تطبيقاته المهمة في فيزياء الحالة الصلبة وعلى الاخص في المعادن [4] ، كما ان للحجب اهمية في دراسة الالتصاق الفيزيائي Physical Adsorption (والذي يعني التصاق الجسيمات الذرية على السطح) والذي اصبح مسألة ضرورية وممهدة لفحص أي سطح تحدث عليه عمليات كيميائية، فضلا على ان عملية الالتصاق

المعالجة النظرية والحسابات :

أن الهدف الاساسي من هذا البحث هو حساب معامل فان در فالز طويل المدى C_3 ومعامل الاعاقة $f_3(R)$ وبالتالي فإن الاثنان يعتمدان بشكل أساسي على استقطابية ثنائي القطب الديناميكية $\alpha_2(iw)$ ، لذا يصبح من الضروري الحصول على صيغة عامه لهذه الاستقطابية $\alpha_2(iw)$ لإجراء الحسابات المتعلقة بالبحث . اعتمدت الصيغة المعممة والمشتقة من قبل ماجد وشاكر [19]

$$\alpha_2(\pm w) = \frac{2}{3} \left[C_1^2 \{B(1) - A(-4) \pm wA(2)\} + C_1 C_2 \{B(2) - A(-3) \pm wA(3)\} \right. \\ \left. + C_2^2 \{2B(3) \pm wA(2)\} - 2\{C_1 A(2) - C_2 A(3)\} \right] \dots(7)$$

حيث ان C_1, C_2 تمثل العوامل التغيرية لدالة التغير التي تدخل التكاملات على الدوال الموجية القطرية. في صيغة الدالة الموجية القطرية. اما $A(I), B(I)$ فتمثل قيم

$$A(I) = \int_0^\infty R_{nl}^2(r) r^{I+2} dr \quad ; \quad B(I) = \int_0^\infty R_{nl}(r) \left[R_{nl}(r) + r \frac{\partial R_{nl}}{\partial r} \right] r^{I+1}$$

$$C_3 = \frac{g_0}{4\pi} \int_0^\infty \sum_{i=1}^N \frac{z_i}{w_i^2 + w^2} \left(1 + \frac{w^2}{W_s^2} \right)^{-1} dw \dots(11)$$

ان استقطابية ثنائي القطب الديناميكية المعتمدة على التردد w تعطى بدلالة ترددات الانتقال المؤثرة w_i وشدات التذبذب المؤثرة z_i من خلال العلاقة التالية [16]:

$$C_3 = \frac{g_0 W_s^2}{4\pi} \sum_{i=1}^N z_i \int_0^\infty \left(\frac{1}{w_i^2 + w^2} \right) \left(\frac{1}{W_s^2 + w^2} \right) dw \dots(12)$$

.....(8) $\alpha_2(iw) = \sum_{i=1}^N \frac{z_i}{w_i^2 + w^2}$ في حالة تفاعل الذرة مع سطح صلب ، فأن صيغة دالة العزل تعطى بدلالة ثابت العزل للمادة الصلبة $\epsilon(iw)$ ، حيث ان :

ولكن بالاستعانة بالمتطابقة الرياضية التالية [16]:

$$g(iw) = \frac{\epsilon(iw) - 1}{\epsilon(iw) + 1} \dots(9)$$

$$\int_0^\infty \frac{dw}{(r^2 + w^2)(s^2 + w^2)} = \frac{\pi}{2rs(r+s)} \dots(13)$$

استخدمت الصيغة المعممة من قبل Lennard - Jones لدالة ثابت العزل وهي كالتالي [11]:

حيث ان r, s ثوابت.

الان ، بمقارنة المتطابقة الرياضية مع المعادلة (12) نحصل على الصيغة النهائية لمعامل فان در فالز طويل المدى C_3 وكالاتي :

$$g(iw) = g_0 \left(1 + \frac{w^2}{W_s^2} \right)^{-1} \dots(10)$$

$$C_3 = \frac{g_0 W_s}{8} \sum_i \frac{z_i}{w_i (w_i + W_s)} \dots(14)$$

حيث ان g_0 و W_s ثوابت تتعلق بالسطح الصلب وتعطى بالمصدر [18]. تمت دراسة عدد من السطوح الصلبة الموصلة وشبه الموصلة والعازلة .

أما بالنسبة لمعامل الإعاقة $f_3(R)$ والذي يعطى بالعلاقة (6) فيمكن التعبير عنه بطريقة أخرى وكالتالي [17]:

الان اصبح من الممكن كتابة معامل فان در فالز طويل المدى C_3 بدلالة استقطابية ثنائي القطب الديناميكية ودالة ثابت العزل :

$$f_3(R) = \frac{1}{8\pi \alpha_{FS} R C_3} \int_0^\infty \alpha_2 \left(\frac{ix}{2\alpha_{FS} R} \right) \exp(-x) \left[\frac{1}{2} x^2 + x + 1 \right] dx \dots(15)$$

وفي حالة كون الجدار عازل فأن معامل الاعاقة يكتب بالشكل التالي :

$$f_3(R) = \frac{1}{8\pi \alpha_{FS} R C_3} \int_0^\infty \alpha_2 \left(\frac{ix}{2\alpha_{FS} R} \right) \exp(-x) g \left(\frac{ix}{2\alpha_{FS} R} \right) \left[\frac{1}{2} x^2 + x + 1 \right] dx \dots(16)$$

بالتعبير عن استقطابية ثنائي القطب الديناميكية بدلالة ترددات الانتقال المؤثرة w_i وشدات التذبذب المؤثرة z_i نحصل على التالي:

$$f_3(R) = \frac{2g_0(2\alpha_{FS}R)^3 W_s^2}{8\pi C_3} \sum_{i=1}^N z_i \int_0^{\infty} \exp(-x) \frac{\left[\frac{1}{2}x^2 + x + 1 \right] dx}{(x_i^2 + x^2)[(2W_s\alpha_{FS}R)^2 + x^2]} \dots\dots\dots(17)$$

القطب الديناميكية عند الترددات الخيالية، حيث يعتمد عدد الترددات المحسوبة على عدد العوامل التغيرية في دالة التغير ، وفي بحثنا هذا استخدمنا عاملين تغييريين وبالتالي تم الحصول على ترددين لكل انتقال. اما شدات التذبذب المؤثرة z_i فهي كمية فيزيائية بدون وحدات ترتبط مع احتمالية الانتقال الالكتروني بين مستويين للطاقة ، وبالإمكان حساب هذه الكمية لاي انتقال له تردد انتقال مؤثر w_i . استخدمنا المعادلة التالية لحساب شدات التذبذب المؤثرة z_i :

$$z_i = \lim_{w \rightarrow w_i} (w_i^2 - w^2) \alpha_2(w) \dots\dots(19)$$

حيث تمت الاستعانة بتحويلات لابلاس ومن ثم تطبيق صيغة كوس لايوري Gauss - Lagurre التكاملية التي تعطي بالعلاقة التالية :

$$\int_0^{\infty} f(y) e^{-y} dy = \sum_i w_i f(y_i) \dots\dots(18)$$

حيث ان y_i تمثل العقد لمتعدد حدود لايوري و w_i تمثل الاوزان وقد اخذت هذه القيم من المصدر [18] .

يتبين من خلال المعادلات السابقة بأن حساباتنا لكل من معامل فان در فالز طويل المدى C_3 ومعامل الاعاقة $f_3(R)$ تعتمد بشكل مباشر على حساب كل من ترددات الانتقال المؤثرة w_i وشدات التذبذب المؤثرة z_i ، اما ترددات الانتقال فقد حسبت لانتقال ثنائي قطب وذلك بالبحث عن النقاط الشاذة المنفردة في استقطابية ثنائي

النتائج والمناقشة والاستنتاجات:

D . ولكن عند كل قيمة لطول الحجب يتطلب الحصول على قيمة مضبوطة لطاقة الانتقال الالكتروني للحصول على دالة موجية تتحقق عندها الشروط الفيزيائية المطلوبة لحالة الطاقة IS . الجدول التالي يتضمن قيم الطاقة التجريبية المميزة التي حسبت لقيم مختلفة من طول الحجب .

لقد تم حل معادلة شرودنكر القطرية عددياً باستخدام جهد كولوم المتجرد وحسبت الدالة الموجية لذرة الهيدروجين لحالة الطاقة الارضية IS ، بعدها تم استبدال دالة الجهد المتجرد بدالة جهد كولوم المحجوب $V(r) = -(1/r) \cdot \exp(-r/d)$ واستخدمنا نفس البرنامج لحساب الدالة الموجية القطرية لعدة قيم من طول الحجب

جدول رقم(1) قيم الطاقة التجريبية المميزة-الحالة IS لذرة الهيدروجين لقيم مختلفة من طول الحجب بالوحدات الذرية

D (a.u.)	2	5	7	10	20	50
E (a.u.)	-0.148117	-0.3268085	-0.3712183	-0.4070580	-0.4518164	-0.4903400

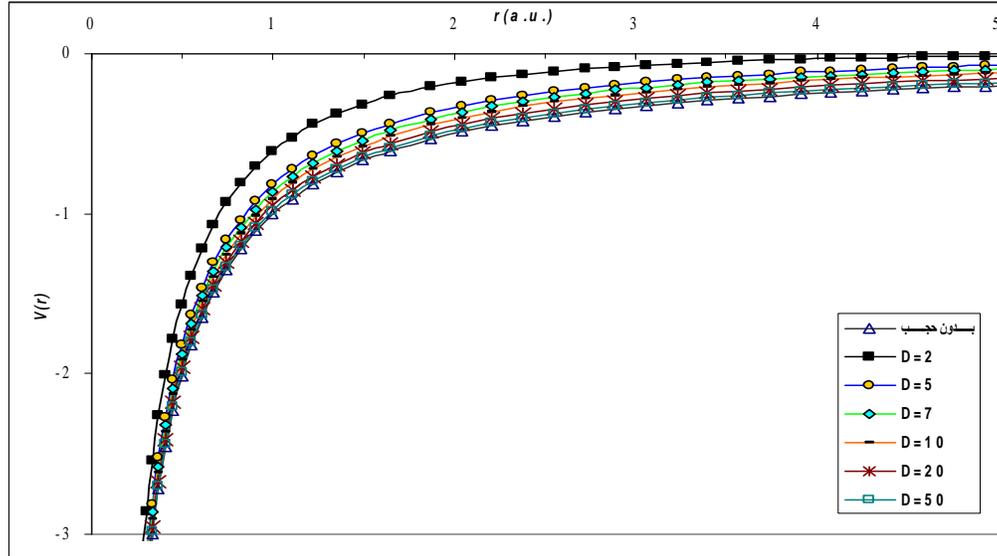
$(\alpha \rightarrow \infty)$ ، وبالتالي فإن ترددات الانتقال المؤثرة تمثل النقاط الشاذة (المنفردة) في استقطابيات متعددة الاقطاب الديناميكية ، وان شدات التذبذب المؤثرة تمثل البقايا (Residues) عند النقاط الشاذة المنفردة البسيطة للاستقطابيات متعددة الاقطاب الديناميكية. الجدول التالي يمثل قيم ترددات الانتقال المؤثرة وشدات التذبذب المؤثرة لقيم مختلفة من طول الحجب .

بعد الحصول على الدوال الموجية القطرية لذرة الهيدروجين في حالة استخدام جهد كولوم المحجوب عند قيم الطاقة المعطاة بالجدول اعلاه ، تم التعويض في معادلة استقطابية ثنائي القطب الديناميكية (7) وبالاستعانة بالمعادلة (8) تمكنا من حساب ترددات الانتقال المؤثرة w_i وشدات التذبذب المؤثرة z_i لعاملين تغييريين ، حيث ان عملية انتقال متعددات الاقطاب من حالة طاقة معينة الى حالة طاقة أعلى تتطلب ان يكون الاستقطاب اكبر ما يمكن

جدول رقم (2) قيم ترددات الانتقال المؤثرة وشدات التذبذب المؤثرة لقيم مختلفة من طول الحجب

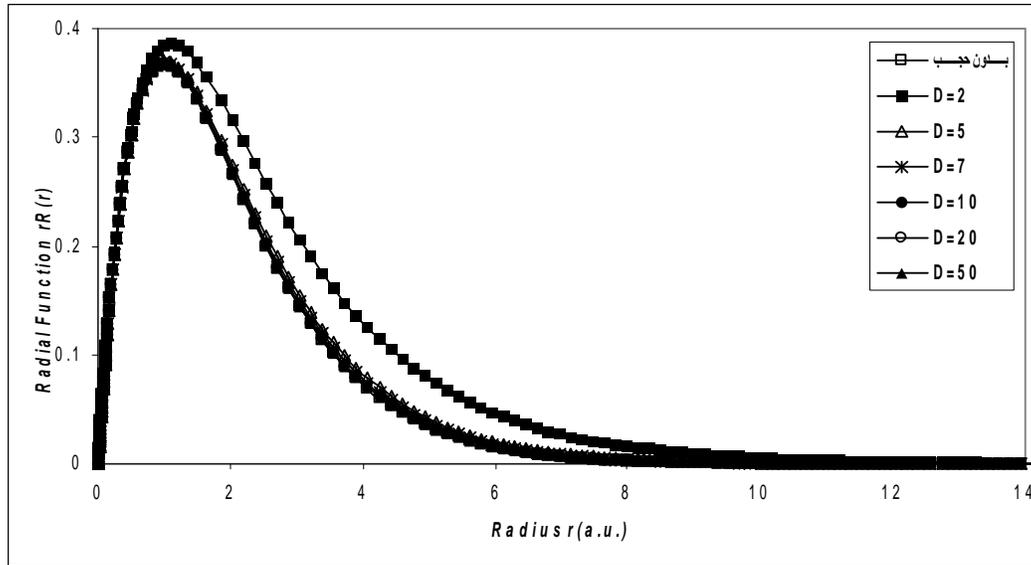
طول الحجب D	تردد الانتقال w_i	شدة التذبذب z_i
2	0.95123	0.61241
	0.35516	0.70121
5	0.96576	0.54634
	0.35776	0.69588
7	0.97553	0.50012
	0.35976	0.67945
10	0.98045	0.46765
	0.37887	0.66854
20	0.99362	0.42678
	0.38435	0.65723
50	0.10056	0.39453
	0.39878	0.60145
∞	1.00000	0.34677
	0.39999	0.59542

لقد تمت المقارنة بين جهد كولوم المحجوب وجهد ذرة الهيدروجين المتجرد ولقيم مختلفة من طول الحجب ، حيث نلاحظ من الشكل رقم (1) التالي بأن الجهد المحجوب يتأثر بطول الحجب D ، وبزيادة قيمة D فإن تأثير الحجب يكون قليلاً ويزداد هذا التأثير



الشكل رقم (1) مقارنة بين جهد كولوم المتجرد وجهد كولوم المحجوب

اما تأثير الحجب على الدوال الموجية القطرية لذرة الهيدروجين يظهر في الشكل رقم (2) ولعدة قيم من طول الحجب D، ان تأثير الحجب يؤدي الى امتداد الدالة الموجية لتشغل حيزاً أكبر اي تصبح كثافة الشحنة اقل مما هو عليه في حالة استخدام جهد كولوم المتجرد ، علماً أن تأثير الحجب يكون واضحاً عند الطول D=2 ويقل بشكل تدريجي مع زيادة قيمة D ، بحيث تتطابق الدوال الموجية مع مثيلتها والمحسوبة باستخدام جهد كولوم المتجرد .



الشكل رقم (2) تأثير الحجب على شكل الدالة الموجية لذرة الهيدروجين

استخدمت المعادلة (14) لحساب قيم معامل فان در فالز طويل وشبه الموصلية والعازلة (Au, Ag, GaAs and NaF) المدى C_3 لتفاعل ذرة الهيدروجين مع ستة سطوح صلبة متمثلة بالـ (الذهب ، الفضة ، الماس ، الجرمانيوم ، زرنخيذ الكاليوم ، التفاعلات. فلوريد الصوديوم) والمقابلة لنماذج من السطوح الصلبة الموصلية

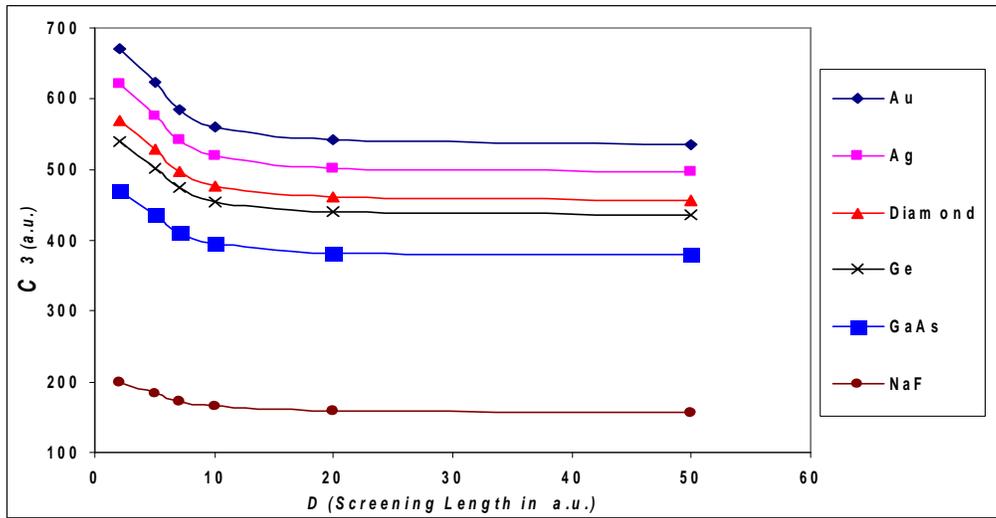
جدول رقم (3) قيم معامل فان در فالز لعدد من السطوح الصلبة ولقيم مختلفة من طول الحجب ($\text{meV}\text{\AA}^3$)

D	C_3					
	Au	Ag	Diamond	Ge	GaAs	NaF
2	661.214	611.481	560.013	529.119	460.471	194.521
5	623.005	576.191	529.000	502.421	436.837	182.428
7	585.552	541.823	498.003	473.645	411.957	171.717
10	561.182	519.490	477.359	455.065	395.905	164.775
20	541.949	501.825	461.051	440.188	383.030	159.259
50	535.848	496.213	455.875	435.420	378.899	157.500
∞	535.726	496.110	455.776	435.258	378.737	157.466
Ref.[11]	529.000	493.000	451.000	439.000	368.000	154.000
Ref.[18]	535.726	496.110	455.776	435.258	378.737	157.466

$\infty \rightarrow D$) مع نتائج المصدر [11] والمصدر [18] وكانت مطابقة لها.

الشكل رقم (3) يوضح العلاقة بين معامل فان در فالز C_3 وطول الحجب D . نلاحظ من الشكل اعلاه التغير الواضح في قيم C_3 عند القيم الصغيرة لـ D ويقل هذا التغير بزيادة طول الحجب الى ان تصل الى حالة الاستقرار عند ($D \geq 20$) لتتساوى مع قيمة C_3 المحسوبة في حالة استخدام جهد كولوم المتجرد ، أي إهمال تأثير الحجب عند تلك القيم من D . وهذا ينطبق على جميع السطوح الصلبة المستخدمة في هذه الدراسة.

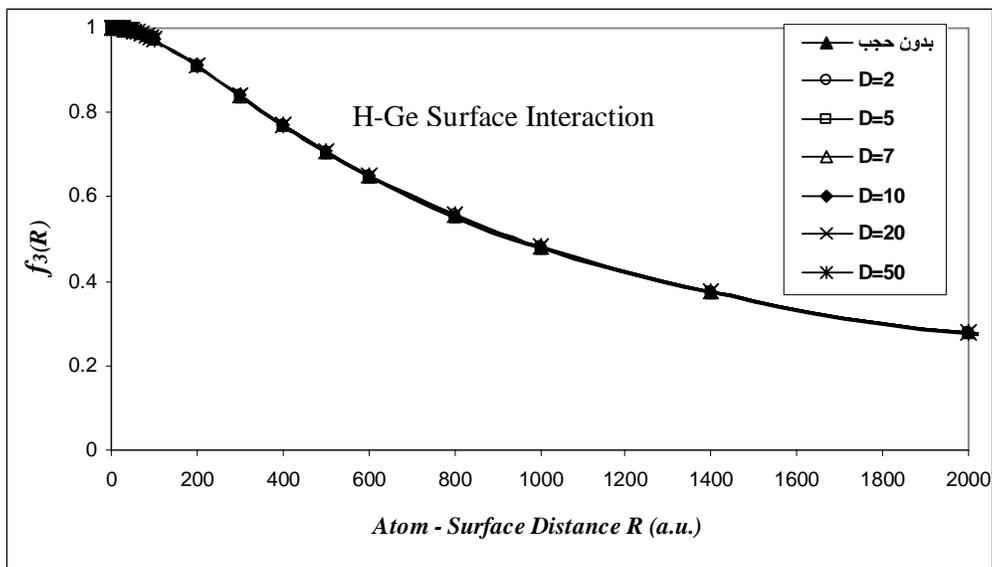
نلاحظ من الجدول أعلاه أن تأثير الحجب واضحاً في حساباتنا لمعامل فان در فالز C_3 لتلك التفاعلات، ويتغير هذا المعامل مع تغير قيمة طول الحجب D ، حيث تزداد قيمة C_3 مع نقصان قيمة طول الحجب D ، وتقترب هذه القيمة مع زيادة طول الحجب الى ان تصل الى قيمة مساوية تقريباً للقيم المحسوبة لهذا المعامل بدون إدخال هذا التأثير، مما يدل على ان معامل فان در فالز لا يتأثر عند القيم الكبيرة لطول الحجب D ($D \geq 50$ in a.u.)، او بمعنى آخر ان الحجب يكون مهملاً عند القيم الكبيرة لـ D . وقد قورنت نتائجنا عندما



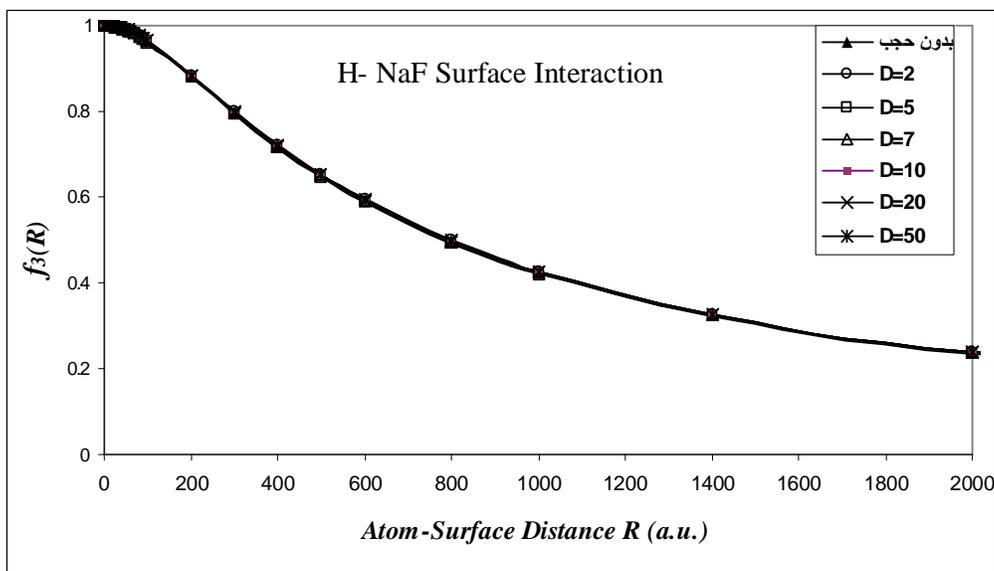
الشكل رقم (3) علاقة معامل فان در فالز C_3 مع تغير طول الحجب D

نستنتج من بحثنا هذا أن تأثير الحجب ذو أهمية كبيرة عند دراسة الالتصاق الفيزيائي وغيرها من الظواهر الفيزيائية التي تكون بها الذرة قريبة من السطح الصلب، حيث يكون لهذا التأثير أهمية بالغة عند حساب معامل فان در فالز طويل المدى C_3 خصوصاً عندما تكون قيمة طول الحجب قليلة، ولكن لا يظهر تأثير الحجب عند حساب معاملات الإعاقة $f_3(R)$ وقيم مختلفة من المسافة الفاصلة R بين الذرة والسطح الصلب، حيث يكون التأثير معدوم ولكل أطوال الحجب D .

اما الاشكال رقم (4) و(5) فتمثل مخططات معامل الإعاقة $f_3(R)$ وقد رسمت لقيم مختلفة من طول الحجب D لتفاعل ذرة الهيدروجين مع الجرمانيوم Ge وفلوريد الصوديوم NaF. حيث نلاحظ بأن منحنيات الإعاقة تأخذ تصرفاً متماثلاً لكل الحالات ولا يظهر للحجب أي تأثير عليها، وهي تبدأ بقيمة الواحد عند قيم R الصفرية ثم تبدأ بالتناقص بزيادة المسافة الفاصلة R بين الذرة والسطح الصلب الى ان تصل لحالة الاشباع وعدم التغير عند قيم R الكبيرة ($R \geq 2000$).



الشكل رقم (4) معامل الاعاقة $f_3(R)$ لتفاعل ذرة الهيدروجين مع سطح شبه موصل -الجرمانيوم



الشكل رقم (5) معامل الاعاقة $f_3(R)$ لتفاعل ذرة الهيدروجين مع سطح عازل - فلوريد الصوديوم

المصادر :

[1] G.M.Harris , Phys. Rev. A, 125 ,1131 (1962).

[2] H. Margenau and M. Lewis , Rev. Mod. Phys. ,31 ,569 (1995) .

[3] M. S. Jaccop , M.Sc. Thesis, University of Basrah , (1990).

[4] J.F. Babb , G.L.Klimchitshaya and V.M. Mostepanenko , Phys. Rev. A, 48 ,4223 (1993) .

[5] M.L.Du. , Phys. Lett. A ,109 (1988) .

- [6] G.Hall , Phys. Chem. Solids. ,23 ,1147 (1962) .
- [7] C.S.Lam. amd Y.P.Varshni , Phys. Rev. A, 4,1875 (1971) .
- [8] E.Zarveva and W. Kohn , Phys. Rev. B , 13, 2270 (1975) .
- [9] W. R. Johnson ,V.A.Dzuba ,U.I.Safronova,and M.S.Safronova, Phys. Rev. A , 69 , 022508 , (2004).
- [10] H. Q. Al-Edany , M.Sc. Thesis, University of Basrah , (2002).
- [11] G.Vidali and M.W.Cole , Surf. Sci. ,110, 10 (1981).
- [12] I.E.Dzyaloshinkii ,E.M.Lifshitz and L.P.Pitaevskii , Adv. Phys. ,10,165 (1961) .
- [13] V.A.Parsegian , Mol. Phys. , 27,1503 (1974) .
- [14] Y.Tikochinsky and K.Spruch ,Phys. Rev. A, 48 ,4223 (1993) .
- [15] Z. Chao Yan , A.Dalgarno and J.F.Babb , Preprint series . P.1(1996) .
- [16] R.Luyckx, Ph. Coulon and H.N.W. Lekker , J.Chem. Phys. ,69,2424 (1978) .
- [17] S. K. Khalff and Fatimah H. Sa'eed , Journal of Basrah Researches , 24, (2000) .
- [18] S. K. Khalff , M.Sc. Thesis, University of Basrah , (1997).
- [19] M .M. J. AL-Samer and S.I. Easa, Basrah J. Science , A, 21 , 57, (2003).

The Screening Effect(Screened Coulomb Potential) in Long-Range van der Waals and Retardation Coefficients for H-Solid Surface Interaction

San'a K. Khalff

Majid. M. Jasim

**Department of Physics – College of Education – University of Basrah
Basrah - IRAQ**

E-Mail : majid_alsamer@yahoo.com

Abstract :

In this paper , we calculated the long – range van der Waals coefficient C_3 for hydrogen atom interact with many solid surfaces (conductor , semiconductor and insulator) , and we calculated the retardation coefficient $f_3(R)$ for these interactions, all of these calculations were achieved for atom with a single valence electron moving in a screened coulomb potential and for a different screening lengths D . Our study require to evaluate the radial wave functions numerically for hydrogen atom under the effect of the screening by using the static screened coulomb potential, and , we computed accurately the transition energies E for each value of screening length D .The computed wave functions inters in calculating of the dynamic dipole polarizability which is derived by using (KPS) method, and it is combined between the perturbation and variation methods . Finally, two variational constants in the variational function are calculated, this is lead to two values of the effective transition frequencies w_i and two corresponding effective oscillator strengths z_i .Our results are in a good agreement with other researchers with respect to the values of the van der Waals coefficient C_3 at neglecting the effect of the screening ($D=\infty$) .

Keywords :Screening , Screening Coulomb Potential , van der Waals Coefficient , Retardation Effects