

## الالتصاق الكيميائي لذرة الهيدروجين على سطح صلب وتأثير مجال مغناطيسي خارجي

جنان مجيد المخ و رسل داود سالم الخفاجي

قسم الفيزياء – كلية التربية – جامعة البصرة

ISSN -1817 -2695

الاستلام 2009/6/28، القبول 20011/5/29

### الملخص :

تضمن بحثنا دراسة الالتصاق الكيميائي لذرة الهيدروجين على سطح التتستن . ولدراستنا هدفان أساسيان ، يهدف الأول إلى دراسة تأثير اعتماد حد الاقتران على أشغال المستوى الذري خلال عملية الالتصاق الكيميائي . أما الثاني فيتضمن دراسة عملية الالتصاق للنظام نفسه بوجود مجال مغناطيسي خارجي . ولهذا الغرض تم تقديم نموذج حسابي مفصل لحساب أعداد الأشغال للمستويات الذرية لذرة الهيدروجين وكل دوال الالتصاق الكيميائي المتعلقة . علما بأنه تم اخذ تأثيرات التبادل والتأثيرات الصورية بنظر الاعتبار . كذلك حددت وحسبت الحالات المتموضعة وأعداد أشغالها التي تم أخذها بالحسبان عند حساب طاقة الالتصاق الكيميائي .ومن خلال حساباتنا تم فحص المظاهر العامة للنظام قيد الدراسة مستخدمين شروطا ابتدائية فيزيائية مستقيمين من اعتماد حد الاقتران على أعداد الأشغال للمستويات الذرية . واتضح من الحسابات ظهور نوعين من الحلول بحيث يمكن أن نميز منه مديين لقيم قوة الاقتران . يتضمن المدى الأول الاقتران الضعيف حيث تكون الحلول مغناطيسية ولا تظهر فيها الحالات المتموضعة . أما المدى الثاني فيتضمن الاقتران القوي حيث تكون الحلول غير مغناطيسية وتظهر فيها الحالات المتموضعة . وفيما يخص الهدف الثاني درست عملية الالتصاق الكيميائي للنظام قيد الدراسة بوجود مجال مغناطيسي خارجي . إذ أضيف تأثير المجال الخارجي كإزاحة للمستويات الذرية بقيم محددة و حسبت أعداد الأشغال للمستويات الذرية وكل دوال الالتصاق الكيميائي المتعلقة والحالات المتموضعة والطاقة بوجود المجال الخارجي ولمديات الاقتران الثلاث .قدمت مناقشة واستنتاجات مهمه حول قوة الاقتران وعلاقته بعرض حزمة الطاقة للمعدن وشرط ظهور الحالات المتموضعة والتأثيرات الصورية والتبادل .

**الكلمات المفتاحية:** الالتصاق الكيميائي ،تقريب معدل -مجال ، نموذج اندرسون ،مجال مغناطيسي ،حالات متموضعة

## 1- المقدمة Introduction

للذرة المتصقة (adatom) والسطح وذلك بالاعتماد على نموذج

في هذا البحث، سنستعرض المعالجة النظرية التي تتضمن دراسة تأثير أشغال الاوربيتال الذري للذرة المتصقة على تهجين (hybridization) الدوال الموجية الإلكترونية [1] Newns – Anderson (NA).

تفاعل ذرة هي دروجين مفردة في حالتها الأرضية 1S مع سطح معدن من العناصر الانتقالية [2].

الاعتبار، يمكن كتابة الهاملتونين الخاص بتفاعل ذرة متصقة مع سطح بالصيغة الآتية [2,3,4]:

بالاعتماد على نموذج (NA) وبأخذ اعتماد حد الاقتران على أشغال المستوي الذري للذرة المتصقة بنظر

$$H = \sum_{k,\sigma} E_k n_k^\sigma + \sum_{\sigma} E_a^\sigma n_a^\sigma + U n_a^\sigma n_a^{-\sigma} - \sum_{k,\sigma} [(v_{ak} n_a^{-\sigma} - V_{ak}) C_{a\sigma}^\dagger C_{ka} + h.c.] + H' \quad \dots (I)$$

وتمثل الدالة U تفاعل تنافر كولوم للذرة المتصقة Coulomb Repulsion intra-atomic ويكون للذرة المعزولة مساوياً إلى :

$$U = V_i - V_A \quad \dots (2)$$

حيث  $V_i$  و  $V_A$  يمثلان مستوي التآين ومستوي الألفة مؤثرات الخلق والهدم للمستوي i ( $i = a, k$ ) بينما يربط الحد الرابع (والذي يسمى حد المنح (hopping term) الذرة المتصقة و سطح المعدن وذلك بسبب مشاركة الالكترونات فيما بينها. وبمقارنة الهاملتونين في العلاقة (1) بهاملتوني (NA) والذي يعطى بعلاقة:

للذرة المتصقة على التوالي. ويمثل  $V_{ak}$  عنصر مصفوفة التفاعل للمستويات الذرية للذرة المتصقة  $|a\rangle$  مع مستويات  $|k\rangle$  في حزمة المعدن. ويمثلان  $n_a^\sigma$  و  $n_a^{-\sigma}$  إعداد الأشغال Occupation numbers للمستويين الذريين (مستوي التآين ومستوي الألفة على التوالي)، بينما يمثل  $n_k^\sigma$  اعداد اشغال المستويات k للمعدن  $C_{ka}^\dagger$  و  $C_{ka}$  هما

$$H = \sum_{k,\sigma} E_k n_k^\sigma + \sum_{\sigma} E_a^\sigma n_a^\sigma + U n_a^\sigma n_a^{-\sigma} + \sum_{k,\sigma} [V_{ak} C_{a\sigma}^\dagger C_{k\sigma} + h.c.] - \sum_{k,\sigma} [v_{ak} n_a^{-\sigma} C_{a\sigma}^\dagger C_{ka} + h.c.] \quad \dots (3)$$

يتضح ان الحد الإضافي هو

وهو يصف تأثير أشغال المستويات الذرية للذرة المتصقة على تهجين المستويات الإلكترونية. ويعطى عنصر المصفوفة  $v_{ak}$  [5] بما يلي

$$v_{ak} = V_{ak} - \int d\bar{x} \phi_a^*(\bar{x}) \phi_k(\bar{x}) \left(1 + \frac{|\bar{R}_a - \bar{x}|}{b}\right) \times \exp[-2 \frac{|\bar{R}_a - \bar{x}|}{b}] V(\bar{R}_a - \bar{x}) \quad \dots (4)$$





وتحدد الكمية  $V_{ak}^{\sigma}$  الشحنة المنقلة بين الذرة  
الملتصقة والسطح وهي تعتمد على أشغال الاوربييتال الذري  
للذرة الملتصقة. ويعطى المستوي الذري للذرة الملتصقة  
(للبرم  $\sigma$ ) بالعلاقة التالية [11]:-

$$E_a^{\sigma} = E_a + \Delta E + Un_a^{-\sigma} - \alpha \sum_k (V_{ak} \langle C_{a-\sigma}^{\dagger} C_{k-\sigma} \rangle) + h.c \quad \dots(9)$$

ويمثل  $\Delta E$  الإزاحة الصورية التي تأخذ تأثير الجهد الصوري الستاتيكي بنظر الاعتبار. أما  $W$  [11] فيعطى بما يلي :-

$$W = -Un_a^{\sigma} n_a^{-\sigma} + \alpha \sum_{k,\sigma} (V_{ak} n_a^{-\sigma} \langle C_{a\sigma}^{\dagger} C_{k\sigma} \rangle) + h.c \quad \dots(10)$$

وباستخدام تقنية دالة كرين **Green function technique** واخذ درجة حرارة السطح بنظر الاعتبار يمكن  
حساب عدد الأشغال للمستوي الذري للبرم  $\sigma$  من العلاقة  
التالية [13] :-

$$n_a^{\sigma} = \int_{u_0}^{\phi} f(E, T) \rho_a^{\sigma}(E) dE \quad \dots(11)$$

حيث أن  $f(E, T)$  تمثل دالة فيرمي :-

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

$T$  درجة حرارة السطح ،  $k_B$  ثابت بولتزمان . وان  $u_0$  و  $\phi$   
يمثلان قعر الحزمة ودالة الشغل للمعدن على التوالي .  
أما كثافة الحالات على الذرة الملتصقة  $\rho_a^{\sigma}(E)$  فتعطى  
بالعلاقة التالية [1]:-

$$\rho_a^{\sigma}(E) = \frac{1}{\pi} \frac{\Delta^{\sigma}(E)}{[E - E_a^{\sigma} - \Lambda^{\sigma}(E)]^2 + [\Delta^{\sigma}(E)]^2} \quad \dots(12)$$

أما دوال الالتصاق الكيميائي ( التعريض في المستوي الذري  $\Delta^{\sigma}(E)$  والإزاحة الكمية  $\Lambda^{\sigma}(E)$ ) فتعطى بما  
يلي [12] :-

$$\Delta^{\sigma}(E) = (1 - \alpha n_a^{-\sigma})^2 \sum_k |V_{ak}|^2 \delta(E - E_k) \quad \dots(13)$$

وكذلك

$$\Lambda^{\sigma}(E) = \frac{1}{\pi} P \int dE' \frac{\Delta^{\sigma}(E')}{E - E'} \quad \dots(14)$$

وقيل تحديد الصيغة النهائية لطاقة المستوي الذري للذرة الملتصقة  $E_a^{\sigma}$  كان لا بد من الرجوع الى المعادلة (10) واعادة  
كتابتها بالهيئة الآتية

$$W = -Un_a^{\sigma} n_a^{-\sigma} + \sum_{\sigma} n_a^{-\sigma} \lambda^{\sigma} \quad \dots(15)$$

واعتمادا على العلاقة (11) فان صيغة  $\lambda^{\sigma}$  تصبح:-

$$\lambda^\sigma = \frac{2\alpha}{1 - \alpha n_a^{-\sigma}} \left[ \int_{u_0}^{\phi} E \rho_a^\sigma(E) f(E, T) dE - E_a^\sigma n_a^\sigma \right] \quad \dots(16)$$

ويمكن تعريف  $\lambda^\sigma$  على أنها الطاقة التي تعدل صيغة  $E_a^\sigma$  عند اعتماد حد الاقتران على أشغال المستوي الذري للذرة الملتصقة.

### 3 - الحالات المتموضعة The localized states :

حسبت الحالات السطحية الخيالية Virtual surface states التي تقع ضمن مستويات الحزمة (المملوءة أو الفارغة أي تقع بين قعر الحزمة  $-2\beta$  وقمة الحزمة  $2\beta$  علماً أن مستوي فيرمي يقع عند  $E=0$ ) ووفقاً للعلاقة التالية [2] :-

إنّ الحالات السطحية surface states [13] تنشأ بسبب تعرض السطح لاضطراب معين، كأن يكون وجود ذرات ملتصقة على السطح. ومن المعروف أن هذه الحالة كانت قد تمت دراستها من خلال نظرية الالتصاق الكيميائي [14] كما وتمت دراسة تأثير ذلك على احتمالية انتقال الشحنة من قبل Amos وآخرين [14-17].

$$E = \frac{E_a^\sigma(1 - A^\sigma) \pm i A^\sigma \sqrt{4\beta^2(1 - 2A^\sigma) - E_a^{\sigma 2}}}{1 - 2A^\sigma} \quad \dots(17)$$

أما الحالات السطحية المتموضعة localized surface states التي تقع خارج حزمة الطاقة للمعدن اسفل قعر حزمة الطاقة واعلى قمة حزمة الطاقة فهي تعطى بما يلي [2] :-

$$E_t^\sigma = \frac{E_a^\sigma(1 - A^\sigma) \pm A^\sigma \sqrt{E_a^{\sigma 2} - 4\beta^2(1 - 2A^\sigma)}}{1 - 2A^\sigma} \quad \dots(18)$$

ويمكن إيجاد عدد أشغال الحالات المتموضعة من العلاقة الآتية [2] :-

$$n_t^{\mp\sigma} = \frac{1}{1 - A^\sigma \pm A^\sigma \frac{\omega_t^{\mp\sigma}}{\sqrt{(\omega_t^{\mp\sigma})^2 - 1}}} \quad \dots(19)$$

حيث أن

$$\omega_t^\sigma = \frac{E_t^\sigma}{2\beta}, \quad A^\sigma = \frac{V_0^2}{2\beta^2} \left( 1 - \alpha n_a^{-\sigma} \right)^2$$

### 4 - طاقة الالتصاق الكيميائي The Chemisorption Energy

إشغال المستوي الذري في حساب طاقة الالتصاق الكيميائي نحصل على [2]

ان قيم  $E_t^\sigma$  تهمل عندما تكون الحالات المتموضعة فارغة وتؤخذ بنظر الاعتبار عندما تكون ممتلئة. وبإدخال تأثير درجة حرارة السطح وكذلك اعتماد حد الاقتران على

$$E_{ch} = \sum_{\sigma} n_t^\sigma E_t^\sigma + \sum_{\sigma} \int_{u_0}^{E_F} E \rho_a^\sigma(E) dE - U n_a^\sigma n_a^{-\sigma} - E_a \quad \dots(20)$$

حيث أن

$$\Phi = \Phi_0 - K_B T$$

وان  $\Phi_0$  تمثل دالة الشغل للمعدن بدون اخذ تاثير درجة حرارة السطح بالاعتبار.

## 5 - الحسابات والنتائج

للسطح، فان  $\phi_0 = 4.36 \text{ eV}$  [19] وان  $\beta = 5.0 \text{ eV}$ . وكانت الشروط الابتدائية المتمثلة بأعداد الإشعال والمستويات الذرية المقابلة كالاتي :-

$$n_a^\sigma = 1.0 \quad ; \quad n_a^{-\sigma} = 0.0$$

$$E_a^{\pm\sigma} = (\phi - V_i) + U n_a^{\pm\sigma}$$

...(21)

الطاقة علماً بان التكاملات أجريت من  $2\beta$  إلى  $2\beta$  وان  $\beta = 5.0 \text{ eV}$ .

يوضح الجدول (1) حساباتنا لـ  $\alpha = 0$  ،  $\Delta E_{im} = 0 \text{ eV}$  ،  $T = 300^\circ \text{ K}$  ، وعليه تكون  $\lambda^\sigma = \lambda^{-\sigma} = 0$  مع ملاحظة ان القيم المثبتة في العمود الثاني تمثل أيضاً قوة التفاعل التي تقابل العامل  $\beta$  في المصدر [19]. ويشير العمود السابع الى حالة وجود وعدم وجود حالات متموضعه طبقاً للشروط المحدد بالعلاقة (32) في المصدر [2]. أما العمود الأخير فيمثل قيم طاقة التفاعل المحسوبة لحالة عدم وجود الحالات المتموضعة.

لقد كان الهدف من الدراسة تطبيق نموذجنا الحسابي لدراسة التصاق الهيدروجين على سطح التلكستن (H/W(100)) حيث أن  $V_i = -13.6 \text{ eV}$  و  $V_A = 0.75 \text{ eV}$  [18] وان موقع مستوي فيرمي سيكون عند  $E = 0$ . اما بالنسبة

لغرض الحصول على قيم أعداد الأشغال  $n_a^{\pm\sigma}$  وكل دوال الالتصاق الكيميائي المتعلقة وقيم  $\lambda^{\pm\sigma}$  تم حل المعادلتين (9) و (11) حلاً توافقياً ثم استخدمت هذه النتائج لتحديد نتيجة شرط وجود وعدم وجود الحالات المتموضعة واعداد أشغالها ومستويات الطاقة لها ومن ثم حساب طاقة التفاعل . من الجدير بالذكر أن قيم قوة التفاعل  $V_0$  والعامل  $\alpha$  استخدمت كقيم إدخال (input data) للبرنامج وان القيم الابتدائية (في السطر الاول من العلاقة (21)) تقع خارج الحل التوافقي بمعنى أن القيم الابتدائية تبقى ثابتة مع تغير  $V_0$  والعامل  $\alpha$ . وكذلك تمت متابعة استقرارية الحل العددي مع مراعاة التقطيع في مدى





لذا فإنه من المنطقي أن يكون  $n_a^\sigma = 1.0$  و  $n_a^{-\sigma} = 0.0$  وبالوصول الى حالة التقارب عندما  $\alpha = 1.0$  نكون قد حصلنا على قيم  $n_a^\sigma$  و  $n_a^{-\sigma}$  وكذلك  $E_a^\sigma$  و  $E_a^{-\sigma}$  التي تصح كشرط ابتدائية لـ  $\alpha = 0.9$  ولنفس قيمة  $V_0$  وهكذا.

وعليه تم اعادة الحسابات لقيم  $V_0=0.5, 1.0, 1.5, \dots$  على التوالي كدالة للعامل  $\alpha$  وكما هو موضح في الجداول من (13-3) الى (26-3) في المصدر [2] ولذلك تم اختيار حالتين فقط وهي الحالة التي يكون فيها  $V_0 < \beta$  والحالة  $V_0 > \beta$  التي تم استعراض نتائجها في الجدولين (2) و (3). وبملاحظة هذه الجداول يمكن تثبيت ما يلي :

لم نحصل على الحالات المتموضعة لحالة الاقتران الضعيف بينما تظهر عند الاقتران القوي. ويمكن تحديد الاقتران الضعيف هنا بقيم  $V_0 < 4 \text{ eV}$ . مع ملاحظة أن الإشارة - تعني عدم وجود حالة متموضعة انظر الجدول (2).

وبالرجوع الى المعاملات المهمة في معالجتنا نجد انها عرض الحزمة المملوءة ( المرتبط بـ  $\beta$  ) وقوة الاقتران وكذلك تتناثر كولوم  $U$  على الذرة. ومن المعالجة اتضح لنا ان مستويات الطاقة للذرة الملتصقة اما ان تقع داخل حزمة الطاقة للمعدن او خارجها. وان هذه النتيجة تعتمد على العلاقة بين عرض الحزمة وقوة التفاعل. ففي حالة الاقتران القوي حيث تكون  $V_0 \geq \beta$  وعند تناثر كولوم القوي كما في حالة ذرة الهيدروجين نتوقع ان تظهر الذرة تصرفاً جزيئياً بحيث ان المستويات الالكترونية للنظام ( ذرة ملتصقة - سطح ) يحدث لها فصل الى مجموعتين من الاوربيبتالات الجزيئية احدهما في حالة ترابط bonding والاخرى ضديدة الترابط antibonding واحدة منها اسفل حزمة الطاقة و تقع الأخرى أعلى الحزمة [ 20 ]

ومن الملاحظة الاولية للجدول (1) يمكن تثبيت ما يلي:

1- تكون الحلول عندما  $V_0 < \beta$  حلول مغناطيسية بمعنى ( $n_a^\sigma \neq n_a^{-\sigma}$ ) بينما للحالة  $V_0 > \beta$  تكون الحلول غير مغناطيسية ( $n_a^\sigma = n_a^{-\sigma}$ ) علماً ان التسمية تتعلق بوجود وبعدم وجود محصلة برم ( net spin ).

2- يظهر لمدى قيم  $V_0 > \beta$  ان زيادة  $V_0$  تقلل من أشغال المستويات  $E_a^{\pm\sigma}$ .

3- لا تظهر الحالات المتموضعة عندما  $V_0 < \beta$  بينما تظهر عندما  $V_0 > \beta$ .

4- لحساب طاقات الحالات المتموضعة استخدمنا العلاقة (18) بالإشارتين الموجبة والسالبة وبذلك حصلنا على أربع حالات متموضعة وهي  $E_{I,+}^\sigma$  و  $E_{I,-}^\sigma$  و  $E_{I,+}^{-\sigma}$  و  $E_{I,-}^{-\sigma}$  ( ويقصد بـ  $E_{I,+}^\sigma$  هي الحالة المتموضعة للبرم  $\uparrow$  باستخدام الإشارة الموجبة وهكذا .....). ومن ملاحظة النتائج التي حصلنا عليها اتضح ان الحلول متكررة لقيمة محددة من قيم  $V_0$  التي تظهر فيها الحالات المتموضعة لذا استخدمنا الإشارة + لحساب  $E_{I,+}^\sigma$  والإشارة - لحساب  $E_{I,-}^{-\sigma}$ . ومن الجدير بالذكر أن هذه الملاحظة جاءت مطابقة للبحث [10] وللنظام المستخدم نفسه.

5- إن عرض الحزمة المستخدمة هي 20eV حيث يقع مستوي فيرمي بمنصفها. ومن ملاحظة قيم  $E_{I,\pm}^\sigma$  يتضح أنها تقع بالقرب من حافات الحزمة (من الأعلى والأسفل) وكأنها انفصلت عنها بسبب الاقتران (coupling) بين المستويات الالكترونية للذرة والسطح.

اعتماداً على ما سبق يمكن تسمية قيم  $V_0$  التي لا تظهر فيها حالات متموضعة بحالة اقتران ضعيف weak coupling وقيم  $V_0$  التي تظهر فيها الحالات المتموضعة بحالة اقتران قوي strong coupling .

ولغرض تطوير حساباتنا الى الأفضل ارتأينا تعديل الشروط الابتدائية بحيث تكون شروطاً فيزيائية وكالاتي:

نثبت قيمة  $V_0$  ونغير قيمة  $\alpha$  من 1.0 الى 0.0 باعتبار أن قيم  $\alpha=1$  الكبيرة تعني ان الذرة بعيدة عن السطح

## 6 - الالتصاق الكيميائي وتأثير المجال المغناطيسي الخارجي



الالتصاق [23] التي تتغير من توجيه بلوري Crystallography الى آخر [24, 25] بمعنى ان التباين المغناطيسي يتغير من سطح الى آخر والذي يمكن التحكم به عن طريق عملية الالتصاق الكيميائي للذرات والجزئيات أو العناقيد على السطح. وكمعالجة نظرية لتأثير مجال مغناطيسي خارجي على الالتصاق الكيميائي لذرة على سطح صلب تضاف ازاحات لمواقع المستويات الخيالية  $E_a^{\pm\sigma}$  وكالاتي [2]:

$$E_a^{\sigma} \Rightarrow E_a^{\sigma} - \mu_B H_Z$$

$$E_a^{-\sigma} \Rightarrow E_a^{-\sigma} + \mu_B H_Z$$

اتجاه المجال (antiparallel) الى الأعلى بمقدار  $\mu_B H_Z$ . أما سبق يدعى عادةً بتأثير زيمان Zeeman Effect [26]. أما طاقة الالتصاق الكيميائي بإضافة حد الاقتران بسبب وجود المجال الخارجي  $H_Z$  فأنها تعطى بما يلي [27]:

$$E = E_{ch} - \mu_B M H_Z$$

طاقة الالتصاق الكيميائي محسوبة بوجود المجال الخارجي المؤثر، علماً بان التمغنط  $M$  يعطى بما يلي:

$$M = n_a^{\sigma} - n_a^{-\sigma}$$

على نفس النظام المستخدم لذلك لم نحدد قيم المجال واكتفينا بتحديد قيم الازاحات المغناطيسية المقابلة لها كما في الجدول رقم (4).

لقد تمت دراسة تأثير المجال المغناطيسي على عملية الالتصاق الكيميائي ولقيم  $V_0$  للاقتران الضعيف والمتوسط وللازاحات المغناطيسية التي ذكرت أعلاه. للذرة الملتصقة ولكنه عزز التصاقها وهي ذرة متعادلة على سطح التتستن.

ثانياً: كان تأثير المجال ضئيلاً على كل دوال الالتصاق الكيميائي على الرغم من التغير الواضح في مواقع  $E_a^{\pm\sigma}$  ويعود سبب ذلك لكون  $U$  كبيرة.

ثالثاً: الجدول (4) يوضح قيم حدود طاقة الالتصاق الكيميائي المحسوبة وفقاً للعلاقة (23). إن العلاقة بين

## The Chemisorption and the External Magnetic Field Effect

في الدراسات النظرية لأنظمة الالتصاق الكيميائي يتم دراسة وفحص الصفات المغناطيسية لالتصاق ذرات على سطوح معادن بسيطة حيث يتم حساب العزوم المغناطيسية magnetic moments والمقاومة المحتثة resistivity induced بسبب الذرة الملتصقة [21, 22]. ووجد أن هناك علاقة مهمة بين هذه الصفات وكثافة الشحنة الإلكترونية Local Electric Charge Density عند مواقع

...(22)

بمعنى أن تأثير مجال مغناطيسي خارجي يتلخص بإزاحة المستوي ذي البرم  $\uparrow$  (والذي سنفرض انه مواز parallel) وبنفس اتجاه المجال) الى الأسفل بمقدار  $\mu_B H_Z$  والمستوي ذو البرم  $\downarrow$  (والذي سنفرض انه مواز ولكن بعكس

...(23)

ويمثل  $\mu_B M$  هنا العزم المغناطيسي المتكون بسبب الشحنة الإلكترونية على المستويات الخيالية وان  $E_{ch}$  تمثل

...(24)

## 7- الحسابات والنتائج عند تأثير مجال مغناطيسي خارجي

تم حساب اعداد الاشغال وكل دوال الالتصاق الكيميائي ومن ثم الطاقة كدالة لـ  $V_0$  و  $\alpha$  ولدرجة حرارة  $300 K^{\circ}$  ولقيم المجال المغناطيسي التي تجعل الإزاحة في المستويات الذرية مساوية الى  $0.2 eV, 0.0 eV, 0.4 eV, 0.6 eV, 0.8 eV$ . ومن الجدير بالذكر هنا اننا لم نحصل على نتائج نظرية أو عملية لتأثير مجال مغناطيسي وأتضح من حساباتنا الملخصه في الجدول (4) ما يلي:

أولاً: إن تأثير المجال على مواقع  $E_a^{\pm\sigma}$  بالنسبة لمستوي فيرمي واضح ولكن هذا التغير لم يكن له تأثير ملحوظ على قيم  $n_a^{\pm\sigma}$ ، أن  $n_a^{\sigma}$  تقريباً مملوء و  $n_a^{-\sigma}$  تقريباً فارغ حتى قبل تأثير المجال. لذا لم يغير المجال حالة الشحنة

(4) لم تظهر نهاية صغرى إذ إن لذرة الهيدروجين عزمياً متوضعاً حتى قبل تأثير المجال المغناطيسي الخارجي . هذه الملاحظات يمكن الحصول عليها لو طبق النموذج الحسابي للاتصاق الكيميائي للذرات القلوية على سطوح المعادن . الإزاحة المغناطيسية وكل الطاقات في الجدول واضحة جداً . وإذا كانت قيم  $E_{ch}$  تمتلك نهاية صغرى **minimum** لقيمة محددة من قيم التمغنط  $M$  نستنتج من ذلك أن للنظام عزمياً متوضعاً **localized moment**. ففي الجدول

الجدول (1) يستعرض نتائجنا للنظام H/W(100) حيث  $\alpha = 0.0$  و  $\beta = 5 \text{ eV}$  و  $U = 12.9 \text{ eV}$  و  $\Delta E_{im} = 0$  و  $T = 300 \text{ }^\circ\text{K}$ .

$V_o$ (eV)	$V_o^2 / \beta$ (eV)	$n_a^\sigma$	$n_a^{-\sigma}$	$E_a^\sigma$ (eV)	$E_a^{-\sigma}$ (eV)	Localized states (eV)	$E_{ch}$ (eV) from eq.(2-39)
1.0	0.2	0.998613	0.01223447	-9.10751	3.539019	_____	-0.0405922
2.0	0.8	0.985695	0.0526915	-8.5843	3.39626	_____	-0.171838
3.0	1.8	0.959934	0.1308338	-7.580840	3.065469	_____	-0.4193979
4.0	3.2	0.898026	0.2616523	-5.901026	2.270521	_____	-0.8154674
4.5	4.05	0.831752	0.3633202	-4.5955	1.419495	_____	-0.8768000
5.5	6.05	0.605689	0.605689	-1.48355	-1.48355	$E_{l,+}^\sigma = -11.08628$ $E_{l,-}^\sigma = 16.66727$ $E_{l,+}^{-\sigma} = -11.08656$ $E_{l,-}^{-\sigma} = 16.66650$	_____
6.0	7.2	0.598520	0.598520	-1.57537	-1.57537	-10.153818 12.158838 -10.153813 12.158838	_____
7.0	9.8	0.243142	0.243142	-6.1387	-6.1387	-11.675155 11.930935 -11.675155 11.930935	_____
8.0	12.8	0.172418	0.172418	-7.04687	-7.04687	-13.031629 10.501983 -13.031629 10.501983	_____

الجدول (2) يستعرض حساباتنا عندما  $T = 300^\circ \text{K}$ ،  $\Delta E_{im} = 3.6/2.9 \text{ eV}$ ،  $U = 12.9 \text{ eV}$ ،  $\beta = 5.0 \text{ eV}$ ،  $V_o = 0.5 \text{ eV}$

$\alpha$	$n_a^\sigma$	$n_a^{-\sigma}$	$E_a^\sigma$ (eV)	$E_a^{-\sigma}$ (eV)	$\lambda^\sigma$ (eV)	$\lambda^{-\sigma}$ (eV)	$E_i^\sigma$ (eV)	$n_i^\sigma$	$E_i^{-\sigma}$ (eV)	$n_i^{-\sigma}$	$E_{ch}$ (eV)
1.0	0.998855	0.0	-7.120790	1.728567	-0.023318	-0.000061	-	-	-	-	-0.003507
0.9	0.998854	0.000076	-7.115026	1.726230	-0.020997	-0.004854	-	-	-	-	-0.003647
0.8	0.998853	0.000300	-7.108417	1.723891	-0.018673	-0.008588	-	-	-	-	-0.004066
0.7	0.998852	0.000673	-7.100953	1.721549	-0.016347	-0.011261	-	-	-	-	-0.004766
0.6	0.998850	0.001196	-7.092625	1.719204	-0.014020	-0.012870	-	-	-	-	-0.005745
0.5	0.998848	0.001870	-7.083424	1.716853	-0.011691	-0.013414	-	-	-	-	-0.007006

0.4	0.998846	0.002697	-7.073338	1.714496	-0.009361	-0.012888	-	-	-	-	-0.008549
0.3	0.998844	0.003676	-7.062359	1.712130	-0.007028	-0.011289	-	-	-	-	-0.010376
0.2	0.998841	0.004810	-7.050476	1.709753	-0.004692	-0.018611	-	-	-	-	-0.012488
0.1	0.998837	0.006100	-7.037678	1.707360	-0.002390	-0.014850	-	-	-	-	-0.014887
0.0	0.998832	0.007546	-7.023955	1.704949	0.000000	0.000000	-	-	-	-	-0.017574

الجدول (3) يستعرض حساباتنا عندما  $T=300^\circ K$ ،  $\Delta E_{im}=3.6/2.9 eV$ ،  $U= 12.9 eV$ ،  $\beta = 5.0 eV$ ،  $V_0=5.5 eV$

$\alpha$	$n_a^\sigma$	$n_a^{-\sigma}$	$E_a^\sigma(eV)$	$E_a^{-\sigma}(eV)$	$\lambda^\sigma(eV)$	$\lambda^{-\sigma}(eV)$	$E_i^\sigma(eV)$	$n_i^\sigma$	$E_i^{-\sigma}(eV)$	$n_i^{-\sigma}$	$E_{ch}(eV)$
1.0	0.943821	0.438212	-6.259990	-6.988300	-1.887706	0.766130	-	-	-	-	-7.466418
0.9	0.928540	0.480170	-5.340789	-6.708923	-1.908968	0.385707	-	-	-	-	-7.760344
0.8	0.901967	0.533022	-4.246811	-6.400142	-1.969223	-0.029614	-	-	-	-	-8.092910
0.7	0.691687	0.349563	-2.242070	0.718456	-2.957488	-2.700743	-	-	-	-	-2.988543
0.6	0.823888	0.343198	-4.197137	1.337669	-2.026191	-2.516774	-	-	-	-	-5.127529
0.5	0.773454	0.453289	-3.047034	0.438116	-1.860752	-2.253225	-	-	-	-	-5.339697
0.4	0.758810	0.490611	-2.989554	0.095319	-1.535550	-1.831463	-	-	-	-	-5.465205
0.3	0.794787	0.440090	-4.099355	0.638814	-1.096742	-1.370387	-10.684730	0.543997	-	-	-11.260370
0.2	0.810258	0.417601	-4.843207	0.950304	-0.714273	-0.915319	-10.001110	0.028907	-	-	-5.750186
0.1	0.738207	0.562625	-3.429453	-0.799510	-0.407449	-0.466840	-10.294870	0.366464	38.932196	0.000000	-9.682834
0.0	0.389395	0.378310	-6.263043	1.722293	0.000000	0.000000	-10.577210	0.444088	10.864261	0.000000	-3.346841

الجدول ( 4 ) يستعرض قيم  $E_{ch}$  بوجود وعدم وجود  $\mu_B H_Z M$  وكذلك  $n_a^\sigma$  و  $n_a^{-\sigma}$  كدالة للإزاحة

المغناطيسية  $\mu_B H_Z$  لقيمة  $V_0 = 0.5eV$  و  $\alpha = 0.2$ .

الإزاحة المغناطيسية $\mu_B H_Z M(eV)$	$n_a^\sigma$	$n_a^{-\sigma}$	$m=n_a^\sigma - n_a^{-\sigma}$	$\mu_B H_Z M(eV)$	$E_{ch}(eV)$ بدون الحد $\mu_B H_Z M$	$E_{ch}(eV)$ بوجود الحد $\mu_B H_Z M$
0.2	0.998889	0.004212	0.994677	0.189354	-0.213626	-0.412561

0.4	0.003373	0.003373	0.995660	0.398264	-0.410728	-0.808992
0.6	0.003337	0.003337	0.995641	0.597385	-0.610258	-1.207643
0.8	0.003009	0.003009	0.996060	0.796848	-0.809635	-1.606483

#### 8- المناقشة والاستنتاجات

4. ان أضافه تأثير القوة الصورية لم يؤثر على عملية تبادل الشحنة حيث ان قيمة طاقة التبادل  $U$  المساوية الى  $V_i - V_a$  قد حسمت عملية التصاق ذرة الهيدروجين على سطح التتكستن وهي متعادلة.

5. إن حساب  $\rho_a^{\pm\sigma}$  وكل دوال الالتصاق الكيمياوي خطوة مهمة للتأكد من صحة الحسابات العددية. إذ تمت مقارنة المظاهر العامة التي حصلنا عليها لـ  $\rho_a^{\pm\sigma}$  مع نتائج المصدر [28] الذي أستخدم حسابات  $clusture$   $SW$  calculation  $X_\alpha -$  لدراسة النظام  $H / N_i$  حيث حددنا قيم  $V_0$  ضمن المدى الضعيف أي التي لا تظهر فيه حالات متموضعة.

6. كلما أزيح المستوي  $E_a^{\pm\sigma}$  إلى الأعلى (الأسفل) باتجاه مستوي فيرمي ظهرت الحالات المتموضعة والعكس صحيح. بمعنى أن ظهور الحالات المتموضعة يعتمد على موقع  $E_a^{\pm\sigma}$  من حافتي الحزمة.

1. إن مدى قيم  $V_0$  (اعتمادا على دراستنا) يمكن تقسيمها إلى ثلاثة مديات وهي الاقتران الضعيف والمتوسط والقوي بحيث تُمثل  $V_0 \leq 2eV$  مدى الاقتران الضعيف ويمثل  $2eV < V_0 \leq 3.5eV$  مدى الاقتران المتوسط فيما تُمثل قيم  $V_0 > 3.5eV$  مدى الاقتران القوي.

2. إن شرط تكون الحالات المتموضعة بحاجة الى دقة وتحديد أكثر لظهور هذه الحالات. وسيكون من الأفضل أن نحدد الفرق بين الكميتين  $E_a^{\sigma 2}$  و  $4\beta^2(1-2A^0)$  أكثر بحيث يكون كالحال الفاصل بين الحالات السطحية الخيالية والمتموضعة.

3. طالما أن عرض الحزمة كبير لا يمكن تسمية الحالات المتموضعة المفصولة في حافتي الحزمة حالات تآصر  $bonding$  states وحالات ضديد التآصر  $antibonding$  states. إن هذه التسمية تصح فقط للحزم الضيقة التي سيتم دراستها مستقبلاً. وأن قيم الحالات المتموضعة  $|E_1^{\pm\sigma}|$  التي تتفصل من حافات الحزمة تقع ابعده عن حافات الحزمة كلما كانت  $V_0$  اكبر.

#### References

- [1] P. W. Anderson, Phys. Rev. ,Vol. 124, No.41, 1961.
- [2] Russal D.Salim Al – Kafaaji, Msc. Thesis, University of Basrah, colleg of Education basrah ,Iraq 2006 .
- [3] T. L. Einstein , J. A. Hertz and J. R. Schrieffer in : Theory Of Chemisorption ( Springer , Berlin , P.345 ) 1980.
- [4] G.M.Gavrilenko,R.Taranko,E.Taranko and V. K.Fedyanin, Surface Science , Vol.203,P. 212 – 226, 1988.
- [5] Yuan – Hannwen , Chinese Journal Of Physics, Vol. 37, No. 6, 1999.
- [6] J.R.Ingles Field and R.W.Holl and in :The Chemical Physics Of Soilid Surfaces and Heterogeneous Catalysis, Vol.1, Eds D.A. King and D.P.wodruff(Elsevier, Amsterdam, P.183) 1983 .
- [7] J.P. Muscat and D.M News, Prog, Surf. Sci., Vol.9, No.1, 1978.
- [8] B. Gumhalter , Prog. Surf. Sci. , Vol. 15, No. 1, 1984.
- [9] N. N. Bogolubov and S. V. Tyablikov, Dokl. Akad. Nauk SSSR Vol.126, No. 53, 1959.
- [10] T. E. Madey and J. T. Yates, chemisorption single crystals.  $H_2$  on (100) Tungsten , insturcturel propentes dessolids

- Editions duecenter national delare cherche scientific No.187.Paris,1970.
- [11] P. W. Tammand L. D. Schmidt, J. Chem. Phys. ,Vol. 52, P. 1150-1160 ,1970.
- [12] I. G. Medvedev., A. N. Frumkin Institute Of Electro Of The Russian Academy Of Science,Leninsky Prospect 31,117071 Moscow, Russian Federation, Surface Science,Vol.389,P.287-299,1997.
- [13] J. M. Al. Mukh, Ph.D. Thesis, college of science, University of Basrah, Basrah, Iraq. 1997.(and references there in).
- [14] A. T. Amos and K. W. Sulston and S. G. Davison, Advances In Chemical Physics,Vol.76,No.335,1989.
- [15] K.w. Silston , A.T. Amos and S. G. Davison ,Surface Science, Vol.197,No.555, 1988 .
- [16] S.G. Davison , K.W. Sulston and A. T.Amos,Chem . Phy. , Vol. 124, No.411, 1988 .
- [17] K .W. Sulston, A.T. Amos and G. Devison, Prog. Surf. Sci., Vol. 26, No.1-4 , P. 63 – 74 , 1987 .
- [18] B. E. Koel, D. E. Peebles and J.M.White, Surface Science, Vol. 125, No. 739, 1983.
- [19] J. L. Whitten and H. Yang, Surface Science Reports, Vol . 218, P. 55-124,1996.
- [20] G. P. Brivio, M. I. Trioni, Reviews Of Modern Physics, Vol . 71 , No. 1 , 1999.
- [21] T.Z. Fahidyin "Modern Aspects Of Electrochemistry " No.32, Ch5, B. E. Conway, J. Om. Bockvis and R. E. white (editors), kluwer, plenum, New York 1999.
- [22] M. Waskaas and Y. I. Kharkats, "Journal of physical chemistry" Vol. B103, 1999.
- [23] V. Stepannyuketal., surf. Rev. Lett.,Vol. 1,No. 477, 1994.
- [24] M. Tischer, O. Hjortstam, J. Trigg, J. M. Wills, B. Johansson and O. Eriksson, phys. Rev. Lett.,Vol.75,No. 1602, 1995.
- [25] M. Tischer, O. Hjortstam, J. Trigg, J. M. Wills, B. Johansson and O. Eriksson, phys. Rev. Lett.,Vol.76,No.1403, 1996.
- [26] " Theory of Magentism"by K. Yosida Part III, Ch. 11, 1996.
- [27] B. Kjollerstorm, D. J. Scalapino and J. R. Schrieffer, Phys. Rev.,Vol. 148,No. 665, 1966.
- [28] K. Schon Hammer,Solid State Communications,Vol.22,No.1, 1977.
- [29] D.M.Newns,Phys. Rev.,Vol.178,No.3,1969.

## The Chemisorption of Hydrogen Atom on solid surface and The Effect of External Magnetic Field

**J. M. Al-Mukh , R. D. Al-Kafaaji**

*Physics department, college of Education, University of Basra*

### Abstract

The Chemisorptions of Hydrogen atom on tungsten surface is studied in this work . Our study has two mean goals , the first is to study the dependence of coupling term on the atomic energy levels occupation through out the chemisorptions process . The second is to study the chemisorptions process for the same system in the existence of external magnetic field . For this purpose extended model calculation has presented to calculate the atomic energy levels occupation numbers and all the related chemisorptions functions . The image and correlation effects are all taken into consideration . The localized states are also determined and calculated as well as their occupation numbers which taken into consideration in the chemisorptions energy calculation . Throughout our calculations , the general features of the system under consideration have investigated using physical initial conditions getting use of the coupling - occupation numbers dependence . Our calculations show two types of solutions from its ranges for coupling strength values are characterized . The first is weak coupling where the solution is magnetic with no localized states . The second is strong coupling where the solution is nonmagnetic with localized states . And for the second goal , the chemisorptions process for the system under consideration in the existence of external magnetic field is studied. Since the external

field effect is added as shifts with finite values to the atomic levels . The atomic levels occupation numbers and the related chemisorptions functions , the localized states and this occupations and the energy are all calculated in the existence of the external field for the three coupling ranges . Discussion and important conclusions about the band width , the condition for the localized states existence , the image and the correlation effects ,are presented .

**Key words** :Chemisorptions, mean field approximation, Anderson Model, Magnetic Field, The Localized States .