الملخص

لأهمية موضوع التصاق الذرات أو الأيونات على سطوح الصلب (في الأبعاد المايكروية والنانوية) تم في هذا العمل دراسة تأثير الألتصاق على عملية تبادل الشحنة من أستطارة ذرة (ايون) – سطح معدن. لقد اعتمدنا إنموذجاً بسيطاً لوصف عملية تبادل الشحنة الرنيني بين سطح المعدن وذرة مرتطمة به وبوجود ذرة ملتصقة عليه .

لقد حسب عدد أشغال المستوي الذري للذرة المستطيرة والذرة الملتصقة باستخدام إنموذج – Anderson Newns المعتمد على الزمن ومسلك مؤثر زمن – نمو . تم بالتفصيل أشتقاق معادلات الحركة الخاصة بعناصر مصفوفة مؤثر زمن – نمو $U_{aa}(t,t_\circ)$ و $U_{da}(t,t_\circ)$ و $U_{ak}(t,t_\circ)$ و $U_{dk}(t,t_\circ)$. فضلاً عن ذلك اشتقت عناصر مصفوفة مؤثر زمن – نمو $U_{ad}(t,t_\circ)$ و $U_{dd}(t,t_\circ)$. تمت معالجة نظام معادلات الحركة بأستخدام تقريب الحزمة العريضة لغرض تبسيطها ومن ثم تم حلها بأستخدام طريقة رانج كوتا العددية ومن الدرجة السادسة وبنسبة خطأ 10^{-9} . حسبت أعداد الأشغال للجسيم المستطير والذرة الملتصقة كدالة للزمن ولكل المعاملات المهمة كسرعة الجسيم المستطير وتموضع مستوي الطاقة الذري للذرة المستطيرة بالنسبة لمستوي فيرمي وقوى الأقتران بين أجزاء النظام قيد الدراسة إذ تم التأكد من مظاهر الأستطارة العامة المعروفة .

إن الهدف الأساس من هذا العمل هو دراسة تأثير المسافة بين موقع ألتصاق الذرة الملتصقة وموقع استطارة الجسيم المستطير عن السطح على عملية تبادل الشحنة باستخدام إنموذج Anderson – Newns المعتمد على الزمن (والمتضمن هذه المسافة) ومسلك مؤثر زمن – نمو . حيث اشتق نظام معادلات الحركة الخاصة بهذه الحالة وحلت بالأسلوب السابق نفسه . حسبت أعداد الأشغال كدالة للمسافة بين منطقة التصادم وموقع ألتصاق الذرة الملتصقة. ووجد أن عدد الأشغال $n_a(\infty)$ يتذبذب مع تغير المسافة بين موقع الأستطارة وموقع ألتصاق الذرة الملتصقة وذلك بسبب التفاعل غير المباشر بين الذرة المستطيرة والملتصقة من خلال السطح بسبب أقترانها مع ذرات السطح . وأن سعة ودورة هذه التذبذبات تحدد بظروف الأستطارة بمعنى تموضعات E_a وسرعة الذرة المستطيرة وقوى الأقتران وعرض الحزمة وكذلك حالة شحنة الذرة المستطيرة والملتصقة عند الزمن الابتدائي لعملية الاستطارة . أذ وجد إن $n_a(\infty,R_d=0)$ يكون أكبر من $n_a(\infty,R_d)0)$ لكل التموضعات باستثناء الحالة التي يقع فيها E_a أعلى مستوي فيرمي , بينما يصح العكس حينما يكون المستوي الذري للذرة الملتصقة فارغاً عند الزمن الأبتدائي لعملية الأستطارة كما تأكد لنا أن حد البناء لايعتمد على المسافة R_d حينما يكون مستوي الطاقة الذري للذرة الملتصقة فارغاً عند الزمن الابتدائي للاستطارة بغض النظر عن حالة شحنة مستوي الطاقة الذري للذرة المستطيرة عند الزمن الابتدائي.

Abstract

For the importance of the adsorption of atoms or ions on solid surface, the effect of adsorption on the charge exchange process in the atom (ion) – surface scattering is studied in this work . Simple model is considered to describe the resonance charge exchange process between metal surface and a colliding atom in the presence of adatom on it. The occupation numbers of the scattering atom and the adatom are calculated within time dependent Anderson – Newns model and time – evolution operator approach . The derivation of the equations of motion for the time – evolution operator matrix elements $U_{aa}(t,t_\circ),U_{da}(t,t_\circ),U_{ak}(t,t_\circ)$ and $U_{dk}(t,t_\circ)$ are explained extendedly . we also derive the time – evolution operator matrix elements $U_{dd}(t,t_\circ)$ and $U_{ad}(t,t_\circ)$. The system of the equations of motion

is treated (to be more simple) by using wide band approximation then they are solved using six order Runge – Kutta numerical method with percentage error 10^{-9} . The occupation numbers of the scattered atom and the adsorbed one are calculated as a function of time and for all the important parameters such as the velocity of the scattered particle, the atomic energy level of the scattered atom Localization in relation to E_F and the coupling strengths between all the system parts under consideration , since the well – known general features of scattering are all checked.

The main purpose from this work is to study the effect of the distance, between the adsorption position of the adatom and the position on the surface at which the particle is scattered off the surface , on charge exchange process within time – dependent Anderson – Newns model (that concered this distance) and the time – evolution operator approach . The equations of motion related to this case are derived and treated by using the same approach . The occupation numbers are calculated as a function of adsorption position – Collision region distance . It is found that the occupation number $n_a(\infty)$ oscillates with distance changes due to the indirect interaction between the scattered and adsorbed atoms throughout surface because of their coupling with the surface atoms . The amplitude and the period of these oscillations are determind by the scattering conditions , i.e, the E_a localizations , the scattered atom velocity , the coupling strengths , the band width and the charge states of scattered and adsorbed atoms at the initial time of the scattering process . It is found that $n_a(\infty, R_d = 0)$ is greater than $n_a(\infty, R_d)0)$ for all localization except for the case that $E_a)E_F$, While the opposite is also correct When the atomic energy level of the adatom is empty at the initial time of the scattering process also, It becomes we that the building up term does not depend on the distance R_d when the atomic energy level of the adatom is empty at the initial time of the scattering process regandless of the charge state of the atomic energy level of the scattered atom at the initial time .