الملخص

تضمنت هذه الرسالة دراسة نظرية لإيضاح دور الحالات الصورية في عملية تبادل الشحنة بين الذرة وسطح المعدن وقد استخدمت لهذا الغرض الذرات القلوية (Li,Na,K) للحالات الأرضية و الحالات المتهيجة (2s,3s,4s,5s) والسطوح المعدنية للفضة Ag(111) والنحاس Cu(111) . وتم تقسيم هذه الدراسة إلى جزئيين رئيسيين :

تناول الجزء الأول دور الحالات الصورية في تبادل الشحنة أثناء تموضع الذرات القلوية على سطحي الفضة Ag(111) والنحاس Cu(111) , وفي هذا الجزء من الدراسة تم حساب والتحقق من الإزاحة الكمية $\Lambda(E)$ ونصف عرض $\Delta(E)$ المستوي الذري للذرات القلوية ومقارنته بوجود وعدم وجود الحالة الصورية , حيث وجد أن تأثير الحالات الصورية على إزاحة ونصف عرض المستوي يعتمد كليا على موقع المستوي الذري المأخوذ بنظر الاعتبار عند سطح معين فكلما كان موقع المستوي أعلى أصبحت قيم $\Lambda(E)$ و $\Delta(E)$ أكثر انخفاضا وأيضا تكون هذه القيم معتمدة على عمق قعر حزمة التوصيل ً. كما تم حساب كثافة الحالات الالكترونية $\rho(E)$ لمستوي الطاقة الذري كدالة للطاقة E وبيان تأثير وجود الحالات الصورية عليها , حيث أوضحت ان تأثير الحالات الصورية على كثافة الحالات للذرات القلوية يظهر على شكل تراكيب إضافية في منحني كثافة الحالات الالكترونية وان هذا التأثير يكون كبير جدا وواضح على الحالات الذرية المتهيجة مثل Li3s و Li4s إذا ماقورنت بالحالة الأرضية الذرية Li2s , وكذلك لوحظ أن تأثيرات الحالة الصورية يختلف من معدن إلى آخر اعتماداً على عمق حزمة طاقة المعدن .

أما الجزء الثاني من هذه الدراسة فقد تناول دور الحالات الصورية على عملية انتقال الشحنة أثناء استطارة الذرات القلوية من سطحي الفضة والنحاس , حيث تم حساب احتمالية التأين الموجب P^+ للمستوي الذري للذرة القلوية باستخدام طريقتين: في الأولى استخدم الهاملتونين بصيغة التكميم الثاني للباحثين Anderson و Newns وفي الثانية التي تشمل تفاعل $n+1$ من المستويات والتي فيها كتب المؤثر الهاملتوني بصيغة رموز ديراك والتي أخذنا بنظر الاعتبار أزمان الحياة للمستويات الذرية ومستويات الصورة إن احتمالية التأين الموجب $P^+(t)$ للمستوي الذري فحصت كدالة لزمن الاستطارة كما تم فحص الاحتمالية النهائية $P^+(\infty)$ كدالة لمقلوب السرعة , ولوحظ أن تأثير الحالة الصورية يظهر على شكل تذبذبات في منحني $P^+(t)$ وفي منحني $P^+(\infty)$ وان سعة هذه التذبذبات تختلف باختلاف حالة الذرة القلوية فتزداد بازدياد طاقة المستوي الذري , ولوحظ أيضا إن تأثير الحالات الصورية باستخدام الطريقة الأولى (التكميم الثاني) أكثر منه عند استخدام الطريقة الثانية (رموز ديراك) وذلك لدور زمن الحياة للحالة الصورية

Abstract

This thesis included a theoretical study for investigation the role of Image states in the charge exchange process between atom and metal surface . We have used for this purpose the alkali atoms (Li,Na,K) in its ground and excited states (2s,3s,4s,5s) . The study is divided into two principle parts :

The first parts includes the role of image states in charge exchange between alkali atoms and Ag and Cu surfaces , where we calculated and investigated the shift $\Lambda(E)$ and the half width $\Delta(E)$ for the atomic level of alkali atoms with and without the presence of the image states and then comparing the results by using suggested potential well of both atom and metal . We find that the effect of image states on the shift and the half width of the atomic level totally depends on the energy position of atomic level which have been taken into account and the specific surface , when the level position be higher then the $\Lambda(E)$ and $\Delta(E)$ become less . Also we have calculated the

density of states as function of energy E where the effect of the presence of image states appear as additional structures in the density of states curve . This effect is very large and more effective on excited atomic states like Li2s,Li4s when comparing with ground atomic states Li2s . Also we note that the effects of image states presence is differ from metal to other depending on the depth bottom the metal energy band .

The second part of this study explains the role of image states on charge exchange during scattering of alkali atoms from Ag and Cu surfaces , there we calculate the positive ionization probability P^+ of atomic level of the alkali atoms by using two methods .The first method uses the Hamiltonian written in second quantization form given by Andersn and Newns , and in the second method which includs ($n+1$) interaction levels , where the Hamiltonian operator written by Dirac-notations formula , and taking into account both the life times for atomic levels and image levels

The positive ionization probability P^+ of atomic level and final probability $P^+(\infty)$ are drawn as function to scattering time and the inverse velocity . We note that the effect of image states appear as an oscillations at high velocities in $P^+(\infty)$ curve . The amplitude of this oscillations differ for different alkali atom state , where it increase as the energy of the atomic level increasing . Also , we note that the effect of image state by using the first method (second quantization) in more than from using the second method Dirac notations) because it is include the life times of image states .