الملخص

في عملنا هذا ، تمت دراسة تأثير كوندو لأنظمة ذرات الكوبلت المغناطيسية الملتصقة على سطوح المعادن النبيلة باستخدام أنموذج اندرسون (كأساس لبناء أنموذجنا الحسابي) الذي يعد الأنموذج الأفضل لدراسة مسألة كوندو، وذلك لإمكانيته في وصف ديناميكية أنظمة كوندو وصفا فيزيائيا دقيقا من خلال التغايرات بالشحنة والبرم على الذرة الملتصقة بالإضافة إلى تحديد عزم مغناطيسي متموضع على الذرة الملتصقة مثلما سيتضح من دراستنا .

لقد تم بناء أنموذج حسابي موسع لمدى درجات حرارة السطح الواطئة والعالية وذلك لغرض إعطاء وصف دقيق لسلوك أنظمة كوندو عند انخفاض درجات الحرارة ولغاية ، بمعنى أن أنموذجنا لا يصح لمدى درجات الحرارة والتي تؤخذ بالحسبان في دراسة مسألة كوندو وليس تأثير كوندو . حيث تمت الاستفادة من خاصية دالة فيرمي في تغيرها مع الطاقة وعند أي درجة حرارة لحل التكاملات على الطاقة في صيغتي أعداد الأشغال وطاقة الالتصاق الكيميائي حيث استخدم تمديد تيلر لغرض الحصول على صيغة لدالة فيرمي بهيئة متعددة حدود بسيطة ومتقاربة لمدى الطاقة الواطئة . الأمر الذي سهل ايجاد صيغ تحليلية واضحة لأعداد الأشغال وطاقة الالتصاق الكيميائي كدالة للمسافة العمودية بين الذرة الملتصقة والسطح و لدرجة حرارة السطح كذلك . إن ما سبق مهد لاستخدام صيغة كثافة الحالات حول الذرة الملتصقة الخاصة بدرجات الحرارة الواطئة والطاقة الواطئة ومن ثم وضع أنموذج حسابي موسع خاص بدرجات الحرارة الواطئة .

لقد أخذت تأثيرات الاقتران (أو شدة التنغيل) ، و علاقة التبادل التي تحدد بمواقع المستويات الذرية للذرة الملتصقة بالنسبة لمستوي فيرمي كذلك وأخذت تأثيرات الحجب والإزاحة الصورية في صيغة طاقة المستويات الذرية للذرة الملتصقة كذلك . وللتأكد من المظاهر العامة المعروفة لعملية الالتصاق الكيميائي تم حساب أعداد الأشغال وكل دوال الالتصاق الكيميائي المتعلقة و طاقة الالتصاق الكيميائي كذلك كدالة للمسافة العمودية عن السطح ولدرجات حرارة محددة للنظام(Co/Cu(100) .

تضمنت حساباتنا ثلاث خطوات رئيسية متتابعة . كانت الأولى حساب كل الدوال التي تساعدنا في معرفة وصف ديناميكية تأثير كوندو كدالة لدرجة الحرارة وعند سطح Cu(100)، حيث يحدث تأثير كوندو لهذا النظام . كما وظفت هذه النتائج لحساب الخواص الماكروسكوبية للنظام كالسعة الحرارية ،المقاومة النوعية ، التأثرية المغناطيسية للبرم والشحنة على الذرة الملتصقة، و الخواص المايكروسكوبية المتضمنة حساب درجة حرارة كوندو وكثافة الحالات على الذرة الملتصقة عند درجة حرارة كوندو بالإضافة إلى حساب تيار النفق التفاضلي . كل الخطوات الحسابية الثلاثة أعطت نتائج مشجعة إذ أعطت تطابق نوعي جيد بالمقارنة مع الحسابات النظرية والتجارب العملية المتوافرة التي أجريت للنظام نفسه أو لأنظمة مماثلة .

Abstract

In our work , Kondo effect for the magnetic cobalt atoms adsorbed on nobel metal surfaces is studied using Anderson model (as a basis to construct our model calculation) , which is considerd as the best to study Kondo effect for its ability in describing the dynamic of Kondo effect physically and accuratly through out the charge and spin on the adatom , as well as the determination of the localized magntic moment existence on the adatom as it will be abvious in

our study .

An extended and clear model calculation for high and low renges of temperature to give accurate deacription for the Kondo system behaviour as the temperature is decreased up to . This means that our model breaks down for the range of temperture which is considered in Kondo problem studing and not in Kondo effect . we get use of fermi function property in its change with energy at any temperature to solve the integrations on energy in the occupation numbers and chemisorption energy formulas . Since Tayler expansionis used to get simple and convergent polynomial for Fermi Function for low energy range . This makes it easy for us to get an abvious analytical formula for the occupation numbres and the chemisorption energy as a function of the normal distance between the adatom and the surface and as afunction of surface temperature . This makes it also easy for us to use the density of states around the adatome (which suitable for low energy and temperautre) and then to construct extended model calculation for the low range of temperautre .

The coupling effect (or hybirdization strength) and the correlation effect which are determind by the adatome atomic energy levels positioin with respect to Fermi level .

The screeing effects and the image shift are taken into account in the adatome atomic energy levels formula . And to check the well known general features of the chemisorption process the occupation numberes and all the related chemisorption functions as well as the chemisorption energy are calculated as afunction of normal distance frome the surface for certain tempertures for the system Co/Cu(100) .

Our calculations consist of three principle sequnced steps . The first is the calculation of all the function that help us to describe the dynamic of kondo effect as a function of temperature at Cu(100) surface ، where Kondo effect is happened for this system . these resulte are dedicated to calculate the system macroscopic properties such as specific heat , resistivity and spin and charge magntic susceptiblity on the adatom . the system microscopic properties are also calculated , there are Kondo temperature , Kondo resosnace , the density of states on the adatom at Kondo temperature and the differerntial tunneling current . The three steps of calculations give motivaated results since these good concidence if qualitatirvely compared with the available theoretical calculations and experimental measurments that done for the same system to similar systems .