

مصطفى عبد الستار عبد الجبار

جنان مجيد المخ

كلية العلوم - جامعة ذي قار

كلية التربية - جامعة البصرة

المخلص:

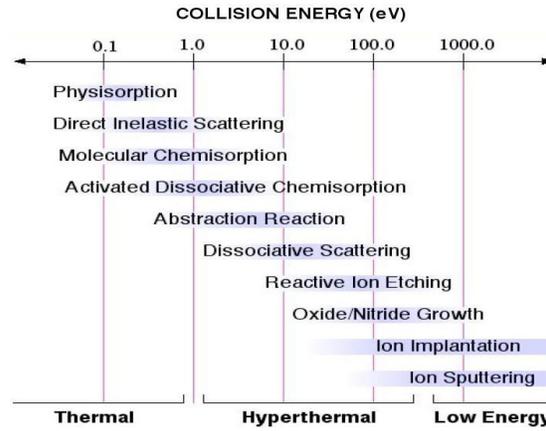
لغرض دراسة تأثير اقتران إلكترون-فونون بسبب ارتداد الذرات الملتصقة خلال استطارة ذرة عن سطح مغطى بتغطية واطئة , أستخدم المؤثر الهاملتوني لأندرسون وقد عُولج نظام المعادلات الخاص بذرة مستطيرة-ذرة ملتصقة/ سطح باستخدام تقريب الحزمة العريضة . طبقت المعالجة لنظام حقيقي هو  $Li - K/W$  , إذ حُسبت احتمالية التأين للذرة المستطيرة وعدد الإشغال للذرة الملتصقة وعدد الفونونات المتولدة عليها دالة لكل المتغيرات المتعلقة بالمعالجة كالطاقة الابتدائية للذرة المستطيرة . أخذ تفاعل ذرة ملتصقة-ذرة ملتصقة بنظر الاعتبار عندما تكون متماثلة وغير متماثلة ووجد أن عدم التماثل يعزز عملية التأين. حسبت احتمالية التأين وعدد الفونونات دالة لتغير قوى الاقتران. وقد حُسب أكبر عدد ممكن من الفونونات التي تتولد بسبب الارتداد بوصفها دالة للطاقة الابتدائية للذرة المستطيرة ووجد أن حساباتنا لم تتجاوز هذا العدد. وأخيراً تضمنت الدراسة مناقشة موسعة حول ديناميكيتي انتقال الشحنة والطاقة والعوامل المتعلقة بهما.

1-المقدمة:

لا يخفى على الباحثين في موضوع تفاعل غاز-سطح أهمية هذا الموضوع في التطبيقات التكنولوجية المتطورة وبالأخص في وقتنا الحاضر. إذ إن 90% من هذه التفاعلات تدخل فيما يسمى بـ(heterogeneous catalysis) لإنتاج كل ما يتعلق بحياتنا كالغذاء والدواء والملابس والسيارات والطب وإنتاج الأمونيا وفي صناعة الأقمار الاصطناعية satellites وفي تصنيع المواد البصرية والتراكيب الدقيقة ذات التوصيلية الفائقة.....الخ. أن التنبؤ بسلوك تفاعلات غاز - سطح يقود إلى جعل كل التطبيقات التكنولوجية المشار إليها أعلاه تصل إلى الفاعلية أو الكمال وتقود كذلك إلى ابتداء تطبيقات مستقبلية جديدة و مهمة.

لقد وضحت الكثير من التجارب العملية أن الطاقة الحركية للجسيم الساقط بالقرب من السطح تعزز ثلاث مجاميع لميكانيكيات التفاعل. الشكل(1) يوضح التفاعلات الأساسية الأكثر شيوعاً لتفاعل غاز-سطح وثلاثة مناهج لطاقة القذيفة الساقطة وهي حرارية thermal energy regime وفوق الحرارية hyper-thermal energy regime والطاقة الواطئة low energy regime [ 1,2 ]. وتكون التفاعلات ذات المدى الطويل بين الغاز والسطح هي الأكثر أهمية في نهج الطاقة الحرارية إذ تكون طاقة التصادم أقل من 1eV. وبسبب كون الطاقة الانتقالية واطئة جداً فإن جسيمات الغاز تلتصق على السطح التصاق فيزيائي أو تحصل ميكانيكية استطارة مباشرة. وفي نهج الطاقة الواطئة تكون الطاقة الحركية للجسيم الساقط كافية بحيث يحدث بعض التعديلات أو يحدث ضرر للسطح. أن لهذين النهجين دوراً

فَعَلًا في تحديد تراكيب لسطوح و مكوناتها الكيميائية إذ هناك الكثير من التجارب العملية, بينما بالمقارنة هنالك القليل نسبياً من التجارب التي تفحص استجابة السطوح للجسيمات القريبة منها (reaction) في نهج الطاقة فوق الحرارية hyper - thermal energy regime



الشكل (1) يوضح عمليات تصادم غاز-سطح من مدى الطاقات الحرارية الى الواطئة.

ومن المعروف أن هناك عملية أساسية تحدث في كل مديات الطاقة ألا وهي عملية انتقال إلكترون (أو عملية تبادل الشحنة). وأن هناك العديد من النماذج النظرية [3] التي وضعت وطورت لفهم عمليات تبادل الشحنة التي تحدث في نظام غاز - سطح. أن استطرارة الأيونات من السطوح بالطاقات فوق الحرارية (1-100eV) له عدد من المميزات الفريدة. إذ يعد مجسماً ممتازاً لمعرفة السطوح إذ إن اختراق الأيونات أو عمل ضرر في السطح يكون صغير جداً ويمكن إهماله. وتعد الأيونات مجسماً سريعاً جداً إذ أن الفترة الزمنية لبقاء الأيونات بالقرب من السطح هي بحدود القليل من مئات Femtosecond. وتمتلك الجسيمات الساقطة الطاقة الحركية الكافية لكسر الأواصر الكيميائية على السطح وهذا يضيف خواص كيميائية مثيرة للإهتمام لهذا النوع من الاستطرارة [4]. أن التصادمات التي تحدث بطاقات النهج فوق الحراري (وهي الطاقات لغاية 10eV) هي الأكثر تحسناً إلى صفات السطوح إذ الجسيمات الساقطة لا تخترق الحد الفاصل فراغ-صلب وأن التفاعلات الإلكترونية وانتقال الشحنة يحدث عند آخر طبقة من ذرات السطح [5].

تعدّ الذرات الخفيفة ذات الطاقة الواطئة مناسبة جداً لدراسة السطوح بشكل عام ودراسة اهتزازات السطح Surface Vibration. وبشكل خاص , عندما تكون الذرة المستطيرة خفيفة الوزن كالهيليوم أو الليثيوم فأنها لا تخترق السطح الى الصلب . وأي معلومة نحصل عليها من الذرة المستطيرة سواء أكانت حول التركيب أم اليناميكية سوف ترتبط فقط بالطبقة الخارجية للبلورة . إضافةً إلى أن حزمة الهيليوم مثلاً توفر مجسماً كيميائياً وكهربائياً ومغناطيسياً وكذلك ميكانيكي إذا كانت طاقات الحزمة بحدود الطاقات الحرارية thermal energy. إن الحركة الانتقالية للحزمة الساقطة والمستطيرة هي فقط التي نحتاج إلى تحليلها للحصول على معلومات إضافية حول تبادل الطاقة والزخم [7]. ولدراسة الاستطرارة غير المرنة فإن للذرات الخفيفة يكون الزخم والطاقة المتبادلة بحدود فونونات السطح. وعندما يكون مساحات مقطع الاستطرارة غير المرنة واطئة كفاية لمدى محدد من درجات الحرارة وزوايا الاستطرارة فأن فونونات سطح منفردة هي التي تثار أو يحصل لها تهدئة وبذلك نحصل على مخطط للطاقة غير المرنة المفقودة وبلاستفادة من الطاقة المتبادلة المقاسة عملياً ومعرفة زوايا الاستطرارة يمكن حساب زخم الفونون بسهولة وبذلك نحصل على إحدى نقاط منحنى التفريق الفونوني Phonon dispersion curve [6]. ويتغير بعض المعاملات الحركية ( طاقة الحزمة وزاوية الاستطرارة ) يمكن الحصول على بقية نقاط منحنى التفريق .

في الآونة الأخيرة، لاقت إمكانية تأثير حركة ذرات السطح على عملية تبادل الشحنة الكثير من الاهتمام على الصعيدين العملي والنظري [8,9]. ان تأثير الحركة الحرارية لهذه الذرات وفي الحالة التي تكون فيها درجات الحرارة تساوي صفرًا مطلقاً درسها وفحصها عملياً Over bosch ومشاركوه [10] وكذلك نظرياً من قبل Brako ومشاركوه [11]. إذ استنتجوا إن تأثير درجة الحرارة يكمن في توزيع فيرمي للاكترونات. إن تصادم الذرة الساقطة مع ذرة الهدف على السطح سوف يسبب ارتداد ذرة الهدف وعليه يمكن أن نناقش فيما إذا كان هنالك تأثير لهذه الحركة على عملية تبادل الشحنة بين الذرة والسطح. عندما تكون الطاقة الحركية للقذيفة عالية (ولغاية 100eV الذي يقع ضمن النهج فوق الحراري) فإن تأثير الارتداد يؤخذ بنظر الاعتبار ولكن تأثيره على أي عملية تبادل شحنة لا يؤخذ بنظر الاعتبار ويعزى ذلك إلى قصر الفترة الزمنية التي تقضيها الذرة المستطيرة بالقرب من السطح بحيث لا يمكن أن تتحسس تأثير الارتداد. أما عند الطاقات الأوطأ (أي بحدود 10eV وأقل) فإن زمن التفاعل يكون كافياً بحدوث تداخل بين العمليات الالكترونية وحركة الذرة المرتدة .

لقد أُدخل تأثير هذا الارتداد في الكثير من الدراسات الخاصة بعملية قلع الذرات من سطوح المعادن والذي عُولجَ نظرياً بطريقة مشابهة لدراسة عملية استطرارة الذرات من السطح على عملية تبادل الشحنة خلال عملية قلع ذرة من السطح [12,13]. لقد وجد إن ارتداد ذرات المعدن تسبب تغوُّراً أنيياً في كثافة الشحنة للمعدن الذي سيؤثر فيما بعد على معدل انتقال الشحنة بين المعدن والذرة الملتصقة والذي يؤثر بدوره على معدل القلع [14]. لقد طورت دراسة نظرية من Tsukada ومشاركوه [15] معتمدة على نموذج أندرسون [16] مع الأخذ بنظر الاعتبار تأثير فونونات السطح بنظر الاعتبار بحيث تم اخذ الاقتران بينها وبين الحالات الالكترونية للنظام.

تعد التجارب العملية لاستطرارة ذرة مجس مهماً لتفاعل الذرات مع سطوح الصلب وأن قياسات فقدان الطاقة يمكن أن يستخدم لقياس التهيجات الحاصلة بسبب تفاعل ذرة-سطح. أن الدراسات الخاصة بفقدان الطاقة مهمة أيضاً لتعيين ميكانيكية لصق الذرات و الجزينات على السطوح (للاطلاع على أهمية الجانب العملي راجع المصدر [1]).

يهدف هذا العمل إلى دراسة موضوع تأثيرات الارتداد في استطرارة ذرة عن سطح الصلب وتأثير ذلك على ديناميكية عملية انتقال الشحنة خلال عملية الاستطرارة لمدى الطاقات فوق الحرارية وبوجود ذرة ملتصقة على السطح.

## 2- الأنموذج الحسابي :

لما كانت الغاية الاساسية من بحثنا هذا دراسة تأثير اقتران إلكترون - فونون على عملية تبادل الشحنة خلال استطرارة ذرة أو أيون عن سطح صلب مغطى بالذرات ( تغطية واطئة ) كان لا بد أولاً من تحديد النظام ومن ثم كتابة الهاملتوني المقابل له لغرض اشتقاق معادلة الحركة .

عندما يكون السطح غير نظيف اي مغطى بذرات غريبة (ذرات ملتصقة عليه) بحيث ان التغطية تكون واطئة Low coverage , ويوصف الحالات الالكترونية للسطح بحيث تكون الذرة الملتصقة adatom عند نهاية سلسلة ذرات السطح وهي تتصرف متذبذباً توافقياً مكمماً , أي إن اقتران إلكترون - فونون يقع على موقع الذرة الملتصقة . وأن الذرة المستطيرة ( وهي كقذيفة ) ترتطم بالذرة الملتصقة وهي التي تولد الفونونات عليها. ما سبق يتفق مع الكثير من التجارب العملية التي فيها تستطير الذرة أو الأيون عن الذرة الملتصقة وليس ذرة السطح- [17-19]. كما أن هذا الفرض يسهل كتابة الهاملتونين الخاص بهذا النظام الذي سيأخذ الهيئة الآتية [20-25] :

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_e + \mathbf{H}_p + \mathbf{H}_{e-p} \quad \dots (1)$$

وبأخذ الذرة الملتصقة بنظر الاعتبار فان الهاملتونين الإلكتروني والصيغة الآتية:

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

الحد الأول من المعادلة أعلاه يخص الذرة المتفاعلة بينما الثاني يخص الذرة الملصقة على السطح أما الحد الثالث فيخص المستويات الذرية للسطح والحد الرابع يخص تفاعل الذرة الملصقة مع السطح والحد الأخير فيمثل تفاعل الذرة المستطيرة مع الذرة الملصقة. من الملاحظ انه تمت إضافة حدود خاصة بالذرة الملصقة إذ يمثل  $E_d$  موقع المستوي الذري للذرة الملصقة بينما يمثل الحد الرابع حد تفاعل الذرة الملصقة مع السطح والحد الأخير يمثل تفاعل الذرة الملصقة مع المستطيرة. يمثل  $V_k$  عناصر مصفوفة الاقتران بين مستويات حزمة الطاقة للسطح وأوربيتال الذرة الملصقة. يمثل  $V(t)$  حد التفاعل المعتمد على الزمن بين أوربيتالات الذرة المستطيرة والملصقة بمعنى إن تفاعل الذرة المستطيرة مع السطح يكون غير مباشر التي سنأتي على تحديد صيغتها لاحقاً .  
أما جزء الهاملتونين الخاص بالبيوزونات :

$$H_p = \omega b^+ b + g(t)(b+b^+) \quad \dots(3)$$

يمثل  $\omega$  تردد المتذبذب التوافقي الكمي المتمثل بالذرة الملصقة إذ أن الأنماط التذبذبية للذرة الملصقة تقترن بحركة الذرة المستطيرة بفرض أن الذرة المستطيرة تؤثر على المتذبذب بقوة خارجية تعطى بالصيغة الآتية [25] :

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

إذ أن  $M$  تمثل كتلة الذرة الملصقة وأن  $g(t)$  تعرف كالتالي :

$$g(t) = -(2M\omega)^{1/2} 2a'E_0 \operatorname{sech}^2(a'v_0 t) \quad \dots(5)$$

تمثل  $E_0$  الطاقة الحركية الابتدائية للذرة المستطيرة . أما  $a'$  فهو معامل خاص بجهد بورن - ماير وأن  $v_0$  مركبة السرعة العمودية الابتدائية . ويعطى الجزء الثالث من الهاملتونين بمايلي :

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

إذ يمثل المقدار  $C_d^+ C_d$  عدد إشغال المستوي  $n_d$  الذري للذرة الملصقة بينما يمثل  $\lambda$  اقتران إلكترون - فونون بين الانماط المتذبذبة للذرة الملصقة وأي إلكترون متموضع عليها .

### 3- اشتقاق معادلات الحركة:

لغرض اشتقاق معادلات الحركة سنعرف المؤثرات  $C_k(t)$  و  $C_a(t)$  و  $C_d(t)$  و  $b(t)$  بتمثيل هايزنبرك Heisenberg representation التي تحقق معادلات هايزنبرك للحركة ( وبالوحدات الذرية ) [27] :-

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

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

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

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

وتمثل الأوقاس المربعة في العلاقات (7) - (10) أوقاس التبادل ويتعويض صيغة المؤثر الهاملتونين (1) في العلاقات (10) - (7) نحصل على العلاقات

$$\begin{aligned} -i\dot{C}_a &= E_a(t)[C_a^+, C_a]C_a + E_d[C_d^+, C_a]C_d + \sum_k E_k[C_k^+, C_a]C_k \\ &+ V(t)[C_a^+, C_a]C_d + V(t)[C_d^+, C_a]C_a + \sum_k V_k[C_d^+, C_a]C_k \\ &+ V_k^*[C_k^+, C_a]C_d + \omega[b^+, C_a]b + g(t)[(b + b^+), C_a] \\ &+ \lambda C_d^+[C_d, C_a](b + b^+) \end{aligned} \quad \dots(11)$$

$$\begin{aligned} -i\dot{C}_d &= E_a(t)[C_a^+, C_d]C_a + E_d[C_d^+, C_d]C_d + \sum_k E_k[C_k^+, C_d]C_k \\ &+ V(t)[C_a^+, C_d]C_d + V(t)[C_d^+, C_d]C_a + \sum_k V_k[C_d^+, C_d]C_k \\ &+ \sum_k V_k^*[C_k^+, C_d]C_d + \omega[b^+, C_d]b + g(t)[(b + b^+), C_d] \dots(12) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} -i\dot{C}_k &= E_a(t)[C_a^+, C_k]C_a + E_d[C_d^+, C_k]C_d + \sum_k E_k[C_k^+, C_k]C_k \\ &+ V(t)[C_a^+, C_k]C_d + V(t)[C_d^+, C_k]C_a + \sum_k V_k[C_d^+, C_k]C_k \\ &+ \sum_k V_k^*[C_k^+, C_k]C_d + \omega b^+[b, C_k] + g(t)[(b + b^+), C_k] \\ &+ \lambda C_d^+C_d[(b + b^+), b] \end{aligned} \quad \dots(13)$$

$$\begin{aligned} -i\dot{b} &= E_a(t)[C_a^+, b]C_a + E_d[C_d^+, b]C_d + \sum_k E_k[C_k^+, b]C_k \\ &+ V(t)[C_a^+, b]C_d + V(t)[C_d^+, b]C_a + \sum_k V_k[C_d^+, b]C_k \\ &+ \sum_k V_k^*[C_k^+, b]C_d + \omega[b^+, b]b + g(t)[(b + b^+), b] \\ &+ \lambda C_d^+C_d[(b + b^+), b] \end{aligned} \quad \dots(14)$$

وبالاستفادة من خاصية تبادل المؤثرات [28] Commutation Relations of Operators

$$[C_i, C_j] = [C_i^+, C_j^+] = 0$$

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

$$[b^+, b^+] = [b, b] = 0 \quad [b, b^+] = 1 \quad \dots(15)$$

$$[b^+, C_i] = [b, C_i^+] = [b^+, C_i^+] = [b, C_i] = 0$$

إذ إن  $\delta_{ij}$  تمثل دالة كرونكر . وبإجراء بعض الخطوات الرياضية نحصل على معادلات الحركة التالية [25] :

$$\dot{C}_a = iE_a(t)C_a - iV(t)C_d \quad \dots(16)$$

$$\dot{C}_d = iE_d(t)C_d - iV(t)C_a - i\sum_k V(t)C_k - i\lambda C_d(b + b^+) \quad \dots(17)$$

$$\dot{C}_k = iE_k(t)C_k - iV_k(t)C_d \quad \dots(18)$$

$$\dot{b} = -i\omega b - i\lambda C_d^+ C_d - ig(t) \quad \dots(19)$$

إن نظام المعادلات ((16)-(19)) يمكن حله بالطرق العددية المعروفة وهو يمثل نظاماً من المعادلات الخطية غير المتجانسة. لقد تم التأكد من أن معادلات الحركة أعلاه تحقق قانون حفظ الشحنة [29],

$$\frac{dn_a}{dt} + \frac{dn_d}{dt} + \sum_k \frac{dn_k}{dt} = 0 \quad \dots(20)$$

والذي يعني إن معدل تغير الكثافة الإلكترونية الذرية Atomic electron density للذرة المستطيرة يعادل معدل التغير على الذرة الملتصقة والسطح. إذ إن  $n_i(t)$  يمثل عدد إشغال المستوي ( $i=a,d,k$ ) ولغرض تسهيل عملية الحساب العددي لنظام المعادلات أعلاه كان لابد من حل المعادلة (2-24) حلاً تحليلياً وكالاتي:

$$C_k(t) = C_k(t_0) \exp(-iE_k(t-t_0)) - i \int_{t_0}^t V_k^* C_d(t') \exp(iE_k(t'-t)) dt' \quad \dots(21)$$

وبتعويض العلاقة (21) في العلاقة (17) نحصل على [21]:

$$\begin{aligned} \dot{C}_d = & iE_d(t)C_d - iV(t)C_a - i\sum_k V_k C_k(t_0) \exp(-iE_k(t-t_0)) \\ & - \sum_k V_k \int_{t_0}^t V_k^* C_d(t') \exp(iE_k(t'-t)) dt' - i\lambda C_d(b + b^+) \end{aligned} \quad \dots(22)$$

وباستخدام التعريفات الآتية:

$$V_k = \gamma v_k \quad \dots(23)$$

$$\rho_s(E) = \sum_k |v_k|^2 \delta(E - E_k) \quad \dots(24)$$

$$\frac{1}{2\pi} \int \exp(iE(t'-t)) dE = \delta(t'-t) \quad \dots(25)$$

وباستخدام تقريب الحزمة العريضة Wide band approximation [ 46 ] فإن  $\rho_s(\mathbf{E}) \rightarrow \rho$  وبذلك يأخذ الحد الرابع من العلاقة (22) الهيئة الآتية:

$$2\pi\gamma^2 \rho C_a(t)$$

وباستخدام التعريف الآتي [30]:

$$C_k(t_0) = v_k^* \tilde{C}_k(t_0)$$

...(26)

$$\tilde{C}_k(t_0) \equiv C(\mathbf{E}, t_0) \approx \sqrt{f(\mathbf{E}, T)}$$

إذ إن  $f(\mathbf{E}, T)$  تمثل دالة توزيع فيرمي - ديراك وأن  $t_0 = -\infty$ .

$$f(\mathbf{E}, T) = \frac{1}{1 + \exp(\mathbf{E}/k_B T)}$$

إذ أن  $T$  تمثل درجة حرارة السطح و  $k_B$  ثابت بولتزمان. وبذلك يأخذ الحد الثالث من العلاقة (22) الهيئة التالية :

$$i\gamma\rho \int_{u_0}^{\infty} \sqrt{f(\mathbf{E}, T)} \exp(-i\mathbf{E}(t - t_0)) d\mathbf{E}$$

إذ إن  $u_0$  تمثل فعر الطاقة للسطح و  $\Phi$  دالة الشغل للسطح وعليه تصبح العلاقة

(22) بالهيئة الآتية:

$$\begin{aligned} \dot{C}_a = & [-i\mathbf{E}_a - 2\pi\gamma^2 \rho - i\lambda (b^+ + b)] C_a(t) - iV(t)C_a(t) \\ & - i\gamma\rho \int_{u_0}^{\infty} \sqrt{f(\mathbf{E}, T)} \exp(-i\mathbf{E}(t - t_0)) d\mathbf{E} \end{aligned} \quad \dots(27)$$

حيث إن  $\rho$  مقدار ثابت مرتبط بعرض الحزمة

$$\rho = 1/\text{bandwidth}$$

...(28)

### الحل العددي لمعادلات الحركة

واعتماداً على ماسبق يتضمن نظام المعادلات العلاقات (2-22) و (2-25) و (2-34) والتي تم حلها باستخدام الطرق العددية المعروفة ومنها طريقة رانج - كوتا من الدرجة السادسة التي تتضمن التأكد من نسبة الخطأ عند كل خطوة حسابية . علماً أنّ الواحدات المستخدمة في معالجتنا كلها وفي أنموذجنا الحسابي هي وحدات ذرية (  $m = \hbar = e = 1$  ) وكل قياسات الطاقة هي بالنسبة لمستوى فيرمي  $E_F = 0$  . وتعطى الشروط الابتدائية للحل بمايلي :

$$C_a(t_0) = (1, 0)$$

$$C_d(t_0) = (0, 0)$$

$$\tilde{C}_k(t_0) = \sqrt{f(\mathbf{E}, T)}$$

(29)

وعليه يمكن الحصول على احتمالية التأين  $P^+$  للذرة المستطيرة والمبتعدة عن السطح

وفقاً لمايأتي :

$$P^+(t) = 1 - |C_a(t)|^2 \quad \dots(30)$$

وهي في الكميات المهمة التي تقاس عادةً باستخدام المطاييف العملية الخاصة بمثل هذه التجارب . كما يمثل المقدار:

$$n_d(t) = |C_d(t)|^2 \quad \dots(31)$$

عدد الإشغال على المستوى الذري للذرة المتصقة وبوصفها دالةً للزمن . أما  $|b(t)|^2$  فيمثل عدد الفونونات على المتذبذب التوافقي عند كل زمن  $t$ .

$$n_{ph}(t) = |b(t)|^2 \quad \dots(32)$$

#### 4- المسار الكلاسيكي للذرة المستطيرة:

يمكن حساب المسار الكلاسيكي  $Z(t)$  للذرة المستطيرة عن السطح بفرض إن الذرة المستطيرة تتفاعل مع ذرة السطح بدالة جهد  $W(Z(t))$  التي تسبب ظهور قوة بينهما تعطى بمايلي :

$$F = - \frac{dW(Z(t))}{dZ(t)} \quad \dots(33)$$

وباختيار صيغة جهد بورن ماير [26] :

$$W(Z(t)) = A \exp(-2a'Z(t)) \quad \dots(34)$$

إذ إن  $A$  و  $a'$  معاملات دالة جهد بورن ماير وهي تعتمد على نوع ذرة السطح والذرة المستطيرة . وعليه يمكن وصف حركة الذرة المستطيرة أثناء عملية الاستطارة على وفق العلاقة [31] :

$$E(t) = E_0 - W(Z) \quad \dots(35)$$

$$E_0 = (1/2)M_p v$$

$$E(t) = (1/2)M_p v_{\perp}^2 \quad \dots(36)$$

تمثل  $M_p$  و  $v_0$  الكتلة والسرعة الابتدائية للذرة المستطيرة عن السطح على التوالي .

أما  $v_{\perp}$  فتمثل مركبة السرعة العمودية عند كل لحظة زمنية  $t$  وبتعويض العلاقات و (34) و (36) في و (35) وحل المعادلة الناتجة تحليلياً يمكن الحصول على المسار الكلاسيكي للذرة المستطيرة:

$$\left(\frac{v_{\perp}}{v_0}\right)^2 = 1 - \frac{1}{\eta} \exp(-2a'Z(t)) \quad \dots(37)$$

وتمثل  $\eta$  النسبة  $\frac{E_0}{A}$

ويحلها يمكن الحصول على مايلي:

$$Z(t) = \frac{1}{2a'} \ln \left[ \frac{1}{\eta} \cos^2(a'v_0 t) \right] \quad \dots(38)$$

هذه العلاقة أي  $Z(t)$  دالة للزمن تكون خطية لقيم  $|t|$  الكبيرة ولكنها تكون "smooth" لقيم  $t$  القريبة من 0 (وهو الزمن المقابل لمنطقة أقرب تجاور) على عكس المسار الخطي المتمثل بالعلاقة:

$$Z(t) = R_0 + v_0 |t| \quad \dots(39)$$

التي تستخدم عادةً في حالة الاستطارة المرنة, إذ أن  $R_0$  تمثل مسافة أقرب تجاور.

#### 5- تطبيق لنظام حقيقي:

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

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

$$E_a(t) = \phi + V_i + \frac{e^2}{4(z(t) + 4.5a_0)} \quad \dots(40)$$

إذ أن  $V_i$  تمثل جهد التأين لذرة  $Li$  المستطيرة وهو مساوٍ إلى  $-5.392\text{eV}$  وأن الحد الأخير من العلاقة (3-1) يمثل الإزاحة الصورية الناتجة من تأثير القوى الصورية التي تعمل على إزاحة المستوي الذري إلى الأعلى بمقدار هذه الإزاحة التي تتناسب مع قيمة المسار  $Z(t)$  أما  $4.5a_0$  [31] فيمكن عدّه هنا طول الحجب وأن  $a_0$  هو نصف قطر بور .

وفيما يخص موقع المستوي الذري للذرة الملتصقة  $K$  بالنسبة لمستوي فيرمي فهو يعطى بما يلي:

$$E_a = \phi + V_i + \frac{e^2}{4d} \quad \dots(41)$$

إذ أن  $V_i$  هنا تمثل جهد التأين للذرة الملتصقة  $K$  ويساوي  $-4.34\text{eV}$  , وأن  $d$  تمثل مسافة الاتزان للالتصاق الكيميائي وهي أيضاً مساوية إلى  $4.5a_0$  [31] .

يعطى التفاعل  $V(Z(t))$  الذي يسمى عادةً تكامل المنح hopping integral بين اوربتالات الذرة المستطيرة و الذرة الملتصقة بالعلاقة التجريبية الآتية [3] :

$$V(Z(t)) = V_0 \exp(-\mu Z(t)) \quad \dots(42)$$

أما صيغة  $V(t)$  التي استخدمناها في معالجتنا فهي مأخوذة من المصدر [21] وتعطى بما يلي:

$$V(t) = V_0 \eta^{\mu/2a'} \text{sech}^{\mu/a'}(a'v_0 t) \quad \dots(43)$$

إذ تم حساب المعامل  $\mu$  الواردة في العلاقة (43) على وفق العلاقة الآتية [32]:

$$\mu = \frac{1}{2} [\sqrt{2v_i(Li)} + \sqrt{2v_i(K)}] \text{ in } a_0^{-1} \quad \dots(44)$$

فيما أخذت معاملات جهد بورن ماير من المصدر [33] وهي مساوية إلى  $A = 149.59\text{eV}$  ,  $a' = 1.065 \text{ \AA}^{-1}$  وفيما يخص قوة الاقتران  $\gamma$  بين أوربتال الذرة الملتصقة والأوربتالات الخاصة بسطح  $W$  فقد ثبتت عند  $0.5\text{eV}$  , وأن قوة الاقتران  $V_0$  بين أوربتالات الذرة الملتصقة والذرة المستطيرة ثبتت عند  $2.5\text{eV}$  علماً بأن كل من  $V_0$  و  $\gamma$  استخدمنا بوصفه معامل تعديل (adjustable parameter).

لقد تمت كتابة الهاملتونين الخاص بهذه الاستطارة على أساس أن الذرة المستطيرة تستطير من ذرة مفردة ملتصقة على السطح , وبذلك فإن الحالات الإلكترونية تكون مرتبطة بنمط اهتزازي واحد في الصلب , بمعنى أن هنالك قيمة واحدة لـ  $\hbar\omega$  . إذ  $\omega$  يمثل تردد المتذبذب وهو يحسب من  $\hbar\omega = 13.7\text{meV}$  المأخوذ من المصدر [31]. ويمكن حساب قوة اقتران إلكترون\_فونون  $\lambda$  وفقاً للعلاقة [21]:

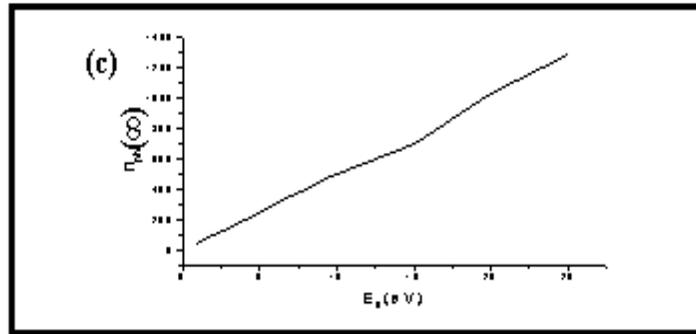
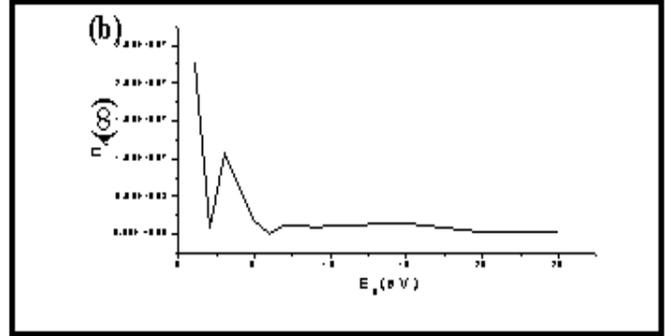
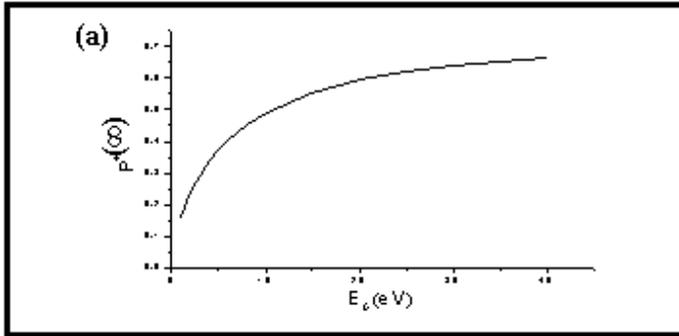
$$\lambda = \sqrt{\frac{1}{2} \omega^3 M D^2} \quad \dots(45)$$

إذ أن ثابت النابض للمتذبذب يساوي  $\omega^2 M$  وأن  $D$  هو الفرق بين طول أصرة  $W - K^+$  عند الاتزان وطول أصرة  $W - K^-$  عند الاتزان. وإن  $M$  تمثل كتلة الذرة الملتصقة  $K^-$  . وعلى وفق العلاقة (6-3) وجد أن  $\lambda$  مساوية إلى  $0.064 \text{ eV}$  .

وأخيراً واعتماداً على ما سبق يمكن كتابة الملاحظات الآتية:

- 1- إن كتلة الذرة المستطيرة هي أقل من كتلة الذرة الملتصقة وبذلك فإن التصادم سوف لن يكون تصادم عنيف.
- 2- يعتمد حساب قوة الاقتران  $\lambda$  على كل من كتلة الذرة الملتصقة ومقدار التردد الاهتزازي  $\omega$  على المتذبذب.
- 3- يعتمد حساب قوة الاقتران  $\lambda$  أيضاً على عدد إشغال المستوي الذري الخاص بالذرة الملتصقة فهو إما يكون فارغ  $n_d = 0$  أو مملوء  $n_d = 1$  عند التصادم.

ولغرض تحديد المظاهر العامة للاستطارة التي تتضمن أخذ تأثيرات الارتداد بنظر الاعتبار كان لابد من حساب احتمالية التأين وعدد إشغال المستوي الذري للذرة الملتصقة وعدد الفونونات عليها دالةً لطاقة الذرة المستطيرة الابتدائية وكما هو يتضح من الشكل (2) . الأشكال (2a) و(2c) تؤكد زيادة  $p^+$  و  $n_{ph}$  مع زيادة  $E_0$  . بينما يؤكد الشكل (2b) أن عدد إشغال الذرة الملتصقة يكون تقريباً مساوياً للصفر لكل قيم  $E_0$  مع ملاحظة أن للعلاقة سلوكاً تذبذبياً لقيم  $5eV < E_0$  . ولكن هذا السلوك لا يكون له تأثير محسوس إذا كانت كل قيم  $n_d$  تقريباً مساوية للصفر . ولغرض كتابة استنتاج نهائي حول علاقة احتمالية التأين بالسرعة الابتدائية للذرة المستطيرة كان لابد من استعراض الجدول (1) الذي يؤكد الملاحظات التي سبق الإشارة لها . من المعروف أنه عند الاستطارة المرنة لذرة عن سطح صلب و بسرعة واطئة فأن زمن التفاعل يكون كافياً بحيث يمكن أن تحدث عملية انتقال الشحنة بين أوربتالات الذرة المستطيرة ومستويات حزمة طاقة السطح ومن ثم تكون احتمالية التأين أعلى عند السرعة الواطئة . بينما في حالة السرع العالية يكون الزمن غير كافٍ لانتقال الشحنة لهما لذلك تبقى احتمالية التأين واطئة . و بالرجوع إلى النقاط (7) و(8) نجد أن علاقة السرعة العمودية للذرة المستطيرة والزمن التي تقضيه الذرة بالقرب من السطح لا تبقى ذاتها في حالة الاستطارة غير المرنة . ما سبق يؤكد وجود عوامل أخرى مؤثرة من أهمها قوة اقتران إلكترون- فونون وموقع المستوي الذري للذرة المستطيرة بالنسبة لمستوي فيرمي عند منطقة أقرب تجاور . ومن المعروف أن موقع المستوي الذري للذرة المستطيرة بالنسبة لمستوي فيرمي يعتمد على المسار  $Z(t)$  وهو يعتمد على السرعة الابتدائية للذرة المستطيرة وفقاً لعلاقة غير خطية معطاة بالمعادلة (38) . يستعرض العمود الأخير في الجدول (1) قيم  $t$  التي تقع عندها  $E_p(t)$  أعلى مستوي فيرمي كدالة للطاقة الابتدائية  $E_0$  . ومن المعروف أنه كلما زاد عرض هذه الفترة الزمنية يقل عدد الاشغال  $|Ca|^2$  , بمعنى تزداد احتمالية التأين وفقاً للصورة الستاتيكية . وعليه فإن الصورة الستاتيكية لا تصح للاستطارة غير المرنة بوجود تأثيرات إلكترون-فونون .



الشكل (2) يوضح احتمالية التأين للذرة المستطيرة وعدد إشغال الذرة الملتصقة وعدد الفونونات عليها بعيداً عن السطح دالةً لطاقة الذرة المستطيرة الابتدائية

الجدول (1) يستعرض  $p^+(\infty)$  و  $n_{ph}(\infty)$  و  $n_d(0)$  و  $g(0)$  و  $V(0)$  و  $Z(0)$  وكذلك قيم  $t$  التي تقع عندها  $E_a(t)$  أعلى مستوي فيرمي

$E_0$ (eV)	$p^+(\infty)$	$n_{ph}(\infty)$	$n_d(0)$	$g(0)$ (a.u.)	$V(0)$ (a.u.)	$Z(0)$ (a.u.)	قيم $t$ التي تقع عندها $E_a(t)$ أعلى مستوي فيرمي (a.u.)
1	0.15959	46.047	0.00730	-0.00487	0.00646	4.4445	-988.00 ≤ t ≤ 982.00
2	0.23981	97.372	0.01502	-0.00974	0.00933	3.8293	-898.00 ≤ t ≤ 902.00
3	0.29477	148.82	0.02229	-0.01461	0.01157	3.4695	-827.28 ≤ t ≤ 822.72
4	0.33817	200.30	0.02948	-0.01948	0.01348	3.2143	-744.00 ≤ t ≤ 776.00
5	0.37395	251.82	0.03600	-0.02435	0.01517	3.0163	-724.19 ≤ t ≤ 725.81
6	0.40416	303.35	0.04209	-0.02922	0.01671	2.8543	-690.74 ≤ t ≤ 689.26
7	0.43013	354.90	0.04781	-0.03409	0.01813	2.7175	-661.52 ≤ t ≤ 668.48
8	0.45267	406.64	0.05294	-0.03896	0.01946	2.5990	-639.00 ≤ t ≤ 641.00
9	0.47239	458.04	0.05850	-0.04383	0.02071	2.4946	-622.67 ≤ t ≤ 617.33
10	0.48974	509.63	0.06241	-0.04869	0.02190	2.4012	-595.79 ≤ t ≤ 594.31
15	0.55368	767.10	0.08349	-0.07304	0.02715	2.0414	-533.23 ≤ t ≤ 526.77
20	0.59408	1026.0	0.09674	-0.09738	0.03160	1.7861	-487.10 ≤ t ≤ 482.90
25	0.62085	1284.4	0.11350	-0.12176	0.03560	1.5878	-449.60 ≤ t ≤ 450.40
30	0.63919	1542.9	0.12003	-0.14611	0.03921	1.4260	-420.72 ≤ t ≤ 419.28
35	0.65215	1801.5	0.12616	-0.17030	0.04252	1.2912	-406.10 ≤ t ≤ 403.90
40	0.66155	2060.1	0.13422	-0.19476	0.04566	1.1709	-387.90 ≤ t ≤ 382.10

لقد تم في دراستنا أخذ الذرة الملتصقة من خلال كتابة الهاملتونين الخاص بالنظام الذي يمثل بالحدود الثاني والرابع والخامس في العلاقة (2-8). إذ أخذت التأثيرات الموضعية Local effects [34] من خلال الحد الرابع، إذ إن قوة اقتران الذرة الملتصقة تحدد بـ  $V_k = \gamma v_k$  التي يمكن حسابها لأي نظام نظرياً [35]. ومن المعروف أن قوة الاقتران  $\gamma$  تعتمد على نوع الذرة الملتصقة وعلى مدى قرب الذرات الملتصقة المجاورة لها وكذلك على تماثل وعدم تماثل الذرات الملتصقة.

لقد أكدت الكثير من الدراسات النظرية والعملية [6] التي تناولت موضوع تفاعل ذرة ملتصقة-ذرة ملتصقة أن لهذا التفاعل تأثيراً على عملية تبادل الشحنة بين جسيم مستطير وذرة ملتصقة على السطح ومن ثم سيكون لهذا التأثير أهمية أكثر عندما يؤخذ اقتران إلكترون-فونون بنظر الاعتبار. وفي معالجتنا هذه أخذ تفاعل ذرة ملتصقة-ذرة ملتصقة  $J$  من خلال إضافته (كقيمة غير معتمدة على الزمن) إلى مستوى طاقة الذرة الملتصقة وفي حالتين [35]:

أولاً: عندما تكون الذرات الملتصقة متماثلة

$$E_d \Rightarrow E_d - Jn_d(t)$$

...(48)

إذ إن  $J$  كمية موجبة وأن  $n_d(t)$  يمثل عدد إشغال الذرة الملتصقة المجاورة (انظر الشكل (3)) الذي من المفترض أن يتغير مع الزمن أيضاً خلال عملية الاستطارة. ولما كان الهاملتونين (في العلاقة (2)) لا يتضمن  $n_d(t)$  وأن الذرات متماثلة، أي أن كلاهما ذرات بوتاسيوم

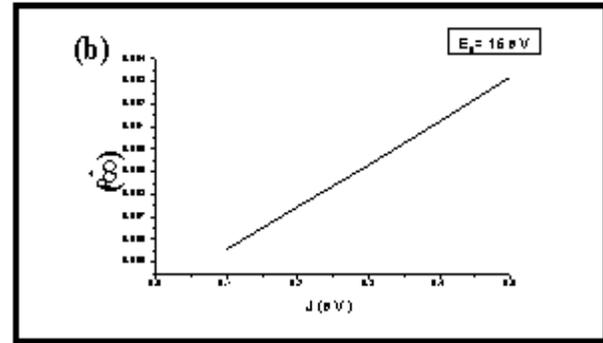
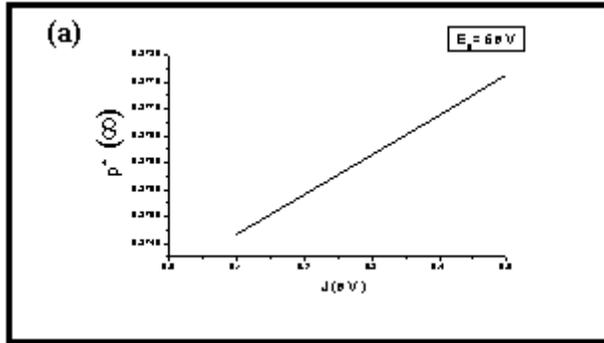
سنفترض أن  $n_d(t) = n_d(t)$  . ما سبق لا يتعارض مع ما هو معروف عملياً [33] إذ تلتصق الذرات القلوية على السطح وهي أيونات موجبة .

ثانياً: عندما تكون الذرات الملتصقة غير متماثلة

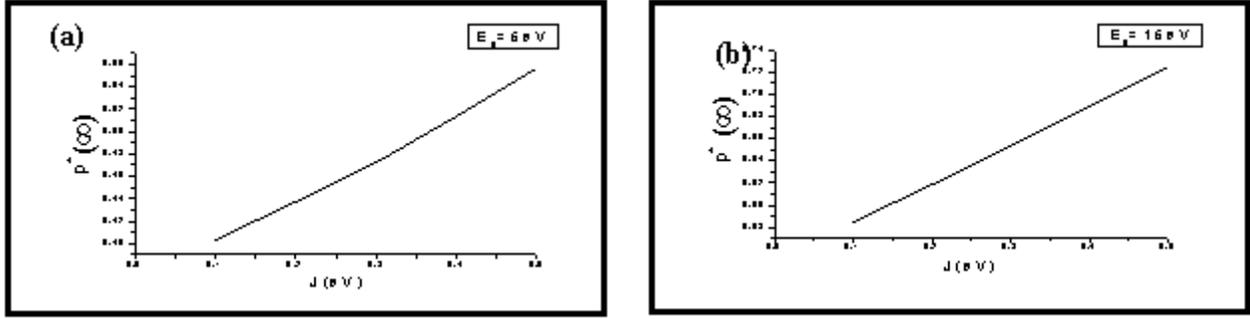
$$E_d \Rightarrow E_d - J$$

(49)

لغرض فحص تأثير تفاعل ذرة ملتصقة-ذرة ملتصقة حسب  $p^+(\infty)$  و  $n_d(\infty)$  و  $n_{ph}(\infty)$  دالة لقيم  $J$  المحصورة بالمدى  $0 \rightarrow 0.5eV$  وللطاقات الابتدائية  $5eV$  و  $15eV$ . يتضح من الشكل (3) الذي تم استعراضه لحالة الذرات الملتصقة المتماثلة والذي يؤكد وكما هو متوقع أن تأثير تفاعل ذرة ملتصقة-ذرة ملتصقة غير محسوس ويمكن إهماله . أما الشكل (4) فيوضح حساباتنا في حالة الذرات الملتصقة غير المتماثلة الذي يؤكد أهمية أخذ هذا التفاعل بنظر الاعتبار إذ تزداد  $p^+(\infty)$  مع زيادة قوة التفاعل  $J$  . ويمكن تفسير ذلك على أنه مع زيادة قوة التفاعل  $J$  فإن الذرة الملتصقة  $d'$  (والتي تلتصق على السطح وتكون في حالة اتزان وهي ذرة أو أيون سالب) تعمل "كمغناطيس" لجذب شحنة الذرة المستطيرة وبذلك تزداد احتمالية تأينها. أما فيما يخص حساب  $n_d(\infty)$  و  $n_{ph}(\infty)$  فإنهما لا يعتمدان على قوة هذا التفاعل ولا على نوع الذرات الملتصقة فيما إذا كانت متماثلة أو غير متماثلة خلافاً لما مفترض. ويعزى ذلك إلى إن التفاعل  $J$  أُضيف إلى قيمة  $E_d$  ولم يؤخذ بنظر الاعتبار في حسابات نظرية خاصة بعناصر مصفوفة الاقتران  $V_k$  كدالة متغيرة مع الزمن



الشكل (3) يوضح  $p^+(\infty)$  لقيمة قوة تفاعل ذرة ملتصقة-ذرة ملتصقة عندما تكون الذرات الملتصقة متماثلة



الشكل (4) يوضح  $p^+(\infty)$  الة لفة تفاعل ذرة ملتصقة-ذرة ملتصقة عندما تكون الذرات الملتصقة غير متماثلة

لما كان مسار الذرة المستطيرة مسار كلاسيكي معرف بالعلاقة (38) وأن الاستطارة غير مرنة إذ تحسب الطاقة الحركية للذرة المستطيرة بوصفها دالة للزمن خلال مسار الاستطارة على وفق العلاقة (36a) فإن أكبر عدد للفونونات المتولدة على المتذبذب التوافقي يمكن أن يعطى بما يلي:

$$N_{\max} = \frac{Ae^{-2a'Z(0)}}{\hbar\omega} \quad \dots(50)$$

لذلك فإن عدد الفونونات المحسوبة على وفق أنموذجنا الحسابي عند  $t = \infty$  ولقيمة محددة لـ  $E_0$  يجب أن لا يتجاوز عدد الفونونات المحسوبة على وفق العلاقة (11). ومن الجدير بالذكر إننا لم نحصل على دراسة عملية أو نظرية تحسب هذا العدد لغرض المقارنة. الجدول (2) يستعرض مقارنة واضحة بين عدد الفونونات المحسوبة على وفق أنموذجنا الحسابي وأكبر عدد مسموح محسوب على وفق العلاقة (11) بوصفها دالة للطاقة الابتدائية للذرة المستطيرة. يؤكد الجدول (2) أن حساباتنا لم تتجاوز قيم  $N_{\max}$  ولكل قيم  $E_0$  المقابلة.

الجدول (2) يوضح قيم  $n_{ph}$  و  $N_{\max}$  دالة لـ  $E_0$

$E_0$ (eV)	$n_{ph}$	$N_{\max}$
1	46.047	73
2	97.372	146
3	148.82	219
4	200.30	292
5	251.82	365
6	303.35	438
7	354.90	511
8	406.64	584
9	458.04	657
10	509.63	730
15	767.10	1095
20	1026.0	1460
25	1284.4	1825

## 6- المناقشة والاستنتاجات:

أتضح من حساباتنا هذه أن  $p^+(\infty)$  تزداد مع زيادة السرعة الابتدائية على عكس ما هو متوقع في حالة الاستطارة المرنة. إذ لا توجد علاقة هنا بين سرعة الجسيمة المستطيرة والفترة الزمنية التي يقضيها الجسيم بالقرب من السطح بحيث يمكن أن تتم عملية تبادل الشحنة. كذلك إن الصورة الستاتيكية لا تصح هنا، إذ وجدنا أن الفترة الزمنية التي تقع فيها  $E_a(t)$  أعلى مستوي فيرمي تزداد كلما قلت السرعة الابتدائية حيث تزداد احتمالية التعادل بمعنى تقل احتمالية التأين تبعاً لذلك. كما يتضح من حساباتنا أنه كلما قلت مسافة أقرب تجاور  $Z(0)$  فإن كلاً من  $p^+(\infty)$  و  $n_{ph}(\infty)$  يزداد وبشكل ملحوظ. علماً أنه قيمة  $Z(0)$  تحدد بمعاملات جهد بورن ماير الخاصة بالنظام المستخدم وكذلك السرعة الابتدائية للذرة المستطيرة. فحص أيضاً تأثير درجة حرارة السطح على ديناميكية انتقال الشحنة وديناميكية انتقال الطاقة وأتضح أنه ليس لتغير درجات الحرارة تأثير على حساب  $p^+(\infty)$  و  $n_{ph}(\infty)$ .

وفيما يخص تفاعل ذرة ملتصقة ذرة ملتصقة، اتضح أن لهذا التفاعل دوراً وأهمية واضحة عندما تكون الذرات الملتصقة المتجاورة غير متماثلة. ونقصد بغير التماثل هنا اختلاف الكتل وحالة الشحنة وهي ملتصقة بمعنى هل تلتصق وهي أيون موجب "electro positive" مثال على ذلك التصاق الذرات القلوية على سطح التنكستن أم تلتصق وهي أيون سالب مثلاً "electro negative" مثال على ذلك التصاق ذرات الأوكسجين على سطح التنكستن وكذلك تلتصق وهي ذرة مثال على ذلك التصاق الهيدروجين على سطح التنكستن. ويمكن أخذ تأثير تفاعل ذرة ملتصقة-ذرة مانتصقة في معالجتنا على أن تبقى المعالجة ضمن التغطية الواطئة بحيث يبقى التركيب الإلكتروني للسطح تقريباً نفسه.

من المعروف أن قوى الاقتران  $V_0$  و  $\gamma$  و  $\lambda$  وكذلك النمط  $h\omega$  يتغير تبعاً لما يلي:-

1- تفاعل ذرة ملتصقة- ذرة ملتصقة.

2- درجة التغطية وتغير التركيب الإلكتروني للسطح.

3- تأثير مجال خارجي كأن يكون مجالاً كهربائياً أو مغناطيسياً أو الليزر.

4- فرق الكتل (كتلة الذرة المستطيرة والذرة الملتصقة).

ولمعرفة تأثير ما ورد في النقاط أعلاه حسب  $p^+(\infty)$  و  $n_{ph}(\infty)$  بَعْدَ دالة  $V_0$  و  $\gamma$  و  $\lambda$ . واتضح أن  $p^+(\infty)$  يزداد بشكل ملموس وواضح مع زيادة  $V_0$  بينما يظهر تصرف مغاير مع زيادة  $\lambda$ . أن  $V(t)$  تمثل التفاعل المباشر بين الذرة المستطيرة والملتصقة وأن شدة أو قوة هذا التفاعل عند  $t=0$  تحدد بقيمة  $V_0$  وأن صيغة  $V(t)$  تعتمد على معاملات النظام قيد الدراسة والطاقة الابتدائية للذرة المستطيرة. لذا إن زيادة  $V_0$  توازي زيادة الطاقة الابتدائية للذرة المستطيرة.

أما فيما يخص  $\lambda$ ، فإن تغييرها يمكن أن يعني تغير التركيب الإلكتروني على السطح بسبب التغطية الذي لا يعني بالضرورة زيادة تأثيرات الارتداد على حساب عملية انتقال الشحنة.

إن تغير  $\gamma$  يعني بالتأكيد تغير طبيعة الاقتران بين أوربتالات الذرة الملتصقة وذرات السطح التي تحدد بنوع الالتصاق ونوع الأصرة المتكونة بينهما. والواضح أن هنالك قيمة لـ  $\gamma$  تحدد بنوع النظام ومعاملاته تفصل بين ديناميكيتين مختلفتين للاستطارة، كل ديناميكية تمثل نوع محدد من عمليات تبادل الشحنة للنظام ككل.

لقد ذكرنا فيما سبق إننا لم نجد في أدبيات الموضوع بحثاً تحسب عدد الفونونات بَعْدَ دالة للطاقة الابتدائية للذرة المستطيرة لغرض المقارنة. ولغرض التأكد من صحة العدد المحسوب على وفق الأنموذج الحسابي المستخدم تم حساب أكبر عدد يمكن أن يتولد من الفونونات دالة لطاقة الذرة المستطيرة الابتدائية على وفق العلاقة (50). إذ أن المقدار  $Ae^{-2a'z(0)}$  (المحسوب عند  $t=0$ ) يمثل أكبر فرق بالطاقة المنتقلة

بين الذرة المستطيرة والذرة الملتصقة المتمثلة بالمتذبذب التوافقي الكمي ذي الطاقة  $h\omega$ . أكد الجدول (2) أن حساباتنا لم تتجاوز أعلى حد لعدد الفونونات ولكل قيم الطاقة الابتدائية المقابلة.

وأخيراً إن لموضوع دراسة تأثير اقتران إلكترون-فونون على عملية تبادل الشحنة والطاقة في استنارة ذرة - ذرة ملتصقة/ سطح أهمية كبيرة على الصعيدين العملي والنظري وأن الموضوع ما زال بحاجة إلى الكثير من الدراسات النظرية الموسعة والمبنية على أسس الميكانيك الكمي لوصف وتفسير التجارب العملية المتطورة وبشكل مستمر.

### 7- المصادر:

- 1- Mustapha A.Setar A.Jebar, MSC . Thesis , University of Thi Qar, Collage of Sciences , Thi Qar , Iraq , (2009) (and references there in).
- 2-D . C . Jacobs , Annual Review of physical Chemistry 53 , 379,(2002).
- 3-J . M . AL-Mukh , Ph . D .Thesis , University of Basrah, Coollege of science , Department , Basrah , Iraq , (1997).
- 4-R . J . W . E . Lahaye and H . Kang , physical Review B . 67 , 033401 , (2003).
- 5-S .Wethkam and H . Winter physical Review Letters , PRL 96 , 207601 , (2006).
- 6- S . R . Kasi , H . Kang , C . S . Sass , and J . W. Rabalais , Surface Science Reports 10 . 1,(1989).
- 7- P. Zeppenfeld , M . Bu`chel , R . David , G . Comsa , C . Ramseyer, and C . G . radet,phys . Rev . B 50 , 14667 , (1994).
- 8- H .winter , frogress in surface science 63 , 177-247,( 2000).
- 9- R .A . Baragiola , in "Low Energy Ion-Surface interactions " edited by J .W. Rabalais (Wiley , New York , (1994).Chapter4.
- 10- E.G. Over bosch , B , Rasser , A . D . Tenner and J . Los , Surf . Sci . 92 , 310, (1980).
- 11- R . Brako and D . M . Newns , Surf . Sci . 108,253,(1981).
- 12- B . J . Garrison , A .C .Diebold , J . H Lin and Z . Sroubek , surf , Sci . 124,461,(1983)
- 13- Z . Sroubek , in :Inelastic particle – Surface collisions , Eds .E .Taglauer and W . Heiland, Vol. 17 of springer series in Chemical physics (springer , Berlin)P.277, (1981).
- 14- R . E . Walkup and P . Avouris , Phys . Rev . B 395504(1989).
- 15- M . Tsukada , N . Shima and S . Tsuneyuki , Prog . Surf . Sci . 26,47,(1987).
- 16- W. Bloss and D. Hone , Surf . Sci . 72 , 277,(1978).
- 17- A . Modinos , prog . Surf . Sci . 26 ,19,(1987).
- 18- A .T. Amos , K .W.Sulston and S .G . Davision , Adv . Chem. Phys .76 , 335,(1989).
- 19- D.M . Newns , Commets Condensed . Matter . Phys .
- 20- Kenneth W . Sulston and Sydney G . Davison . Surf . Sci 261, 335-341,(1992).
- 21- M .Tsukada , J . Phys . Soc . Jpn . 51, 2927,(1982).
- 22- M .Tsukada , N . Shima and S .Tsuneyuki , Prog . Surf . Sci .26, 47,(1987)
- 23- J .W . Gadzuk , J . Electron Spectrosc. Relat . Phenom .54/55, 201,(1990).
- 24- D.M . Newns , Surf . Sci .171 , 600,(1986).
- 25- M . Kato , D . J . O . Connor , K . Yamamoto and R . Souda , Surface science , 363 , 150 (1996) .
- 26- A . B . Mahmood , MSC . Thesis , College of Scince , University of Basrah , Basrah , Iraq . (and references there in) (1999) .
- 27- A . S . Davydov, Quantum Mechanics Second Russia Edition Published by nauka,Moscow, (1973).
- 28-Amnon Yariv , “An Introduction to Theor andApplications of Quantum Mechanics”,Copyright by JohnWiley and Sons,(1982).
- 29- W . L . Clinton and Sepra pal , Surf . Sci . 226 , 89-92 ,( 1990).
- 30- F . O . Goodman , J . Phys . Chem . Solids 24 , 1451,(1963).
- 31- S .C . Ying , in: Theory of Chemisorption , Ed . J . R . Smith (Springer , Berlin) P , 17, (1980).
- 32- R . E . Olson , F . T . Smith and E .Bauer , Appl . Opt . 10, 1848,(1971).
- 33- Thikra S . Dh . Al-Naser , M.Sc . Thesis , Department of physics , University of Basrah , Basrah Iraq ,( 2003).
- 34- W . A . Harrison , Electronic Structure and the properties of Solids (Dover , New York) , (1989).

**Abstract:**

The adsorption of atoms on the surface and its effect on the charge transfer process in the hyper – thermal energies regime, is one of the most important subject in surface physics especially in studying the effect of electron – phonon coupling. And to study this effect due to the recoil of the adatom through out the scattering of atom from surface covered with low coverage , Anderson Hamiltonian is used which incorporates the interaction of the scattering atom with the adatom and the interaction of the adatom with the surface atoms.

Since the atom is scattered from the adatom and the charge transfer happens through out resonance and quasi-resonance charge transfer. The Hamiltonian incorporates also the electron-phonon coupling interaction .The system of equations for scattered atom-adatom/ surface is treated using the wide band approximation. The system of equations are solved numerically using six-order Runge-Kutta method with the accuracy is checked at each time. The treatment is applied to real system, that is Li-K/W, since the ionization probability of the scattered atom , the occupation number of the adatom and the number of phonons on the adatom are calculated as function of all the variables that related to the treatment such as the initial energy of the scattered atom . The effects of the adatom-adatom interaction when the adatom are identical or not are investigated. In addition, it is found that the ionization process is enhanced when the adatoms are not identical. The ionization probability and the number of phonons are calculated as a function of coupling strengths variation. The maximum number of phonons, that generated due to recoil, is calculated as a function of the initial energy of the scattered atom and it is found that our calculations are within.