





$$E_I(S) = -e^2 \int_S^{\infty} \frac{Z_{eff}^2(S') dS'}{4(S' + k_s^{-1})^2} \quad \text{-----}(7)$$

حيث أن  $k_s^{-1}$  يمثل طول الحجب *screening length* و  $Z_{eff}$  هي الشحنة المؤثرة المتمركزة على الذرة الملتصقة والتي تساوي  $Z_{eff}(S) = 1 - n_a^{\sigma}(S) - n_a^{-\sigma}(S)$  ، واعتماداً على ما سبق فان الطاقة الكلية للاتصاق الكيميائي تعطى بما يلي :

$$E_{CH}(S) = E_M(S) + E_I(S) \quad \text{-----}(8)$$

عند تسليط مجال كهربائي خارجي شدته  $F$  على نظام ذرة ملتصقة - سطح فان تأثيره يضاف إلى السطح على شكل إزاحة للمستوي الذري الملتصق بمقدار  $eFS_0$  [9]. حيث  $S_0$  تمثل طول الحجب. وتعطى طاقة الالتصاق الكيميائي للحالة غير المغناطيسية كدالة للمسافة والمجال المؤثر كالآتي [10] :

$$E_{CH}(S, F) = E_M(S, F) + E_I(S, F) + E_{IF}(S, F) - \frac{1}{2} \alpha_i F^2 \quad \text{-----}(9)$$

حيث تحسب  $E_M$  و  $E_I$  وفقاً للعلاقات (6) و (7) عند تأثير المجال. ان الحد الثالث من المعادلة (9) يمثل مقدار الطاقة المصاحبة لجلب الشحنة المؤثرة  $|e|Z_{eff}(S, F)$  من  $S=0$  إلى نقطة تقع في منطقة المجال وعلى بعد  $S$  من السطح:

$$E_{IF}(S, F) = eF \int_{S+S_0}^0 Z_{eff}(S', F) dS' \quad \text{-----}(10)$$

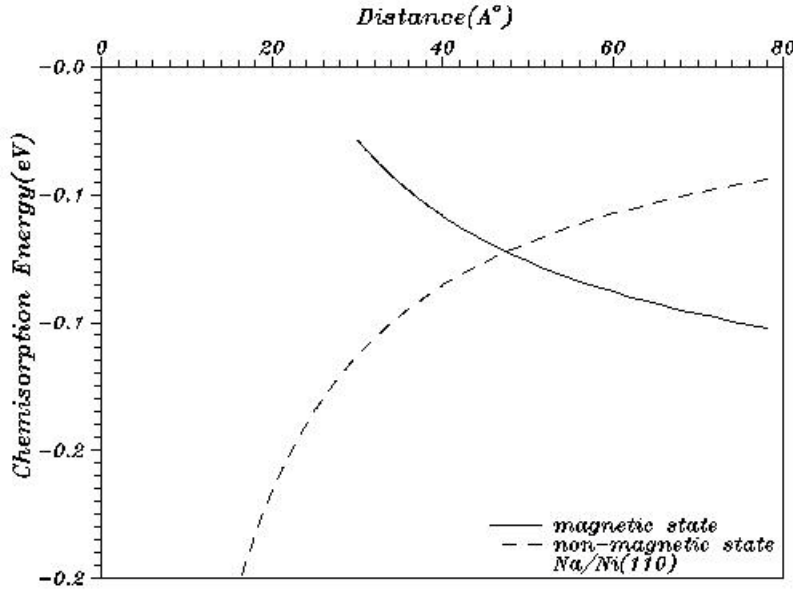
اما الحد الرابع من المعادلة (9) فيمثل طاقة استقطاب الايون و  $\alpha_i$  هي معامل استقطابية ثنائي القطب الكهربائي للأيون. وتعطى طاقة الالتصاق الكيميائي للحالة المغناطيسية كدالة للمسافة والمجال المؤثر بصيغة مشابهة للعلاقة (9) و لكن بتغيير  $\alpha_i$  إلى  $\alpha_A$  (  $\alpha_A$  هي معامل استقطابية ثنائي القطب الكهربائي للذرة ).  
أن علاقة طاقة الربط الكيميائي (الالتصاق الكيميائي) بمجال القلع  $F$  حسب نموذج التحذب للأيونات المقلوعة وهي متاينة من الدرجة الأولى تعطى بالعلاقة :

$$Q(F) = |E_{CH}| + \frac{1}{2} \alpha_A F^2 - E_{hump}(F) \quad \text{-----}(11)$$

ولمعرفة تفاصيل اكثر يرجى مراجعة المصادر [1,6,8].

### النتائج و مناقشتها :

لقد تم حساب أعداد الأشغال  $n_a^{\pm\sigma}$  ومستويات الطاقة الذرية  $E_a^{\pm\sigma}$  المقابلة لها للنظام  $Na/Ni(110)$  لغرض التأكد من التصرف العام لها كدالة للمسافة وطول الحجب. كما تم حساب طاقة الالتصاق الكيميائي للحلين المغناطيسي وغير المغناطيسي للنظام  $Na/Ni$  كدالة للمسافة وطول الحجب ودالة الشغل للسطح حيث استخدمت نتائج حسابات أعداد الأشغال كمدخلات لحساب طاقة الالتصاق وكما موضح في الشكل (1) الذي يبين أن :  
للحالة  $\phi_o < V_i$  الحالتين الايونية (الخط المتقطع) والمتعادلة (الخط المتصل) واللذان تتقاطعان عند النقطة  $S_C$  ، هذه النقطة لها أهمية كبيرة في موضوع القلع لأنها تؤكد أن حالة  $G.S$  للنظام عندما تكون الذرة بعيدة عن السطح تكون حالة متعادلة ( $E_M > E_I$ ) بينما تكون حالة ايونية ( $E_M < E_I$ ) عند عبور  $S_C$  بالاقتراب نحو السطح .  
وللحالات  $\phi_o > V_i$  يظهر الحل الايوني فقط اذ أن  $S_C$  تبعد عن السطح بزيادة  $\phi_o$  .  
نتائج هذه الحسابات مبينة في الجدول ( 1 ) الذي منه نستنتج أن المساهمة الايونية في طاقة الربط الكيميائي هي السائدة لكل الوجوه وتزداد هذه المساهمة بزيادة  $\phi_o$  على خلاف المساهمة المعدنية .

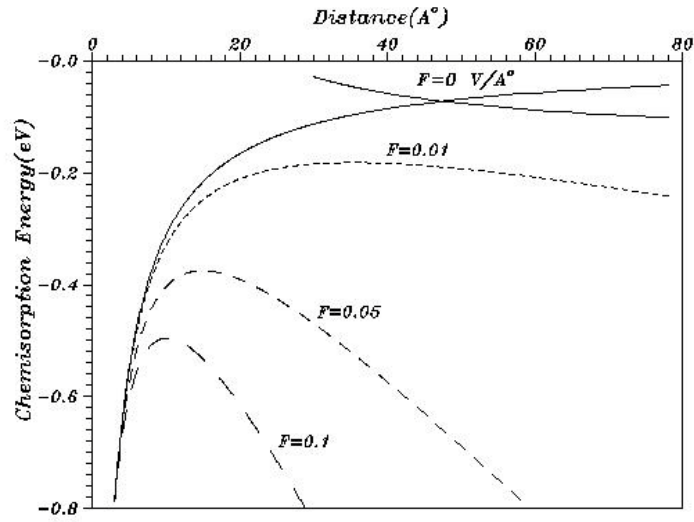


الشكل (1) يهضج أي نطغ PES ككطش Na/Ni(110) تظك بكك ز نغب .

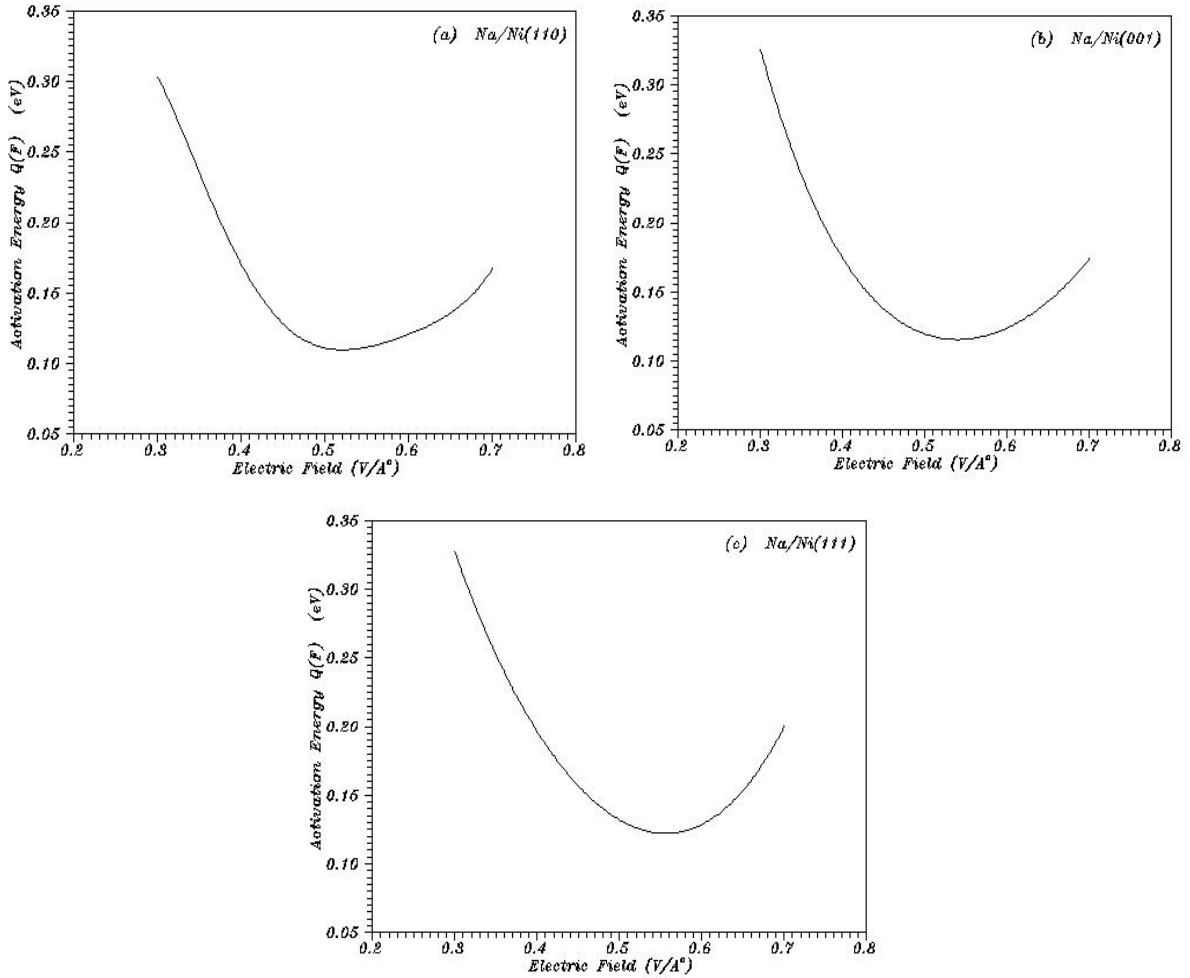
ولدراسة تأثير درجة الحرارة تم حساب الحالة غير المغناطيسية لا تتغير تبعاً لتغير درجة الحرارة إلا بالقرب من السطح على خلاف الحالة المغناطيسية، فزيادة درجة الحرارة يتم أشغال مستويات أكثر في حزمة التوصيل للمعدن مما يؤدي إلى زيادة قوة الترابط على عكس تأثير زيادة دالة الشغل [1,8] (وستعرض لموضوع تأثيرات الحرارة وبشكل مفصل في بحث في وقت لاحق). في حالة تسليط مجال كهربائي خارجي  $F$  على النظام بحيث يكون أكبر من المجال الموقعي الذي تسببه الصورة المحتثة في السطح على الأيون المراد قلعه فإن المستوى الذري يحدث له إزاحة إلى الأعلى (أعلى من مستوى فيرمي) بمقدار  $e|FS_o|$ . وكنيجة لذلك فإن الشحنة الإلكترونية الموضعية بالقرب من الذرة الملتصقة ستخف بشكل كبير وذلك لأن نيول التوزيع اللورنزي  $Lorentzian Shape$  للذرة ستتدخل مع مستويات المعدن ومن ثم زيادة التعريض  $I$  الحاصل في المستوى مما يؤدي إلى نقصان الشحنة الإلكترونية  $n_a$  المتوقعة بالقرب من الذرة الملتصقة (أي أن تأثير المجال معاكساً لتأثير درجة الحرارة). كما استخدمت نتائج حسابات دوال الالتصاق الكيميائي بوجود المجال كمدخلات لحساب  $PES$  كدالة للمجال للنظام  $Na/Ni(110)$  وكما موضح في الجدول (2). وبيين الشكل (2) تغير هيئة  $PES$  مع المجال الخارجي المؤثر للحلين المغناطيسي وغير المغناطيسي (الخط المتقطع) مقارنة مع الحالة  $F=0$  (الخط المتصل)، ولوحظ أن الحل المغناطيسي لا يتأثر بالمجالات الواطئة ولكن يضاف تأثير المجال عليه بشكل إزاحة مقدارها  $-\alpha_A F^2$  عن الحالة  $F=0$  بينما في حالة المجالات العالية فلا توجد هناك حالة مغناطيسية أساساً بسبب الإزاحة التي يتعرض لها المستوى الذري إلى أعلى مستوى فيرمي ومن ثم تكون الحالة الغير مغناطيسية هي السائدة ابتداءً من الشحنات المؤثرة و انتهاءً بطاقة الالتصاق للذرة الملتصقة.

أما الحل غير المغناطيسي فيحصل له انحناء يتناسب مع شدة المجال المطبق مقارنة مع الحالة  $F=0$ . ويعتمد تقاطع هذه المنحنيات على شدة المجال والواضح من الشكل (2) الذي يوضح ميكانيكية القلع حيث تنقل الذرة الملتصقة بهيئة أيون موجب عبر الحالة الأرضية  $G.S$  للنظام والتي هي حالة أيونية. وعليه، فلحساب مجال القلع كان لابد أولاً حساب  $PES$  ومن ثم حساب طاقة التنشيط للقلع  $Q$  وللحالتين  $\phi_o < V_i$  و  $\phi_o > V_i$  كدالة للمجال وطول الحجب أيضاً ولكل الوجوه للنظام  $Na/Ni$  بحيث يتحقق الشرط  $Q(F)=min$  وكما في الشكل (3). إن نتائج حسابات مجال القلع يستعرضها الجدول رقم (3) والتي لم يتم مقارنتها مع النتائج العملية لهذه الانظمة لعدم حصولنا عليها. ولكن نتائجا أعطت التصرف نفسه لحالة التصاق وقلع الذرات القلوية من سطح التنكستن [1] وكذلك لطاقات الالتصاق على سطح النيكل [8] التي تظهر تطابقاً جيداً مع القيم العملية و بشكل خاص للحالة  $\phi_o < V_i$ .

حساب مجال قلع ايونات الصوديوم Na من سطح ...



الشكل (2): يوضح تغير الـ PES للنظام  $Na/Ni(110)$  كدالة للمجال الكهربائي.



الشكل (3): يوضح علاقة الـ  $Q$  مع  $F$  للأنظمة  $Na/Ni$ .



## References :

- 1- H.Q.Al-Edany, M.Sc. Thesis, Basrah, Iraq, 2002.
- 2- B.Rassar and M.Remy, Surface Science, P.223, 1980.
- 3- J.W.Gadzuk, J.K.Hartman and T.N.Rhodin, Phy.Rev.B, Vol.4, No.2, P.241, 1971.
- 4- R.Gomer, J.Chem.phy., Vol. 31, No. 2, 1959," Field emission and Field ionization ", 1961.
- 5- N.Ernst, G.Bozdech and J.H.Block, Surface Science, Vol. 80, P. 645-655, 1979.
- 6- H. Q. Al-Edany and J. M. Al-Mukh, J.Basrah Researchers, Vol. 28, part 3, P. 136-145, 2000.
- 7- P.W.Anderson, Phys.Rev., Vol. 124, P. 41, 1961.
- 8- H.Q.Al-Edany, J.Basrah Researchers, Vol. , P. , 2004.
- 9- J.M.Al-Mukh, and S.I.Essa, Basrah J. Science, C, Vol. 18, No. 2, P. 145-158, 2000.
- 10- T.T.Tsong, Reports on progress in Physics, Vol. 51, part 2, 1988.
- 11- J.M.Al-Mukh, Ph.D.thesis, Basrah, Iraq, 1997.
- 12-R. L. Gerlach and T. N. Rhodin, Surface Science, 19, 403,1970.

## **The Desorption field for Na ions from Ni surface**

**Haider Q. Al-Edany\***

**Majid M. Al-Samer\*\***

*\*Physics department – college of education University of Basra, Basra – Iraq*

*\*\*Computer science department – college of education University of Basra,  
Basra - Iraq*

## Abstract:

Distance and screening effects on the adatom's effective charge are studied within the framework of the time – dependent Anderson – Newns model throughout the chemisorption theory. An analytical formula for the effective charges is used and developed where the repulsion of the two electrons of opposite spins in the adatom is taken into account by means of the correlation energy.

An analytical formulation for the metallic chemisorption energy [1] is also used and developed while the ionic contribution to the chemisorption energy is solved numerically. The chemisorption energies are calculated as a function of distance, screening length and crystallography. The calculated chemisorption energies are extracted to calculate fields desorption using Hump model [1]. The comparison with the behavior of the experimental data gives good agreement.

