التحقق من طاقة ربط الحالة الصورية في Cu (111)
دراسة نظرية ومقارنة مع النتائج العملية

جبار منصور خلف

قسم الفيزياء – كلية التربية – جامعة البصرة – العراق

ISSN –1817 –2695

(الاستلام 2007/7/22 ، القبول 2007/10/21)

الملخص :

تم القيام بتقديم إيضاحات حول تأثير الانحياز والمسافة بين سطحين على طاقات ربط الحالات الالكترونية الصورية للمعدن Cu (111) . حيث وصفت المادة الصلبة بأنموذج تقريب الحزمتين للإلكترون شبه الحر وانموذج جهد مناسب يتحرك داخله الإلكترون خارج السطح.

لقد أخذت حالة الصورة من النوع S فقط واستنتج بانه كلما قلت المسافة بين السطحين يؤدي الى زيادة طاقة الربط لحالة الصورة، وهناك زيادة ونقصان في طاقة الربط عند زيادة الانحياز.

الكلمات المفتاحية:حالة الصورة،الانحياز ،المسافة بين سطحين،طاقة الربط،انموذج تقريب الحزمتين

المقدمة:

تعتبر التركيبات الالكترونية للسطوح النظيفة للمعادن النبيلة من اكثر المظاهر التي يتم دراستها في علم السطوح، وتعد بذلك مناسبة تماماً حيث يتواصل الكشف والبحث عن الظواهر والخصائص الجديدة. يوجد هناك مثالان يمثلان صور مدهشة لتأرجح الموجة الموجودة في مجاميع (Avouris) [1]و (Eigler) [2]والتجارب المميزة لـ (Hofer et al.,) [3] والتي تظهر ان الكترونات حالة الصورة (Image state) تخترق الفراغ بمئات الانكستروماتات.

زادت مؤخراً وبشكل كبير نتائج تجارب علم السطوح، حيث تم قياس تشتت حالات السطح (Surface state) بدقة غير مسبوقة من خلال (photo emission spectroscopy) [4] وعدة دراسات في STM (scanning tunneling microscopy) [5] ، توصلت الى نتائج ذات حلول ملحوظة زادت المعرفة بحالة الصورة بشكل هائل بفضل مطياف الليزر اللاخطي (nonlinear laser spectroscopy) [7,6] .

يمكن إيجاد سلسلة من حالات الصورة على سطوح معادن عديدة والتي تظهر نتيجة لإعادة توزيع الشحنة في اوطى مستوي استجابة للإلكترون القريب من السطح [8] . وعلى هذا فان القوة الكولومية الصورية تقود ايضاً الى سلسلة تشبه سلسلة ريدبرك الهيدروجينية لمستويات طاقة مقيدة والتي تعطى بالعلاقة الآتية [9] .

$$E = -\left(\frac{Z_{eff}^2}{32}\right) \Big/ n^2 \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (1)$$

والتي تتقارب باتجاه مستوي الفراغ (E =0) ،حيث ان الطاقة الرابطة لحالة جهد الصورة هي 16 مرة اقل من تلك لذرة الهيدروجين بسبب العامل الإضافي (Z_{eff} / 4) في حد الطاقة الكولومي.

وعلى هذا فانه يتوقع طاقة ربط عالية للحالة الصورية بمقدار (1/32) a.u=0.85 eV)) لسطوح المعادن .

حيث ان n عدد صحيح موجب و Z_{eff} هي الشحنة المؤثرة الصورية وتعطى بما يأتي [9].

PDF Created with deskPDF PDF Writer - Trial :: http://www.docudesk.com

$$Z_{eff}^2 = \frac{\in -1}{\in +1} \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (2)$$

وتمثل $\in$ ثابت العزل.

يمكن تحديد موقع حالة الصورة على مستوي السطح من خلال حل معادلة شرودنكر في بعد واحد مع إدخال جهد الانحياز:-

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{d^2}{dz^2} - \frac{1}{16\pi\varepsilon_o}\frac{e^2}{z} + U(z) - \mathrm{E}\right)\Psi_{IS} = 0 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(3)$$

حيث تمثل m_e كتلة الإلكترون، e شحنة الإلكترون، $\hbar$ هي ثابت بلانك مقسوم على 2π ، Ψ_{IS} الدالة الموجية لحالة الصورة ، E الطاقة التي يحتاجها الإلكترون لحدوث حالات الصورة، $U(z)$ الجهد القريب من السطح الذي يتحرك فيه الإلكترون.

النظرية:

لجهد دوري ضعيف تكون الدالة الموجية للمستويات هي عبارة عن مزج خطي لموجات مستوية بأعداد موجية K-g و K محملة بموجة مضمحلة باتجاه Z السالب (داخل المعدن) وبالشكل التالي [10].

$$\Psi_{(r)} = e^{qz+iK_\circ z+ik_{II}.r}(C_k + C_{k-g}e^{-igz})(Z < a) \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(4)$$

حيث ان K هو عدد موجي ومساوي لـ $2\pi / b$ و b ثابت الشبيكة و C_k و C_{k-g} ثوابت و g متجة الشبيكة المعكوسة.

ان المعاملات C_k و C_{k-g} تعين مباشرة باستخدام المعادلة المركزية.

$$(E - E_k^\circ)C_k - \sum_g V_g C_{k-g} = 0 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(5)$$

تمثل E طاقة ربط الإلكترون و V_g مركبة فورير

الانموذج المستخدم لسطح المادة الصلبة هو انموذج تقريب الحزمتين ضمن الإلكترون شبه الحر، وقد استخدمت حالة من حالات فجوة الطاقة لانموذج تقريب الحزمتين وهي التي تشبه الحالة من النوع S فتكون الدالة الموجية.

$$\Psi_{(z)} = Ae^{qz}\cos\left(\frac{2\pi}{b}z + \delta\right) \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(6)$$

وان $A=2G_{g/2}\, e^{-i\delta}$

$$q = \left[2\sqrt{V_g^2 + 4EE_g - 2(E + E_g)}\right]^{1/2} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(7)$$

حيث E_g الطاقة الالكترونية على حدود حاجز بريليون

$$\delta = 0.5\ \sin^{-1}(-2\pi q / bV_g) \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (8)$$

وللانموذج خارج السطح ($Z \geq 0$) تستخدم معادلة شرودنكر في بعد واحد لحساب طاقة ربط حالة الصورة لكن الان يتم ادخال عزم ثنائي القطب من خلال $U_I(Z)$ و $U_{II}(Z)$ وتصبح كالأتي [8]

$$U(z) = U_I(z) + U_{II}(z) - \frac{1}{4z} - \frac{1}{4(L-z)} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(9)$$

حيث تمثل L المسافة بين السطحين وكما موضحة في المخطط (1)و Z المسافة خارج السطح[8].

$$U_I(z) = \frac{(bias \times z)}{tipheight(bias)} \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (10)$$

$$U_{II}(z) = -\frac{(Pe)}{(4\pi\varepsilon_\circ z^2)} \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (11)$$

حيث pe هي عزم ثنائي القطب ويعطى بالعلاقة الآتية [8]:

PDF Created with deskPDF PDF Writer - Trial :: http://www.docudesk.com

$Pe = 0.13ea_0$ ..... (12)

حيث a_0 هي نصف قطر بور

وكل الحسابات كانت بالوحدات الذرية

النتائج والمناقشة:

لغرض مناقشة تأثير الانحياز وارتفاع القمة والمسافة بين سطحين على الحالات الالكترونية الصورية للمعدن Cu (111) حسبت طاقة ربط حالة الصورة لحالة فجوة الطاقة التي تشبه الحالة S ، اما قيم معاملات الانموذج لسطح Cu (111) فهي $E_g = 10.3$ eV و $V_g = 2.55$ eV .

تم في هذه الدراسة مناقشة معاملات الانموذج وتأثيرها على طاقة الربط للحالات الالكترونية الصورية وكما موضحة أدناه:-

1. **تأثير الانحياز (bias).**

لقيمة tip height = 1.6 A° ومسافة بين سطحين L = 35 A° فانه عند تغيير قيمة الانحياز (bias) الموضحة في الجدول (1) يؤدي الى نقصان وزيادة في طاقة الربط التي يحتاجها الإلكترون لحدوث حالات الصورة. والشكل (1) يوضح كثافة الحالات الموضعية

$P(Z)=|\Psi(Z)/\Psi(0)|^2$ (معايرة نسبة الى قيمتها عند Z=0) لحالات الصورة لقيم انحياز مختلفة ونلاحظ الاختلاف واضح نتيجة لاختلاف الانحياز.

2. **تأثير المسافة بين السطحين L.**

لقيمة انحياز bias = 3.5 eV و tip height = 1.6 A° تزداد طاقة الربط التي يحتاجها الإلكترون لحدوث حالات الصورة عندما تقل المسافة بين السطحين (حيث ان تناسب طاقة ربط الإلكترون مع المسافة تناسباً عكسياً) كما مبينة في الجدول (2).

3. **تأثير ارتفاع القمة (tip height).**

عندما تكون المسافة بين السطحين L = 35 A° وانحياز bias = 3.5 eV تقل طاقة الربط عند زيادة tip height أي ان تناسب طاقة الربط مع tip height تناسباً عكسياً وكما موضحة في الجدول (3). والشكل (2) يوضح تصرف الدالة الموجية الالكترونية عندما تتغير tip height .

وقمت بإيجاد طاقة الربط النظرية وقارنتها مع النتائج العملية للمصدر [8] وكما موضحة في الجدول (4) علماً بان القيمة العملية للتيار في هذه الحالة هي I = 0.8 nA وان أفضل قيم أعطت النتائج المطابقة هي عندما تكون قيمة الانحياز bias = 3.5 eV و tip height = 1.6 A° و المسافة بين السطحين L = 35 A° ، اذ حصلت على طاقة ربط للحالات الالكترونية الصورية مساوية الى 12.47285 eV في حالة فجوة الطاقة التي تشبه الحالة S و في حالة فجوة الطاقة التي تشبه الحالة P مساوية الى 12.45519 eV ، ولهذا فان قيم طاقة الربط في حالة فجوة الطاقة التي تشبه الحالة S تعطي نتائج أدق وأفضل من الحالة التي تشبه P.

PDF Created with deskPDF PDF Writer - Trial :: http://www.docudesk.com

جدول (1) يبين الطاقة التي يحتاجها الإلكترون لحدوث حالات الصورة لقيم انحياز مختلفة

Bias (eV)	E (eV)
2.5	11.774
3	11.1591
3.5	**12.47285**
4	9.03506
4.5	9.88715

جدول (2) يبين الطاقة التي يحتاجها الإلكترون لحدوث حالات الصورة لمسافات بين السطحين مختلفة

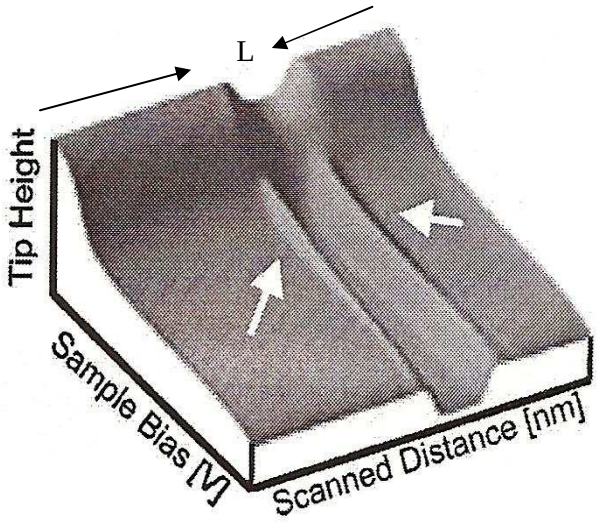
L (A°)	E (eV)
20	12.3607
25	12.4164
30	12.4501
35	**12.47285**

جدول (3) يبين الطاقة التي يحتاجها الإلكترون لحدوث حالات الصورة لقيم tip height متغيرة

Tip height (A°)	E (eV)
1.55	12.76080
1.6	**12.47285**
1.65	12.19943
1.7	11.93959

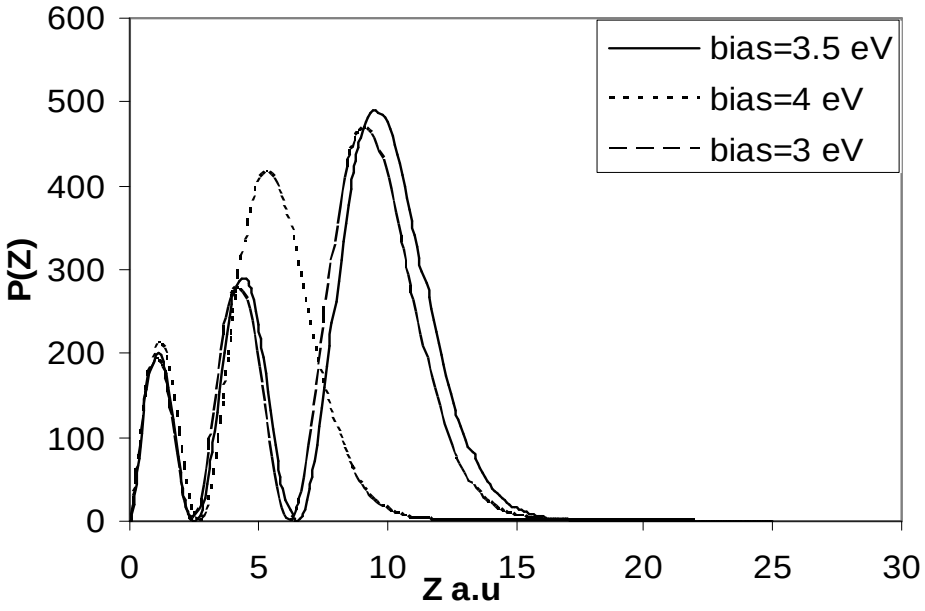
جدول (4) يبين الطاقة التي يحتاجها الإلكترون لحدوث حالات الصورة للقيم العملية في المصدر [8]

Bias (eV)	Tip height (A°)	L (A°)	E (eV)
4	2.25	40	10.7534
3	1.5	34	10.6796
3.5	**1.6**	**35**	**12.47285**
2.5	1.375	33	10.9091
2	1.25	32	9.9317

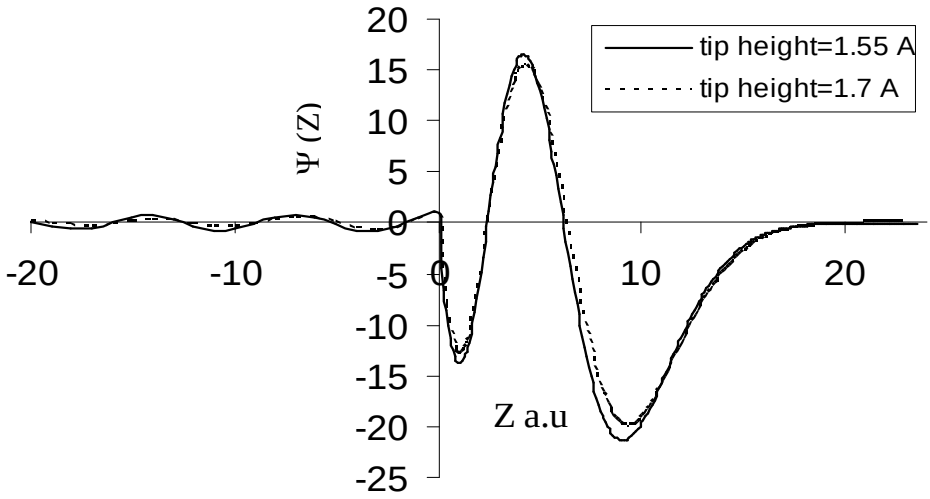


المخطط (1) : يبين شكل توضيحي وموضح عليه المسافة L بين السطحين

PDF Created with deskPDF PDF Writer - Trial :: http://www.docudesk.com

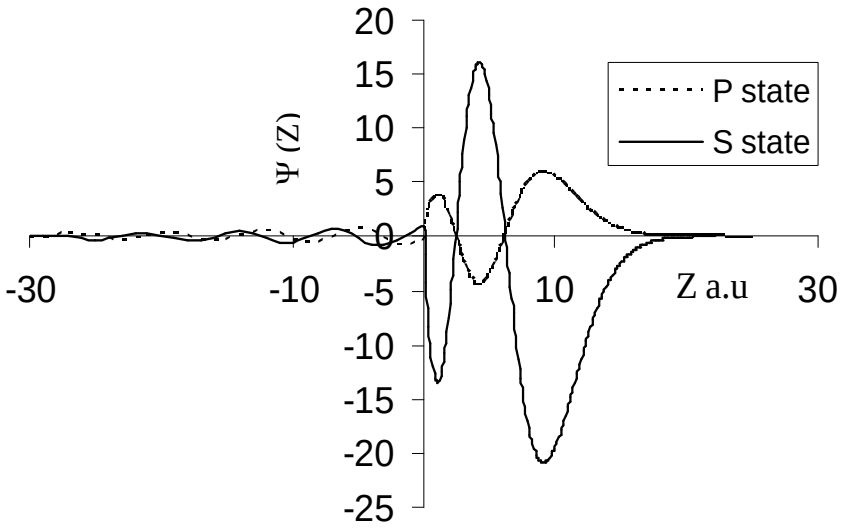


الشكل (1) كثافة الحالات الموضعية P(Z) لحالات الصورة S حيث يلاحظ تذبذب في قيمة P (Z) ولكن بنقصان P (Z) كلما اقتربت Z من الصفر



الشكل (2) الدالة الموجية لحالة الصورة وتأثرها بتغير tip height

PDF Created with deskPDF PDF Writer - Trial :: http://www.docudesk.com



الشكل (3) الدالة الموجية لحالتي الصورة من النوعين S و P

References

1. Y. Hasegawa and ph.Avouris, phys.Rev.Lett. 71, 1071 (1993).
2. M.F. Grommie , C.P. Lutz, and D.M. Eigler, Nature (London) 363, 524 (1993).
3. U.Hofer, A.Eiguren et al., phys.Rev.Lett.88, 066805 (2002).
4. R. paniago, R.Matzdorf, G.Meister,A.Goldmann, surf.sci.331-333, 1233 (1995).
5. J.T.Li et al., phys.Rev.Lett.81,4464 (1998).
6. E.Knoesel,A.Hotzel, and M.Wolf,phys.Rev.B57,12812 (1998).
7. S.Ogawa et al., phys. Rev. Lett. 78, 1339 (1997).
8. L-Bartel et al., phys. Rev. B67, 205416 (2003).
9. D.straub and F.J. Himpsel, phys. Rev. B33, 2256 (1986).
10. C.Kittel Introduction to Solid State Physics sixth edition p 529 (1986).

Abstract

An explanations about the effect of the bias and distance between two surfaces on the image electronic states binding energies for the metal Cu (111) are presented. Where the solid is described by the two-band approximation for semi- free electron model and the suitable potential model that the electron move outside the surface. Image state of the type S has been taken only, and we conclude that the image binding state energy increases as the distance between the surfaces decreases, and there is a relatively increase / or decreasing with increase of bias.

PDF Created with deskPDF PDF Writer - Trial :: http://www.docudesk.com