





ISSN -1817 -2695

دور الحالات الصورية في تبادل الشحنة بين الذرة وسطح المعدن

فؤاد عبد قاسم و شاكر أبراهيم عيسى قسم الفيزياء, كلية التربية, جامعة البصرة, بصرة, عراق الاستلام 18–12-2013 ، القبول 23–2–2014

الملخص

يتناول البحث دور الحالات الصورية على عملية انتقال الشحنة أثناء استطارة ذرة Li في حالاتها الأرضية والمتهيجة (25,35,4s) من سطح النحاس (2111) , حيث تم حساب احتمالية التأين الموجب P^+ للمستوي الذري للذرة القلوية باستخدام طريقة تشمل تفاعل (n+1) من المستويات حيث كتب المؤثر الهاملتوني بصيغة رموز ديراك والتي فيها أخذت أزمان الحياة للمستويات الذرية ومستويات الصورة بنظر الأعتبار.

إن احتمالية التأين الموجب (t) للمستوي الذري فحصت كدالة لزمن الاستطارة وكما تم فحص الاحتمالية النهائية (∞) ($\infty)$ كدالة لمقلوب السرعة, ولوحظ أن تأثير الحالة الصورية يظهر على شكل تذبذبات في منحني $P^+(t)$ وفي منحني $(p^+(\infty), P^+(\infty))$ منحني $(\infty)^+ P$ وان سعة هذه التذبذبات تختلف باختلاف الحالة الأليكترونية للذرة فأنها تزداد بزدياد طاقة المستوي الذري. كلمات مفتاحية : علم السطح ، حالات صورية ، تبادل الشحنة

1– مقدمة

إن انتقال الإلكترون بين سطح وذرة قريبة منها يحث ويسيطر على العديد من ظواهر السطح الديناميكية مثل, زمن الحياة للحالات المتهيجة [1,2] وديناميكيات تفاعلات انتقال الشحنة على السطح [5-3] وكذلك عمليات انتقال الطاقة على السطوح [9-6] . ويعتقد بأن تبادل الإلكترون بين كل من الذرة والسطح يمر عبر القنوات التالية (انظر الشكل (1)) :.

 النفق ألرنيني لتعادل الايون RN أو تأين الذرة RI حيث يتم تبادل الإلكترون بين مستوى التكافؤ للذرة وحزمة التوصيل للمعدن .

 عمليات أوجيه لتعادل الايون AN بسبب انتقال إليكترون من السطح إلى الايون وانبعاث إليكترون آخر من السطح .

حيث نلاحظ إن أي من هذه القنوات تكون سائدة يعتمده على طاقة مستوي الإلكترون نسبة إلى تركيب الحزمة الالكترونية للقاعدة [3]. حيث يكون نفق الإلكترون في العملية (1) هو السائد إذا كانت الحالة الالكترونية متموضعة ضمن حزمة القاعدة .



الشكل(1): القنوات المحتملة لانتقال الإلكترون بين الذرة وسطح المعدن , E_a المستوي الذري الأرضي للجسيم الساقط , E_a' مستوى الشكل(1): القنوات المحتملة لانتقال الإلكترون بين الذرة وسطح المعدن , U_a المستوي الذري الأرضي للجسيم الساقط , E_F مستوى الشكل الشكل المادة الصلبة , v_a قعر الحزمة المملوءة.

للانعكاس المتكرر للإلكترون, وذلك لان الإلكترون يرى صورته في الجهة الأخرى عند الحاجز ويعود الى السطح بتأثير قوة كولوم ويبقى قريبا من السطح وذلك لان متجه موجته يكون ضمن حيز برليون . ويمكن إيجاد سلسلة من حالات الصورة على سطوح معادن عديدة والتي تظهر نتيجة لإعادة توزيع الشحنة في إن حالات الصورة هي حالات ضعيفة مقيدة في بئر الجهد بين السطح والفراغ ,وقد عينت لمختلف سطوح المعادن باستخدام تقنيات عملية مختلفة [13–10], و تتولد خلال بئر الجهد الذي يتكون بسبب حاجز جهد الصورة التجاذبي وحاجز السطح ألتتافري, وتتشأ حالات السطح [14] هذه بين حاجز السطح وجهد الصورة نتيجة

أوطئ مستوي استجابة للإلكترون القريب من السطح [15]. وعلى هذا الأساس فأن القوة الكولومية الصورية تقود ايظا إلى سلسلة تشبه سلسلة ريدبرك الهيدروجينية لمستويات طاقة مقيدة.

وقد بين كل من Echenique و Pendry و [16] بأن طاقة ربط الحالة الصورية يمكن إن توصف بشكل جيد عند إضافة حد ثابت δ للعدد الكمي n والذي يظهر نتيجة النهاية المحدد للدالة الموجية المتداخلة مع البلورة, والـذي أطلـق عليـه بالخلـل الكمـي لسلاسـل الحـالات الصورية ولذالك,

$$E_n = -\frac{Z_{eff}^2}{32(n+\delta)^2} + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2M^*} \qquad ...(1)$$

حيث تكون قيمة الشحنة المؤثرة Z_{eff}^2 مساوية للوحدة الواحدة لسطوح المعادن وتكون قيمتها اصغر من الوحدة الواحدة للمواد العازلة وأشباه الموصلات, حيث انه لشبه موصل معين مثل Si تكون مساوية إلى 0.7, إما في العوازل مثل الهليوم فتصل إلى قيمة صغيرة جدا تقريبا العوازل مثل الهليوم فتصل إلى قيمة صغيرة جدا تقريبا العوازل مثل الهليوم فتصل إلى قيمة صغيرة جدا تقريبا موصل معين مثل Si تكون مساوية إلى 0.7, إما في العوازل مثل الهليوم فتصل إلى قيمة صغيرة جدا تقريبا موصل معين مثل Si تكون مساوية إلى 10, إما في العوازل مثل الهليوم فتصل إلى قيمة صغيرة جدا تقريبا موصل معين مثل Si تكون مساوية إلى 0.7, إما في الموازل مثل الهليوم فتصل إلى قيمة معدده للزخم الموازي السطح فانه أضيف الحد ($*2M^*$) وان الشذوذ

عن التصرف البسيط للإلكترون الحر في نموذج الإلكترون الحر يمكن تصحيحه بأخذ الكتلة الفعالة * M للإلكترون بنظر الاعتبار.

حالات الصورة تمتلك أزمان حياة طويلة مقارنة بحالات السطح الأخرى وذلك لأنها تقع بصورة رئيسية أمام السطح, حيث يكون التداخل بين الدوال الموجية لحالات الصورة والدوال الموجية لحالات السطح صغير نسبيا [17]. الشكل (2) يبين مخطط مستوى الطاقة لإلكترون أمام سطح (Cu(100, ومنه نلاحظ إن حالات جهد الصورة تقع تقريبا في منتصف فجوة الحزمة P. S والتي تكون كبيرة نسبيا, وأيضا نلاحظ في الشكل مربعات الدوال الموجية لحالات الصورة ذات الرتب (n=1,2,3) والتي تتقارب طاقة ربطها كلما اقتربنا من مستوي الفراغ وفقاً للعلاقة (1), أما الجزء B من هذا الشكل فيبين القيم العملية المحسوبة لطاقة ربط الحالات الصورية باستخدام تقنية انبعاث الفوتونين (2PPE)[18,19]. في الشكل (2) نلاحظ أن كثافة الاحتمالية الصورية بالتتاقص الشديد كلما زادت رتبة الحالمة الصورية مما يعطي احتمالية لإهمال الحالات ذات الرتب العالية في الحسابات النظرية مستقبلا .



الشكل (A:(2) مخطط الطاقة لإلكترون امام سطح Cu B. القيم العملية لطاقة ربط الحالة الصورية[18].

إن موقع طاقة المستوي الذري نسبة إلى تركيب الحزمة الالكترونية للقاعدة Substrate [3] , يحدد أي من قناة تبادل الإلكترون بين الذرة والسطح تكون هي السائدة . لذا فأن نفق الإلكترون بين السطح والذرة يتوقع إن يكون سائدا إذا كانت الحالة الالكترونية الذرية متموضعة ضمن حزمة طاقة الحالات الصورية للقاعدة

[20] وكما موضح تخطيطيا في شكل (3) والذي يوضح أيضا قناتي نفق الرنين الاعتيادي والنفق من خلال الحالة الصورية , حيث إن الإلكترون يمكن إن ينفق عبر الحالات المقيدة في بئر جهد السطح والتي تسمى بالحالات الصورية بصورة رنينية أو غير رنينية وبسعات انتقال أساسية, هذه القناة تسمى بقناة حالة الصورة..إن الدوال الموجية لحالات جهد الصورة تقع كليا خارج المعدن, ولهذا السبب فأنها تمتلك تداخلاً قوياً مع الكترونات الأجزاء الذرية القادمة باتجاه السطح والخارجة

منه السطح, مثل هذا التداخل القوي في الفضاء يجعل نفق الإلكترون خلال الحالات الصورية بصورة رنينية أو غير رنينية ممكناً .



شكل(3) يوضح نفق الإلكترون للمعدن خلال القناة المباشرة(a)وقناة الصورة (b)[20]

عندما يقع مستوى طاقة الكترون التكافؤ للذرة أعلى من مستوي فيرمي فأن هناك احتمالية لتأين الذرة, وعلى أي حال فأن مقدار هذه الاحتمالية تعتمد على قوة التداخل بين الدوال الموجية للذرة وللمعدن على حد سواء, فعندما تقع الذرة على مسافة بعيدة نسبيا من سطح المعدن فأن قيمة هذا التداخل تكون قليلة الامر الذي يؤدي الى انخفاض احتمالية التأين ولكن عندما تقترب الذرة من السطح فأن تداخل الدوال الموجية سوف تأثيران إضافيان المستوي بمقدار (z) واللذان يعدلان من احتمالية المستوي (م) والمسافة عن السطح z ربما تعطى المستوي (z) والمسافة عن السطح z ربما تعطى المستوي (z) دوالمسافة عن السطح z ربما تعطى بالمسيغة التالية [21] :

$$\begin{split} \Delta(z) &= \Delta_o \exp(-2\alpha \ z) \quad \dots(2) \\ \text{ and } \Delta_o & \text{ and } z \\ \text{ and } \Delta_o & \text{ and } z \\ \text{ a$$

تمثل المركبة العمودية لسرعة الذرة المستطيرة و Z_c هي اقرب مسافة تصلها الذرة إلى السطح , وان $_{\perp}v$ تعطى بالعلاقة التالية : $v_{\perp} = \cos(\theta) \sqrt{E(keV)/25M}$ حيث أن θ تمثل زاوية السقوط التي تحدث نتيجة الاستطارة و M كتلة الذرة المستطيرة , بينما تمثل Eالطاقة الحركية للذرة المستطيرة مقاسه بالكيلو إلكترون فولت (k eV).

إن الهدف من بحثنا هو دراسة دور الحالة الصورية في عملية تبادل الشحنة بين الذرات الاحادية الإلكترون (القلوية) وسطح المادة الصلبة في حالة تموضع ذرة قرب سطح المعدن وفي حالة استطارة ذرة من سطح المعدن . حيث قدمنا انموذج حسابي لدراسة تأثير الحالة الصورية في عملية استطارة ذرة من سطح معدن واستخدمنا هاملتون مكتوب بصيغة المصفوفات ورموز ديراك والذي يسمح بتفاعل (n + 1) من المستويات. وقد طبقنا هذا النموذج على نظام حقيقي هو استطارة ذرة Li

2- النموذج النظري لدور الحالة الصورية في عملية تبادل الشحنة

سوف نوضح دور الحالة الصورية في عملية تبادل الشحنة ألرنيني بين الذرة المتهيجة المستطيرة والسطح حيث أستخدم نموذج هاملتوني كتب بطريقة رموز ديراك لغرض اخذ بنظر الأعتبار التفاعل بين طريقة تفاعل نظام (n+1) من المستويات

أفرض أن المستوي الذري a ذو الدالة الموجية E_a منفاعل مع n من المستويات للحالة الصورية in والتي تمتلك الدالة الموجية $\langle in \rangle$ والطاقة E_i وإن تفاعل المستوي الذري $\langle a \rangle$ مع مستويات المعدن يعطي زمن حياة لإلكترون المستوي الذري مقداره $T_o(t)$ ويسبب نصف عرض للمستوي الذري مقداره $\langle in \rangle$, وكذلك فان مستويات الحالة الصورية $\Delta_o(t)$ تمتلك زمن حياة مقداره τ_{in} نتيجة تفاعلها مع مستويات

المعدن على الرغم من أن هذا التفاعل يكون ضعيف جداً , وبالتالي فان المستوي يمتلك نصف عرض مقداره Γ_{in} . والذي يكون غير معتمد على الزمن ومقداره ثابت .

الطريقة البسيطة لنأخذ بنظر الاعتبار تأثير أزمان الحياة التي ذكرت أعلاه هي بإضافة مركبة خيالية للعناصر القطرية للمصفوفة الهاملتونية (n+1×n+1)وكما يلي :

$$\hat{H} = (E_a - i\Delta_a(t))|a\rangle\langle a| + \sum_n (E_{in} - i\Gamma_{in})|in\rangle\langle in| + \sum_N (V_{a,in}(t)|a\rangle\langle in| + V_{in,a}(t)|in\rangle\langle a|)$$

$$a_a(t) = \sum_n \Delta_a(t) \quad \text{and} \quad \text{and}$$

حيث أن V_{ain} هو عنصر مصفوفة التفاعل بين المستوي الذري a والمستويات الصورية in. حيث يمثل E_a و E_i طاقة المستويات الالكترونية لكل من الحالة الذرية والحالات الصورية على التوالي, وان $V_{a,in}$ هو عنصر مصفوفة التفاعل بين مستويات الذرة مع

مستويات الحالة الصورية. وأن
$$\Delta_a(t)$$
 يمثل معدل النفق
المباشر
وان الدالـة الموجيـة للنظـام يمكن أن تكتب برمـوز ديـراك
كمزج خطي للدوال الموجية المتفاعلة و كالآتي :

 $C_a(-\infty) = 1 \qquad ; \qquad C_{in}(-\infty) = 0$

$$\Psi = C_a(t) |a\rangle + \sum_n C_{in}(t) |in\rangle$$
 ...(4)
حيث أن المعادلات التي تحققها المعاملات (3 و 4) في معادلة
شرويريزكر

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \qquad \dots (5)$$

نحصل على :

(3)

$$\frac{\partial C_a(t)}{\partial t} = -(iE_a + \Delta_o(t))C_a(t) - i\sum_n V_{in,a}(t)C_{in}(t)$$

$$\frac{\partial C_{in}(t)}{\partial t} = -(iE_{in} + \Gamma_{in})C_{in}(t) - iV_{a,in}(t)C_a(t)$$
...(6)

التي يجب أن تحل تحت الشرط الابتدائي :

إذ إن
$$n_a(t)$$
 عدد إشغال المستوي a يعطى بالعلاقة $n_a(t) = C_a^+(t) C_a(t)$...(7)
أما احتمالية تأين الذرة المستطيرة (P(t) فتعطى بالعلاقة التالية:

...(8)... وان احتمالية التأين في أي زمن t تعطى بالعلاقة $\left|C_a(t)
ight|^2 = 1 - \left|P^+(t) = 1 - \left|C_a(t)
ight|^2$

3- تطبيق لنظام حقيقى

سوف نقوم بـنفحص تـأثير الحـالات الصـورية علـى اســـتطارة ذرة الليثيــوم فـــي حالاتهــا الالكترونيـــة Li2s,Li3s,Li4s مــن سـطح النحـاس (Cu(111. أن المعــاملات الخاصــة بــذرة الليثيــوم وسـطح المعــدن

أخذت من المصدر [22,23] الثاني وان قيم Cu(111) أخذت من المصدر [24] . Δ_o

 $P(t) = 1 - n_a(t)$

Alkali Atom	Vi(a.u.)
Li2S	0.1985
Li3S	0.0741
Li4S	0.0382

الجدو ل (1) يحتوي ثوابت جهد التأين V_i لذرة Li الجدو ل

صورية لمعدن (Cu(111 [23].	للحالات ال Γ_I	يبين قيم	الجدول (2)
---------------------------	-----------------------	----------	------------

	Cu(111)	
	$\Gamma_I \times 10^{-3} (eV)$	
1	38	
2	40.6	
3	13.4	

الجدول (3): يبين قيم Δ_o و Δ اذرة Li المتموقعة على سطح

,		,
الحالة الأليكترونية للذرة	$(eV) {f \Delta}_{o}$ عدم وجود الحالة الصورية	(eV) ∆ بوجود الحالة الصورية
Li2s	3.1015	2.9042
Li3s	0.8507	0.4456
Li4s	0.4051	0.0613

النحاس (Cu(111 بوجود الحالات الصورية وبعدم وجودها .

4- النتائج والمناقشة

إن النفحص لتأثير الحالة الصورية في عملية الأستطارة للذرة من سطح المعدن يكون من خلال : 1-رسم علاقة احتمالية التأين الموجب ⁺ P كدالة لزمن الاستطارة وذلك من خلال متابعة نموها الزمني خلال

فترة الاستطارة اللازمة حتى تصل إلى مرحلة الإشباع عند t مقدار كبير وموجب ندعوه $\infty = t$. -2-رسم علاقة احتمالية التأين النهائية للذرة القلوية -2 كدالة لمقلوب المركبة العمودية لسرعة الذرة بقاء $P^+(\infty)$

الذرة بالقرب من السطح (أو زمن التفاعل) . حيث انه عندما تكون السرعة $_{\perp}v$ كبيرة فان زمن التفاعل أو الزمن الذي يقضيه الايون قرب السطح يكون صغير جداً غير كافي لزيادة التأين وعندما تكون السرعة $_{\perp}v$ صغيرة , فان هناك زمن كبير وكافي لتأين الذرة . لاحظ انه من المعادلة (6) نحصل على العلاقة التالية في حالة عدم وجود حالات صورية :

$$\frac{\partial C_a(t)}{\partial t} = -[iE_a(t) + \Delta_o(t)]C_a(t) \quad \dots (9)$$

$$|\text{Irig. Let C_a(t)} = -[iE_a(t) + \Delta_o(t)]C_a(t) \quad \dots (9)$$

 $C_{a}(t) = \exp(-\int_{0}^{t} [iE_{a}(t') + \Delta_{o}(t')]dt' \dots (10)$

، وبذلك فأن احتمالية التأين في هذه الحالة تكون كالآتي :

$$P^{+}(t) = 1 - \exp(-2\int_{t_o}^{t} \Delta_o(t')dt') \qquad \dots (11)$$

والتي تظهر كخطوط منقطة في الأشكال التالية : الشكل (4) يوضح احتمالية التأين الموجب P^+ لذرة الليثيوم بالحالة الأرضية كدالة لزمن الاستطارة. حيث نلاحظ انه عند الزمن 0 > t = d فأن احتمالية التأين الموجب $(t)^+q$ تكون اكبر سعة تنبنبية مما هي عليه

عند الزمن 0 < t وذلك لوجود زمن حياة محدد للقناة الصورية .

الشكل (5) يوضح احتمالية التأين الموجب $(\infty)^+ P$ لذرة الليثيوم للحالة الأرضية Li2s كدالة لمقلوب السرعة. حيث نلاحظ ان تأثير الحالة الصورية يظهر في السرع العالية وبسعة تنبذب كبيرة مع احتمالية ذات تقعر صغير.

الشكل (6) يوضح احتمالية التأين الموجب $P^+(t)$ لذرة الليثيوم بالحالة المتهيجة الأولى Li3s كدالة لزمن الاستطارة. حيث نلاحظ تصرف لاحتمالية التأين الموجب $P^+(t)$ مشابهة للحالة الأرضية لذرة الليثيوم .

 $P^+(\infty)$ توضح احتمالية التأين الموجب (∞) الأشكال (7) توضح احتمالية التأين الموجب (∞) كدالة لمقلوب السرعة لذرة الليثيوم للحالة المتهيجة الأولى Li3s . حيث نلاحظ تأثير الحالات الصورية في السرع العالية يكون اكبر مما هو عليه للحالة الأرضية . وكذلك نلاحظ التأثير على السرع الواطئة يبدأ بالوضوح وان سعة التذبذب تكون اكبر مما هي عليه بالحالة الأرضية.

الأشكال (8) و (9) توضح نفس العلاقات السابقة ولكن لذرة الليثيوم للحالة المتهيجة الثانية Li4s حيث نلاحظ هذا تأثير الحالة الصورية يظهر بشكل كبير جداً وواضح عند الأزمنية 0 > t و 0 < t وعلى السرع العالية والواطئية إذا ماقورنيت بالحالتين الأرضية والمتهيجة الأولى.

وبصورة عامة فأن نصف عرض للحالة الصورية المأخوذ بنظر الاعتبار يؤدي إلى احتمالية نفق اكبر عبر الحالات الصورية إلى مستويات المعدن مما يؤدي إلى زيادة احتمالية التأين (تفريغ مستوى الذرة) .

أن احتمالية التأين لذرة الليثيوم ذات السرع الواطئة في حالاتها المتهيجة العليا اقل من التي هي ادنى منها واقل من تلك للحالة الارضية .



الشكل (4) يوضح احتمالية التأين الموجب P^+ للحالة الارضية لذرة الليثيوم Li2S على سطح النحاس كدالة الى الزمن بوجود الحالة الشكل (4) يوضح احتمالية التأين الموجب الحالة الصورية وبعدم وجودها.



الشكل (5) يوضح احتمالية التأين الموجب P^+ للحالة الارضية لذرة الليثيوم Li2S على سطح النحاس كدالة لمقلوب السرعة بوجود الحالة الصورية وبعدم وجودها.



الشكل (6) يوضح احتمالية التأين الموجب P^+ للحالة المتهيجة الأولى لذرة الليثيوم Li3S على سطح النحاس كدالة الى الزمن بوجود (6) يوضح احتمالية التأين الموجب ألحالة الصورية وبعدم وجودها.



الشكل (7) يوضح احتمالية التأين الموجب P^+ للحالة المتهيجة الأولى لذرة الليثيوم Li3S على سطح النحاس كدالة لمقلوب السرعة بوجود الحالة الصورية ويعدم وجودها.



الشكل (8) يوضح احتمالية التأين الموجب P^+ للحالة المتهيجة الثانية لذرة الليثيوم Li4S على سطح النحاس كدالة الى الزمن بوجود (8) يوضح احتمالية التأين الموجب الحالة الصورية وبعدم وجودها.



الشكل (9) يوضح احتمالية التأين الموجب P^+ للحالة المتهيجة الثانية لذرة الليثيوم Li4S على سطح النحاس كدالة لمقلوب السرعة بوجود (9) يوضح احتمالية التأين الموجب السرعة بوجود

(111) من قبل الباحثين Langreth و 23] [23] . وكانت دراستهم تتركز حول حساب عنصر مصفوفة النفق بين الحالة الذرية والحالة الصورية ومن ثم حساب احتمالية التأين لحالتي قناة الصورة وقناة الرنين وشبه الرنين بين مستوى الذرة ومستويات الحالة الصورية الذي تم في هذا البجث مناقشة دور القناة الصورية في عملية تبادل الشحنة بين الذرة وسطح المادة . إن هذه القناة المهمة تم مناقشة دورها سابقاً لحالة استطارة ذرة الهيــدروجين المتهيجــة ^{*} H مــن ســطح النحــاس

استخدمت فيه حالة صورية واحدة , ولم يقارنوا بين القناة الصورية والقناة المباشرة (عدم وجود الحالة الصورية). في هذا البحث نوقش تأثير وجود الحالة الصورية وعدم وجودها وتم التركيز على إبراز التأثير على احتمالية التأين للذرة المستطيرة من السطح حيث جهزنا لدراسة عملية الاستطارة نظرية تعتمد على رموز ديراك حيث تم الأخذ بنظر الاعتبار نصف عرض الحالة الصورية الذي يزيد من احتمالية التأين . حيث كانت قناة الانتقال المباشرة تعطى بالعلاقة :

$$P^{+}(t) = 1 - \exp(-2\int_{-t_{o}}^{t} \Delta_{o}(t') dt')$$

المصادر

Refferences [1] Nordlander P., Tully T.C., Phys. Rev. Lett. 61 990(1988). [2] Nordlander P., Tully T.C., Phys. Rev. Lett. B 42 5564(1990). [3] Avouris Ph., Walkup R.E., Ann. Rev. Phys. Chem. 40,73 (1989). [4] Gao S., Busch D.G., Ho W., Surf. Sci. 344,L1252 (1995). [5] Stipe B.C., Rezaei M.A., Ho W., Gao S., Persson M., Lundqvist B.I., Phys. Lett. 78 4410 (1997). [6] Los J., Geerlings J.J.C., Phys. Rep. 190 133 (1990). [7] Brako R., Newns D.M., Rep. Prog. Phys. 52 655 (1989). [8] Gadzuk J.W., Surf. Sci.6 133 (1967). [9] Remy M., J. Chem. Phys. 53 2487 (1970). [10] McRae E.G., Rev. Mod. Phys. 51 541(1979). [11] Johnson P.D., Smith N.V., Phys. Rev. B 27 2527(1983). [12] Straub D., Himpsel F.J., Phys. Rev. Lett. 52 1922(1984). [13] Steinmann W., Appl. Phys. A 49 365(1989). [14] Smith N.V., Phys. Rev. B32, 3549(1985). [15] Bartel L. et al., phys. Rev. B67, 205416 (2003).

وقد تم تفحص الدوال $(t)^+ P$ و $(\infty)^+ P$ من خلال اعتمادهما على الزمن t أو مقلوب مركبة السرعة العمودية

أ- إن احتمالية التأبين $P^+(t)$ عند t < 0 بكون اكبر

ب- إن تأثير الحالة الصورية يظهر في السرع

وذلك بسبب احتواء نصف عرض الحالة الصورية مما يؤدى إلى احتمالية نفق اكبر عبر الحالات الصورية إلى

t > 0 سعة تذبذبية مما هو عليه عند

العالية وبسعة تذبذب اكبر ذات احتمالية تأين اكبر

مستوبات المعدن وبزيد من احتمالية التأبن للذرة .

. 1/v , 1/v , 1/v

[16] Echenique P.M. and Pendry J.B., J.Phys. 11, 2065(1978). [17] Link S., Sievers J., Durr H.A., Eberhardt W., Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena 351-355,114-116 (2001). [18] www.physik,unimarburg.de/of/dynamics/import.html. [19] Fauster Th., Steinmann W., Halevi P., Ed(Elsevier Amsterdam), pp.347-411 (1995). [20] Gao S., Langreth D.C., Surf.Sci. L314-L319 398 (1998). [21] Gauyacq J.P. and Borisov A.G., Journal of physics-Condensed Matter 10,30,6585(1998). [22] Gadzuk J.W., Physical Review, B79,73411 (2009). [23] Maazouz M., Borisov A.G., Esaulov V.A., Gauyacq J.P., Guillemot L., Lacombe S., and Teillet-Billy D., Phys. Rev. B55, 20(1996). [24] Qassim F.A. "Role of Image State in the Charge Exchange between Atom and Metal Surface" M.Sc.thesis, Basrah University (2010).

The role of Image States in the Charge Exchange between Atom and Metal Surface

F. A. Qassim and S.I.Easa Physics department, college of Education, Basrah University, Basrah, Iraq

Abstract

The paper deals with the role of image states on charge exchange during scattering of Li atom in its ground and excited states (2s,3s,4s) from Cu(111) surface, where we calculate the positive ionization probability P^+ of atomic level of the alkali atoms by using the (n+1) interaction levels method, in which the Hamiltonian operator is written by Dirac-notations formula and taking into account both 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 these oscillations differs for different alkali electronic states, which is increase as the energy of the atomic level increasing.