تأثير درجة الحرارة على طاقات الربط للحالات الإلكترونية السطحية والصورية للمعدن Cu (111)

جبار منصور خلف

فزل طفصيبئ؟ / تكي بطكة ظي ب / جئ لع بطك ا شنب / طعجف

الإرسال 2005/7/13, القبول 2005/10/23

طك لكخ ش:-

في هذا البحث تم تقديم إيضاحات مهمة حول تأثير تغير درجة الحرارة (1000K-300)على طاقات الربط للحالات الإلكترونية السطحية والصورية للمعدن Cu (111) .حيث وصفت المادة الصلبة بأنموذج تقريب الحزمتين للإلكترون شبة الحر والانموذج المقترح من قبل Khalef [1] للمنطقة خارج السطح. لقد آخذت حالة الصورة من النوعين (S و P)بنظر الاعتبار ولوحظ انه كلما زادت درجة الحرارة للسطح تقل طاقات الربط.

طاقة ربط ، حالات السطح والصورة ، دالة الشغل ، درجة الحرارة ، أنموذج تقريب الحزمتين

طك لوخ لب:-

يعرف السطح الصلب البلوري بصورة عامة بأنه عدد محدود من الطبقات الذرية الخارجية (ثلاث طبقات تقريبا) والتي تختلف بوضوح عن داخل الصلب [2] وقد يكون السطح نظيفاً او يحتوي على شوائب .ان انتهاء المادة الصلبة بسطح يغير من عدد الإحداثيات لذرات السطح مقارنة مع الذرات داخل الصلب وهذا يؤدي الى تعديلات مهمة في التركيب الإلكتروني (حالات السطح) [3] .ان لدالة الشغل دوراً أساسياً ومهما في وصف ظواهر عديدة منها جهود الاتصال والانبعاث الحراري والتأثير الكهروضوئي . كما أن لجهد الصورة الكلاسيكي دوراً مهما في مجال فيزياء السطح [4] . وان شكل جهد الصورة يرتبط بنظام بجهد السطح[5]. ان الاختلاف بين الحالات الإلكترونية للسطح وداخل الصلب هي ان درجات حرارة ديباي للسطح تكون أوطأ من قيمتها داخل الصلب بسبب عدد الإحداثيات المتناقصة لذرات السطح. ونتيجة لذلك فان خواص السطح تميل الى الاستجابة للارتفاع في درجة الحرارة . وتكون حساسة اكثر بهذا الارتفاع من الانتقالات المباشرة داخل الصلب[3].

تنشأ حالات السطح [6] بين حاجز الجهد وسطح البلورة نتيجة الانعكاس المتعدد للإلكترون ، وذلك لان الإلكترون يرى صورته في الجهة الأخرى للسطح عند الحاجز ويعود للسطح بتأثير قوة جذب كولوم ويبقى قريبا من السطح وذلك لان متجه موجته يكون ضمن حيز بريليون .وهناك شرطان يجب ان يتحققا لحدوث حالات السطح[7] .

أولهما هو $\Phi_c + \Phi_B = 2\pi n$.....(1)

وثانيهما $r_c = r_B = 1$ .....(2)

حيث ان r_c و Φ_c يمثلان معامل انعكاس وطور انعكاسية البلورة

و r_B و Φ_B يمثلان معامل انعكاس وطور انعكاسية الحاجز.

n: عدد صحيح موجب

الأنموذج النظري :

ان الأنموذج الإلكتروني لسطح المادة الصلبة المستعمل في هذا البحث هو أنموذج تقريب الحزمتين ضمن الإلكترون شبه الحر [6] .وانموذج جهد مقترح من قبل Khalef [1] يتحرك بداخله الالكترون.

هناك حالتان لفجوة الطاقة لانموذج تقريب الحزمتين للإلكترون شبة الحر هما.

أ – حالة فجوة الطاقة تشبة الحالة من النوع S [2]. فتكون الدالة الموجية

$$\psi(Z) = 2C_k e^{-i\delta} e^{qZ}\left[\cos\left(\frac{g}{2}Z+\delta\right)\right] = Ae^{qZ}\cos\left(\frac{2\pi}{b}Z+\delta\right) \quad \text{.....(3)}$$

حيث ان $A = 2C_{g/2}e^{-i\delta}$ و $k = \frac{g}{2} = \frac{2\pi}{b}$ و b يمثل ثابت الشبكة و k العدد الموجي.

و g هو متجه الشبيكة المعكوسة و $C_{g/2}$ ثابت

ب – حالة فجوة الطاقة تشبه الحالة من النوع P [2]

$$\psi(Z)=2iC_{g/2}e^{-i\delta}e^{qZ}\left[\sin\left(\frac{g}{2}Z+\delta\right)\right]=Be^{qZ}\sin\left(\frac{2\pi}{b}Z+\delta\right)\ldots\ldots\ldots\ldots(4)$$

حيث ان

$$B=2iC_{g/2}e^{-i\delta}$$

وكذلك

$$\delta=0.5\sin^{-1}(-2\pi q/bV_g)\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(5)$$

وان V_g تمثل مركبة فورير

$$q=\left[2\sqrt{V_g^2+4\varepsilon E_g}-2(\varepsilon+E_g)\right]^{1/2}\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(6)$$

تمثل ε طاقة ربط الإلكترون و $E_g=\frac{1}{2}\left(\frac{g}{2}\right)^2$ الطاقة الالكترونية على حدود حاجز بريليون

وللأنموذج خارج السطح ($Z \geq 0$) تم تقسيم المنطقة الى منطقتي جهد وذلك لان تصرف الجهد مع المسافة Z في المنطقة القريبة من السطح غير معروف تماما ولغاية النقطة $Z = Z_i$ (حيث ان $Z_i > Z_o$)، ولقيم $Z > Z_i$ يظهر تأثير الجهد الصوري وكالأتي [1].

$$U(Z)=\begin{cases}GZ^m+A & 0\le Z\le Z_i\\ U_o-\dfrac{g(\in)}{4(Z-Z_o)}+\dfrac{2}{\in+1}\dfrac{1}{4(Z-Z_o+t)} & Z>Z_i\end{cases}\qquad\ldots\ldots\ldots(7)$$

حيث G مقدار ثابت والموقع $Z = Z_o$ يمثل مرجع المستوي لصورة الجهد و Z=0 هو موقع سطح البلورة ، Z_i يمثل موقع مستوي الصورة، U_o طاقة مستوي الفراغ مقاسه نسبة الى قعر الحزمة ، t سمك المادة العازلة على سطح المعدن والثابت A يحقق الشرط الحدودي U(Z=0)=0 .

وان $g(\in)$ هي دالة الاستقطابية الكهربائية التي تعطى بالعلاقة[8]

$$g(\in)=\frac{\in-1}{\in+1}\qquad\ldots\ldots\ldots\ldots(8)$$

حيث ∈ ثابت العزل. اما طاقة مستوي الفراغ [9] فتعطى بالعلاقة التالية .

$$U_o=E_g-V_g+\phi+\varepsilon_F\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(9)$$

حيث يعرف ε_F مستوي فيرمي و ϕ دالة الشغل التي تعطى بالعلاقة التالية [10]

$$\phi=\phi_o-(8*10^{-5})*T\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(10)$$

حيث T درجة الحرارة و ϕ_o دالة الشغل عند درجة حرارة الغرفة .

النتائج والمناقشة:

لغرض مناقشة تأثير درجة الحرارة على الحالات الإلكترونية السطحية والصورية وللمعدن(111) Cu حسبت طاقات الربط لحالة الصورة S1 و P1 وذلك بواسطة تغير الطاقة بحيث تتصرف دالة الموجة تصرف الحالة المعنية وتتلاشى في المالانهاية كما هو مطلوب فيزياوياً. اما قيم معاملات الأنموذج لسطح Cu (111) فهي $\phi = 4.74$ eV و E_g = 10.3 eV و V_g = 2.55 eV و ε_F =0.85 eV [7] . بلغت قيم موقع مستوي الصورة Z_o لحالة الصورة S1 1.985 a.u [1] ولحالة الصورة P1 0.174 a.u [1] وفيما يأتي سيتم مناقشة الحالتين الآتيتين:-

أ – حالة فجوة الطاقة تشبه الحالة من النوع S.

لحساب تأثير الجهد الصوري تم تعويض m = 1 و t = 0. و g (∈)=1. في معادلة (7) وبتغير درجة الحرارة T كما في الجدول (1) مع العلم ان درجة انصهار المعدن 1356 K . ومن المعروف ان دالة الشغل للمعدن تتغير اما بزيادة درجة حرارة السطح أو عند التصاق ذرات غريبة عليه، وكما هو واضح من المعادلتين (9,10) فان زيادة درجة الحرارة تؤدي الى نقصان دالة الشغل وبالتالي نقصان U_o كما ان طاقة الربط التي يحتاجها الإلكترون لحدوث حالات الصورة تقل أيضاً (حيث تتناسب طاقة ربط الإلكترون مع دالة الشغل تناسباً طردياً) وكما هو موضح بالشكل (1) . من الجدير بالذكر ان العلاقة (10) خاصة بالمعدن Cu(111) حيث يلاحظ من الجدول (1) ان زيادة درجة الحرارة يؤدي الى زيادة عرض منطقة الجهد الأولى Z_i ونقصان الثابت G .

يبين الشكل (2) تغير دالة الموجة Ψ(z) مع z (a.u) عند درجة حرارة 750 K وللحالة S1. ويوضح الشكل (3) كثافة الحالات الموضعية $P(Z)=|\psi(Z)/\psi(0)|^2$ (معايرة نسبة الى قيمتها عند Z=0) للحالةS1.اما الشكل (4) فيمثل مقارنة بين درجتي حرارة لتغير كثافة الحالات الموضعية مع Z حيث يلاحظ تقدم سعة كثافة الحالات باتجاة السطح عند زيادة درجة الحرارة، وان سبب اختفاء حالات السطح في هذه الحالة هو قيمة Z_o.

ب – حالة فجوة الطاقة تشبه الحالة من النوع P.

ان قيم معاملات حالة فجوة الطاقة تشبه الحالة من النوع P هي نفس قيم المعاملات المأخوذة في الحالة S ماعدا قيمة Z_o مذكورة سابقاً ولكن الملاحظ في هذه الحالة ان دالة الشغل و U_o هي نفس القيمه في الحالة S ماعدا Z_i والذي تكون قيمته تقريباً ثلث ما كانت علية في الحالة التي تشبه S ، أما G فتكون قيمتها اكبر مما كانت عليه في الحالة S وهذا يعود الى ابتعاد الكثافة الإلكترونية عن السطح بالنسبة لـ P مما يزيد من عزم ثنائي القطب ومن ثم المجال الكهربائي وكما موضح في الجدول (2).

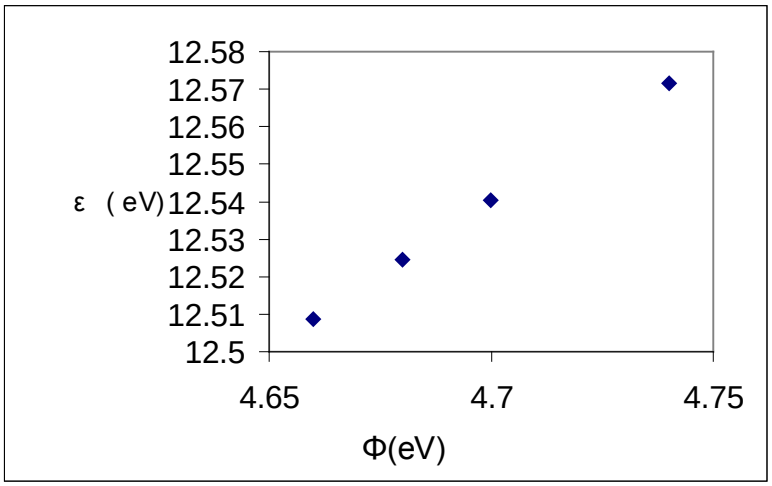
الشكل (5) يبين تغير دالة الموجة Ψ(z) مع z (a.u) عند درجة حرارة الغرفة وللحالة P1 . اما الشكل (6) فيوضح مقارنة في كثافة الحالات الموضعية عند درجتي حرارة (300,1000K) حيث يلاحظ انخفاض سعة كثافة الحالات باتجاة السطح عند زيادة درجة الحرارة. عند التعامل مع حالة فجوة الطاقة التي تشبة النوع P فانه لا وجود لحالة السطح لان تموقع مثل هذا النوع يكون بعيدا عن السطح.

جدول (1) : يبين طاقات الربط للحالة S1 ودالة الشغل وطاقة مستوي الفراغ

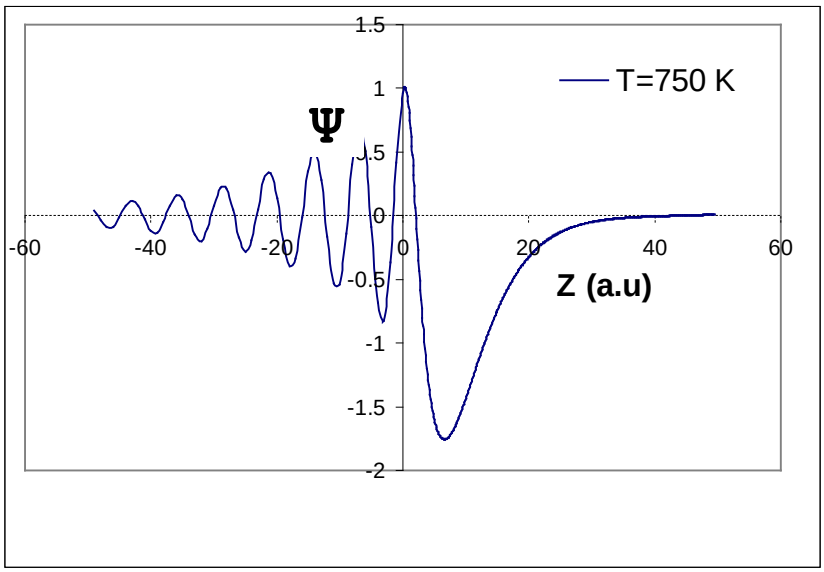
T (K)	ε (eV)	G (a.u)	Z_i (a.u)	U_o (a.u)	ϕ (eV)
300	12.57166	9.319×10^{-2}	3.622	0.49026	4.73999
500	12.54032	9.278×10^{-2}	3.6264	0.48879	4.69999
750	12.52449	9.258×10^{-2}	3.6282	0.48805	4.67999
1000	12.50857	9.23×10^{-2}	3.630	0.48732	4.6599

جدول (2) : يبين طاقات الربط للحالة P1 ودالة الشغل وطاقة مستوي الفراغ

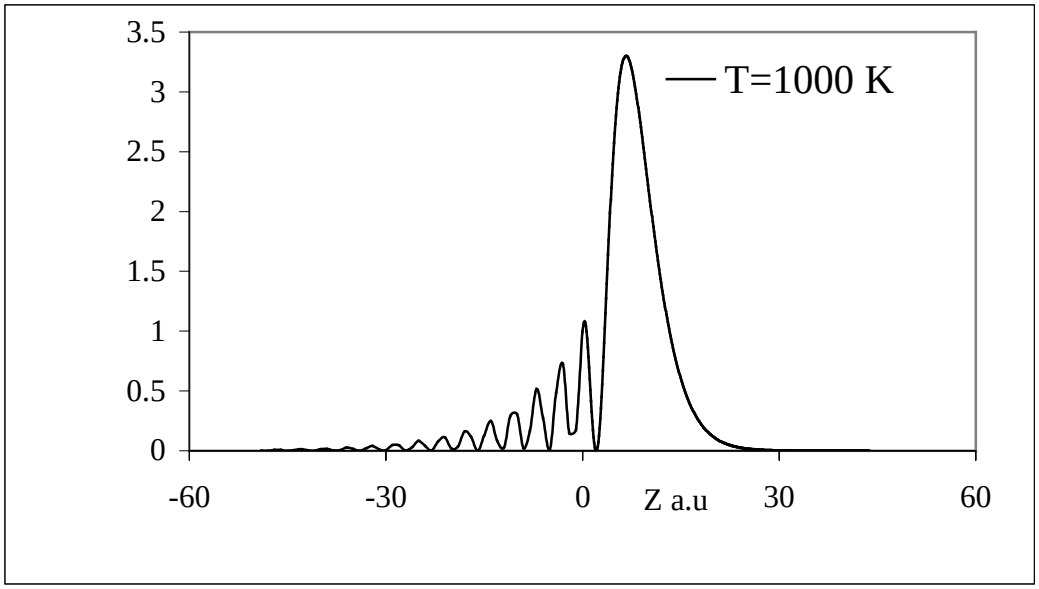
T (K)	ε (eV)	G (a.u)	Z_i (a.u)	U_o (a.u)	ϕ (eV)
300	12.56429	2.06×10^{-1}	1.27449	0.49026	4.73999
500	12.5315	2.05×10^{-1}	1.27757	0.48879	4.69999
750	12.51495	2.04×10^{-1}	1.27912	0.48805	4.67999
1000	12.49831	2.041×10^{-1}	1.28067	0.48732	4.6599



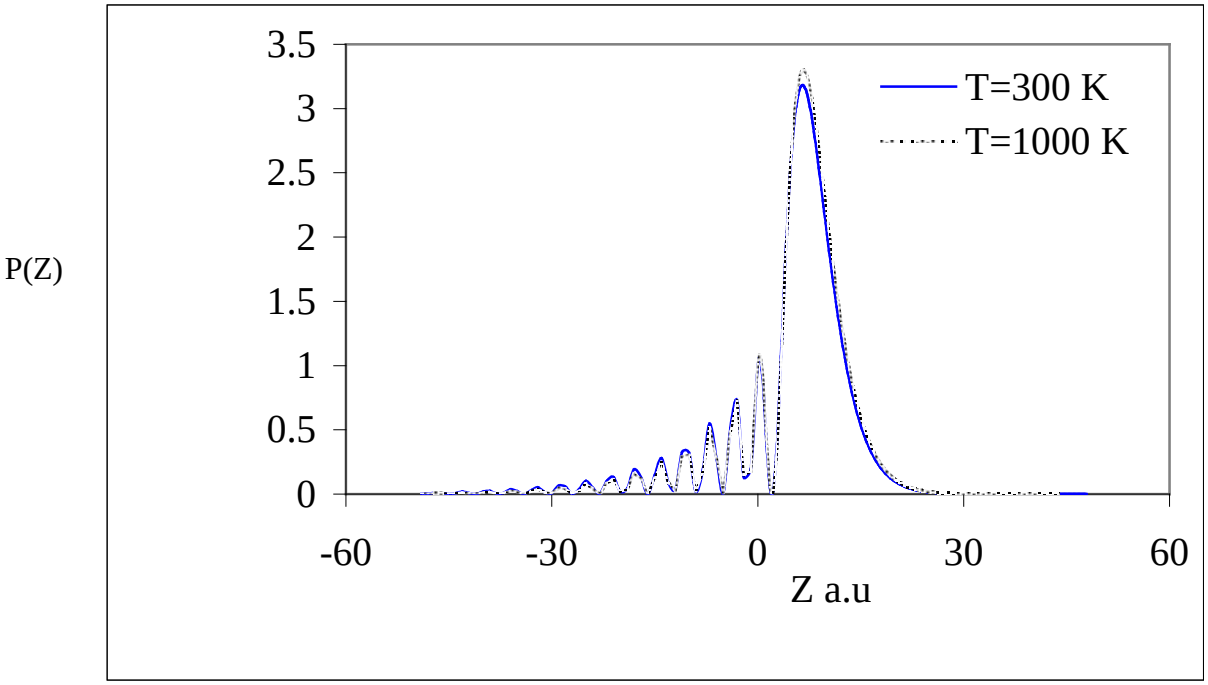
الشكل (1) العلاقة بين طاقة الربط ودالة الشغل



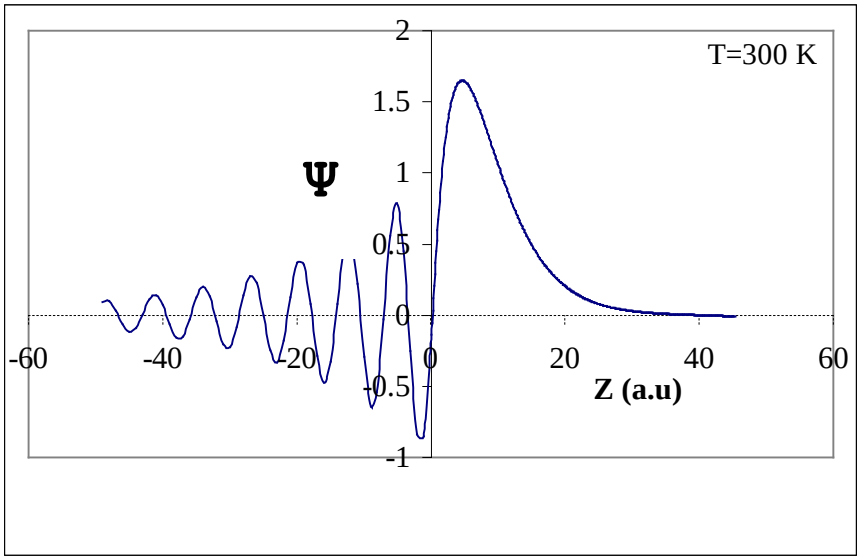
الشكل (2) الدالة الموجية للحالة S1



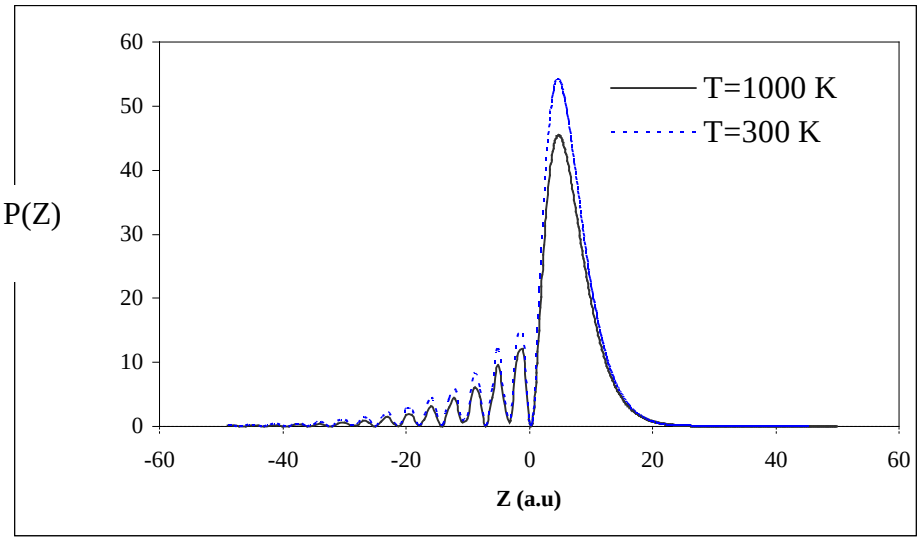
الشكل (4) كثافة الحالات الموضعية P(Z) للحالة S1



الشكل (4) مقارنة بين درجتي حرارة لكثافة الحالات الموضعية P(Z) للحالة S1



الشكل (5) الدالة الموجية للحالة P1



الشكل (6) مقارنة بين درجتي حرارة لكثافة الحالات الموضعية P(Z) للحالة P1

المصادر

1. Jabbar M.Khalef. Thesis , Basrah , Iraq, 2000.
2. Kittel in introduction to Solid State Physics sixth edition p 529 (1986).
3. V. Dose, Physica Scriptea. 36, 669 (1987).
4. Hong Sun and Shi-Wei Gu, Phys. Rev. B 41, 3145 (1990).
5. M. N. Read, and A.S. Christopoulos, Surf. Sci. 73, 116 (1993).
6. N. V. smith, Phys. Rev. B 32, 3549 (1985).
7. P. M. Echenique and J. B. Pendry, J. Phys. 11, 2065 (1978).
8. D. Straub and F. J. Himpsel, Phys. Rev. B 33, 2256 (1986).
9. P.M. Echeniqe and J.B. Pendry, Prog. Surf. Sci . 32, 111 (1990)
10. A.modinos in Field , Thermionic , and secondary Electron Emission spectroscopy New York 1984.

Abstract

An important illustrations had been introduced in this research about the effect change of temperature (300-1000K) on the surface and image electronic states binding energies for the Cu (111) . Where the solid is described by the two – band approximation for semi – free electron model and the model suggested by Khalef [1] for the region outside the surface. The image states of both types S and P are also taken in two accounts. It was noticed that whenever temperature surface increases binding energy will be less.