

دراسة تأثير تسليط مجال كهربائي خارجي مع تغير درجة حرارة السطح
على طاقات الربط للحالات الإلكترونية السطحية والصورية للمعدن
Cu (111)

جبار منصور خاف

قسم الفيزياء - كلية التربية - جامعة البصرة - العراق

الملخص

في هذا البحث تم تقديم إيضاحات مهمة حول تأثير تسليط مجال كهربائي خارجي م-ع تغير درجة حرارة السطح على طاقات الربط للحالات الإلكترونية السطحية والصورية للمعدن Cu(111). حيث وصفت المادة الصلبة بأنموذج تقريب الحزمتين للإلكترون ش-ب الح-ر [1] وأنموذج جهد مقترح من قبل Khalef [2] يتحرك داخله الإلكترون خارج السطح. وقد درست حالاتي الصورة من النوعين (S و P) واستنتجنا بان للمجال الكهربائي تأثير على طاقات الربط بتغير درجة الحرارة حيث اختلفت حالات الصورة عند $eF \geq 0.03$ eV لمدى درجات الحرارة من درجة حرارة الغرفة الى 1000 K.

كلمات المفاتيح:

مجال كهربائي ، حالات السطح والصوره ، طاقة ربط ، درجة الحرارة ، أنم-وذج تقري-ب الحزمتين

Abstract

An important illustrations had been introduced in this research about the effect of applying external electric field with the change of surface temperature on the image electronic states binding energies for Cu (111) . Where the solid is described by the two – band approximation for semi – free electron model [1] and the potential model suggested by Khalf [2] that the electron move outside the surface. The two types of image state (S,P) are studied and we concluded that the applied electric field when changing temperature made the image states diminishes when $F \geq 0.03$ eV for temperature range from room temperature up to 1000 K.

المقدمة

ان موجة الإلكترون عند سطوح بعض المعادن الانتقالية ربما ينعكس ذهباً وإلياً بين حاجز السطح وجهد البلورة داخل الصاب الذي يفود الى حالات صورة الكترونية حفيفة اذا وقع داخل فجوة الطاقة او الرنين اذا وقع خارج فجوة الحزمة [3]. ان الدوال الموجية الإلكترونية لا تحتاج الى ان تمتلك صفة الدورية باتجاه عمودي على السطح [4] مما يعطي احتمالات إلكترونية ممنوعة في البلورة غير المتناهية. ومثل هذه الحالات تدعى رنينات السطح او حالات السطح (Surface States) .

هناك حالات تكون الموجة فيها متوقعة أقرب ما يكون الى سطح البلورة فان حالة أو رنين يمكن تسميتها بحالة حاجز سطح محتنة للبلورة أو كما تسمى بحالة شوتكي أو حالة رنين. الحالات الكمية المتمثلة بدوال الموجة القريبة الى جزء الجهد الصوري الموضح بالعلاقة (1) من حاجز السطح تدعى بحالات الصورة المحتنة .

$$V_{im} = Z_{eff} / 4(Z - Z^0) \quad (1)$$

حيث تمثل Z_{eff} عامل حجب الشحنة المؤثرة و Z^0 هي نقطة أصل مستوي الصورة . هناك دراسات عملية عديدة في هذا الموضوع ففي السنوات الأخيرة تم الحصول على معلومات عملية مهمة وكبيرة حول طاقات الربط والكتلة المؤثرة للحالات غير المملوءة لسطوح كـ لـ مـ نـ Cu و Ni و [5-10]. وفي مطياف STM (Scanning Tunneling Microscopy) شوهدت تذبذبات توصيلية النفق عند تسليط جهد انحياز كنتيجة لظهور حالات رنينية إلكترونية بين الأقطاب [11]. وتنبؤات نظرية [12-13] على وجود حالات صورة رنينية عند سطوح بعض المعادن البسيطة والكثير تحديدا لكل المعادن قرب مستوي الفراغ (حيث تظهر حالات الصورة دائماً).

النموذج النظري

ان طاقة الجهد ودالة الموجة للإلكترون داخل الصاب عند النقطة Z -ع- ادة تكتب كمتسلسلة فوريير [1] وكالاتي

$$V(Z) = \sum_g V_g e^{igZ} \quad \dots\dots\dots (2)$$

حيث ان V_g مركبة فوريير و g هو متجه الشبكة المعكوسة

$$\psi(Z) = \sum_k C_k e^{ikZ} \quad \dots\dots\dots (3)$$

حيث ان $k = 2\pi / b$ وهو عدد موجي و b ثابت الشبكة و C_k ثابت

لأنموذج الإلكترون المستخدم في هذا البحث هو أنموذج تقريبي الحزمين ضمن الإلكترون شبه الحر [1] لسطح المادة الصلبة حيث هناك حالتين فجوة طاقة هما حالة فجوة الطاقة تشبه الحالة من النوع S وحالة فجوة الطاقة تشبه الحالة من النوع P . اما للمنطقة خارج السطح فقد استخدم الأنموذج المقترح من قبل Khalf [2].

تأثير مجال كهربائي منتظم مع تغير درجات الحرارة

المخطط (1) يوضح الجهد بالجوار للسطح في حالة عدم وجود تأثير للمجال الكهربائي. أما عند تسليط مجال كهربائي خارجي شدته منتظمة مقدارها F على سطح معدن فان هذا يؤدي الى انخفاض حاجز الجهد خارج سطح المعدن نتيجة الحد الإضافي $(-eFZ)$ هذا الحد يضاف للجهد في المنطقة $Z > 0$. وإذا كان السطح مغطى بطبقة من الذرات الملتصقة سمكها t وثابت عزلها ϵ فانه يجب إضافة حد للجهد في المنطقة $Z > 0$ مقداره $(-eFt/\epsilon)$ [14]. وعلى هذا فان حاجز الجهد الكلي في جهة الفراغ من السطح يعطى كالاتي:-

$$U(Z) = GZ^m - eFZ - \frac{eF}{\epsilon} + A \quad 0 \leq Z \leq Z_i \quad \dots (4-1.1)$$

$$= U_0 - \frac{g(\epsilon)e^2}{4(Z-Z_0)} - \frac{2}{\epsilon+1} \frac{e^2}{4(Z-Z_0+t)} - \frac{eF}{\epsilon} - eFZ \quad Z > Z_i \quad \dots (4-1.2) \quad (4)$$

$$A = \frac{eFt}{\epsilon} \quad \text{حيث ان،}$$

و eF هو شدة المجال الكهربائي و G مقدار ثابت و t السمك و Z_0 يمثل مرجع لمس-توي لصورة الجهد و ϵ ثابت العزل. ونلاحظ من النموذج السابق بان المجال الكهربائي ي-ؤثر عند $0 \leq Z \leq Z_i$ و $Z > Z_i$ اما بالنسبة الى درجة الحرارة فهي تؤثر على طاقة مستوي الف-راغ U_0 حسب المعادلات.

$$\phi = \phi^0 - (8 \cdot 10^{-5}) * T \quad \dots (5)$$

$$U_0 = E_g - V_g + \phi + \epsilon_F \quad \dots (6)$$

حيث T درجة الحرارة و ϕ^0 تمثل دالة شغل المعدن و ϵ_F مستوي فيرمي

النتائج والمناقشة

لأجل مناقشة تأثير المجال الكهربائي على الحالات الإلكترونية السطحية والصورية للمعدن Cu (111) ولدرجات حرارة مختلفة، حسب طاقات الربط لحالة الصورة لحالي فجوة الطاقة التي تشبه الحالة S والحالة P. عند $t=0$ و $\epsilon=\infty$ و $m=1$ وللمعلمات الاتية: $\phi = 4.74 \text{ eV}$ و $E_g = 10.3 \text{ eV}$ و $V_g = 2.55 \text{ eV}$ و $\epsilon_F = 0.85 \text{ eV}$ [وهذه المعلمات مأخوذة من المصدر [15]]. وكذلك لقيمة Z^0 فهي لحالة الصورة $n1$ التي تشبه النوع S كانت $Z^0 = 1.985 \text{ a.u}$ ولحالة الصورة $n1$ التي تشبه النوع P فقد كانت $Z^0 = 0.174 \text{ a.u}$. حيث غيرنا شدة المجال الكهربائي eF من 0.002 - 0.02 eV ودرجات حرارة مختلفة ابتداءً من درجة حرارة الغرفة الى 1000 K . تم أستعرض هذه الطاقات بالجدولين (1) و (2) وم-ن ملاحظتها يمكن تثبيت ما يلي :-

1. طاقة الربط لحالة الصورة من النوع S تقل بزيادة شدة المجال الكهربائي eF وعلى مدى من درجات الحرارة مختلفة أي ان العلاقة عكسية بينهما والشكل (1) يوضح هذه العلاقة. أما بالنسبة للشكل (2) يوضح كيفية تأثير الدالة الموجية $\Psi(z)$ للحالة S بتغير شدة المجال الكهربائي ودرجة حرارة K 500 حيث تلاحظ ان سعتها تكون أقل وقمتها اقرب للسطح عما كانت عليه سابقاً.

2. أما بالنسبة لطاقة الربط من النوع P فنلاحظ علاقتها العكسية مع شدة المجال الكهربائي ، والشكل (3) يوضح كيفية تأثير الدالة الموجية $\Psi(z)$ للحالة P بتغير شدة المجال الكهربائي ودرجة حرارة K 500 حيث تلاحظ انه كلما زادت شدة المجال الكهربائي زادت سعة الدالة الموجية وابتعدت عن السطح ، والشكل (4) يمثل الاختلاف بين دوال الموجة للحالة S والحالة P ولمجال كهربائي شدته واطئه ودرجة حرارة K 500 ونلاحظ فيه ابتعاد سعة الدالة الموجية عن السطح للحالة S اكثر مما هو عليه للحالة P.

3. ان الالكترون يستقر لحالة الصورة عند شدة مجال كهربائي $eF=0.02$ eV ولا درجتي درجة حرارة الغرفة ودرجة K 1000 على طول المحور Z باتجاه الفراغ وهذا لمحور هو الحد الفاصل بين الغشاء والفراغ والشكل (5) يوضح هذا الاستقرار عند درجة حرارة الغرفة.

الاستنتاج

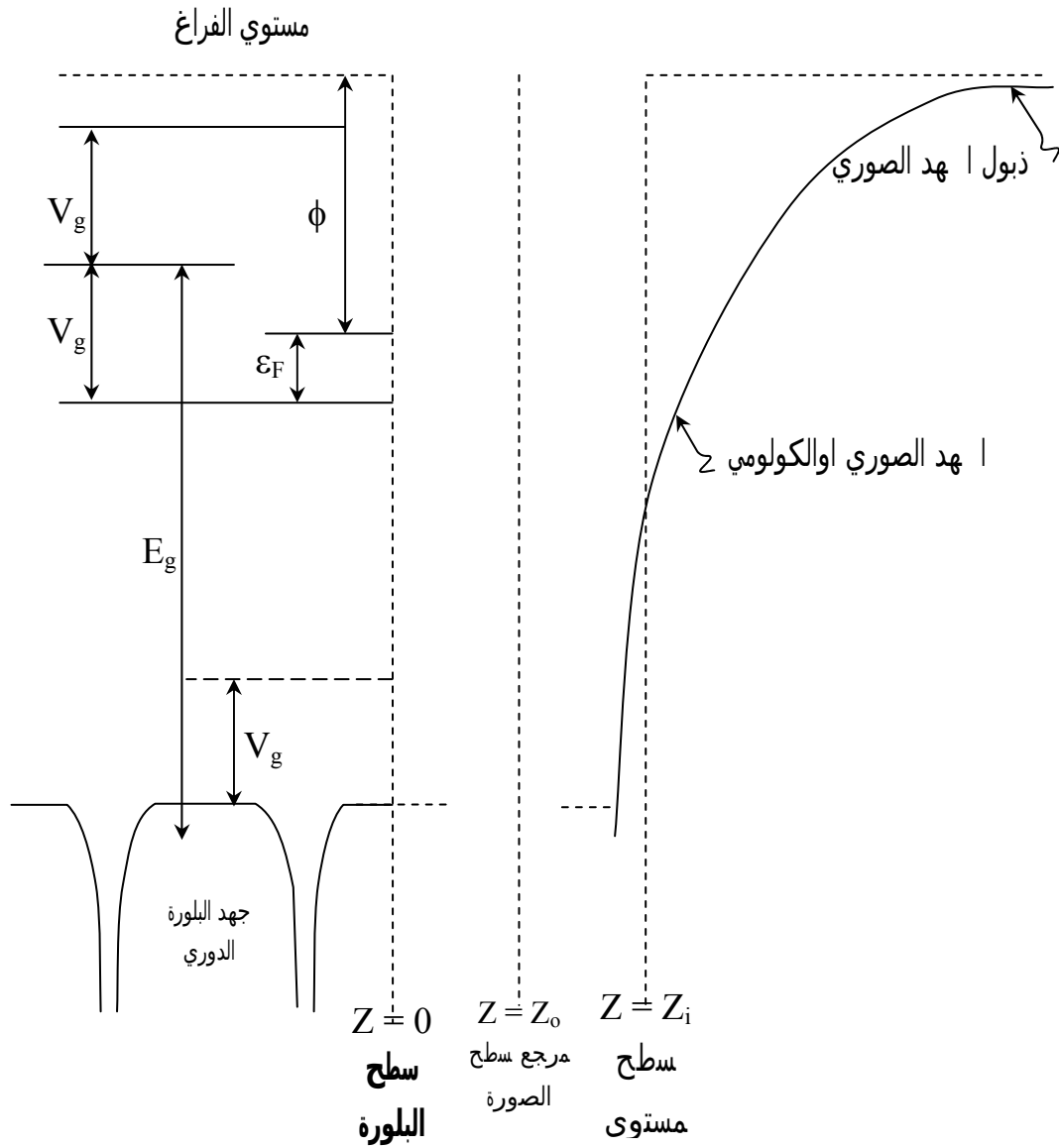
1. اختفاء حالات الصورة عند $eF \geq 0.03$ eV لحالتي الصورة S و P لكافة درجات الحرارة.
2. لهذا البحث أهمية أكاديمية لغرض تحديد السطح الملائم وذلك لظهور واختفاء حالات الصورة عند قيمة معينة من شدة المجال الكهربائي ولكافة درجات الحرارة والاستفادة منه تطبيقياً.

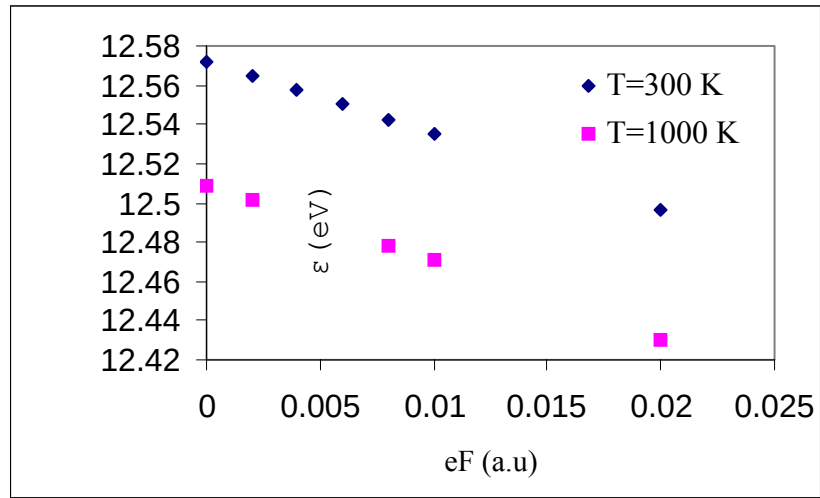
جدول (1) : يبين طاقات الربط للحالة S1 ولمجال كهربائي ودرجة حرارة متغيرتين

eF (eV)	T=300 (K) ϵ (eV)	T=500 (K) ϵ (eV)	T=7500 (K) ϵ (eV)	T=1000 (K) ϵ (eV)
0	12.57166	12.54032	12.52449	12.50857
0.002	12.56452	12.53302	12.51712	12.50112
0.004	12.5573	12.52564	12.50966	12.49359
0.006	12.54999	12.51817	12.50212	12.48597
0.008	12.54259	12.51064	12.49448	12.47829
0.01	12.53509	12.50295	12.48675	12.47045
0.02	12.49605	12.46311	12.44653	12.42985

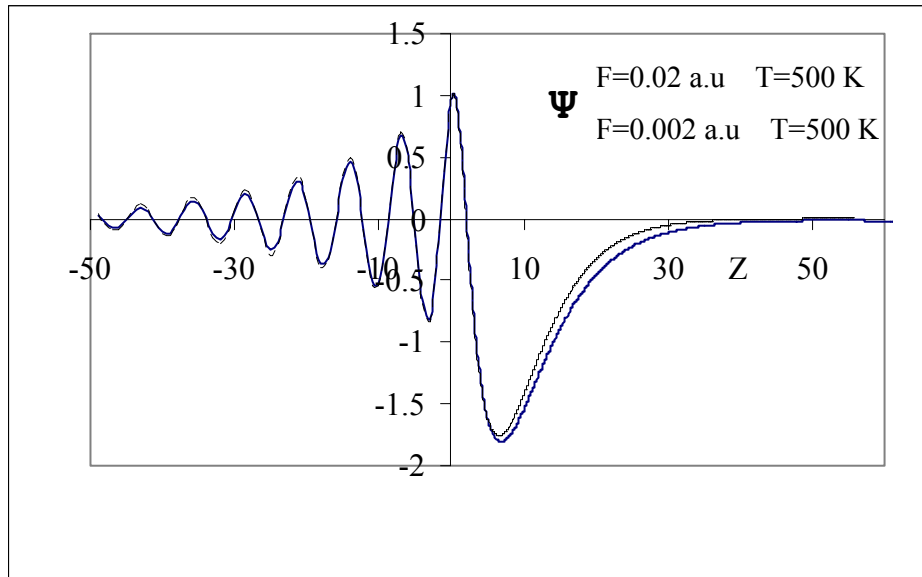
جدول (2) : يبين طاقات الربط للحالة p1 ولمجال كهربائي ودرجة حرارة متغيرتين

eF (eV)	T=300 (K) ϵ (eV)	T=500 (K) ϵ (eV)	T=7500 (K) ϵ (eV)	T=1000 (K) ϵ (eV)
0	12.56429	12.5315	12.51495	12.49831
0.002	12.55482	12.52551	12.50890	12.49219
0.004	12.55249	12.51944	12.50277	12.48601
0.006	12.54649	12.51331	12.49658	12.47976
0.008	12.54041	12.5071	12.49031	12.47344
0.01	12.53426	12.50081	12.48397	12.46704
0.02	12.50224	12.46817	12.45101	12.43378

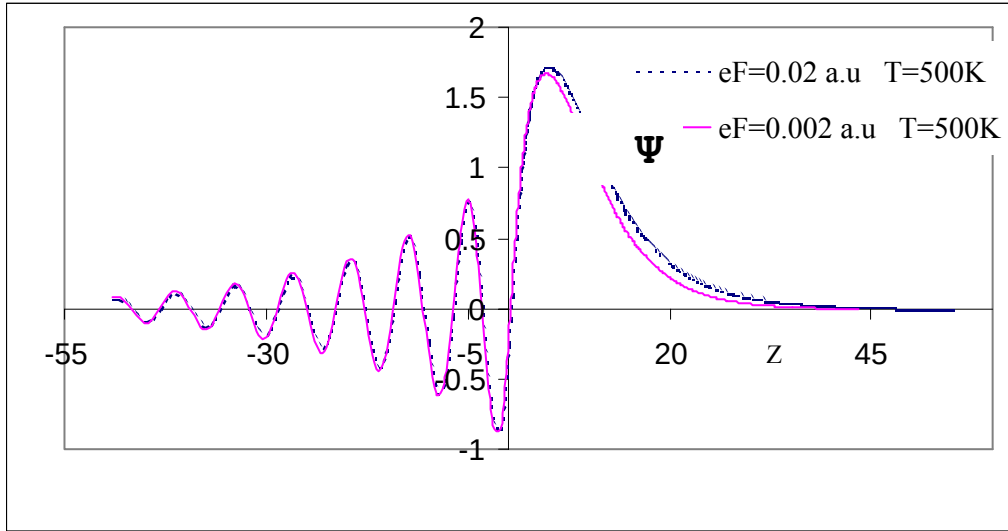




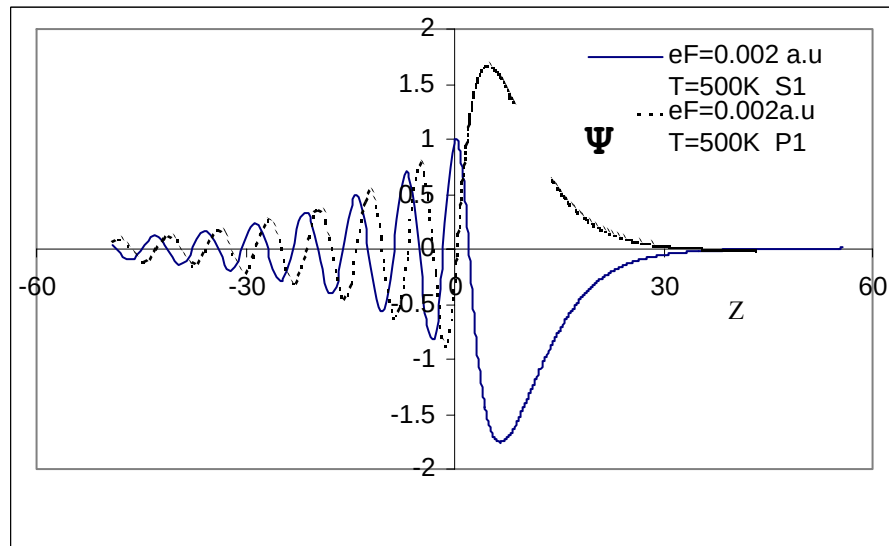
الشكل (1) العلاقة العكسية بين المجال الكهربائي وطاقة الربط ودرجتين مختلفتين



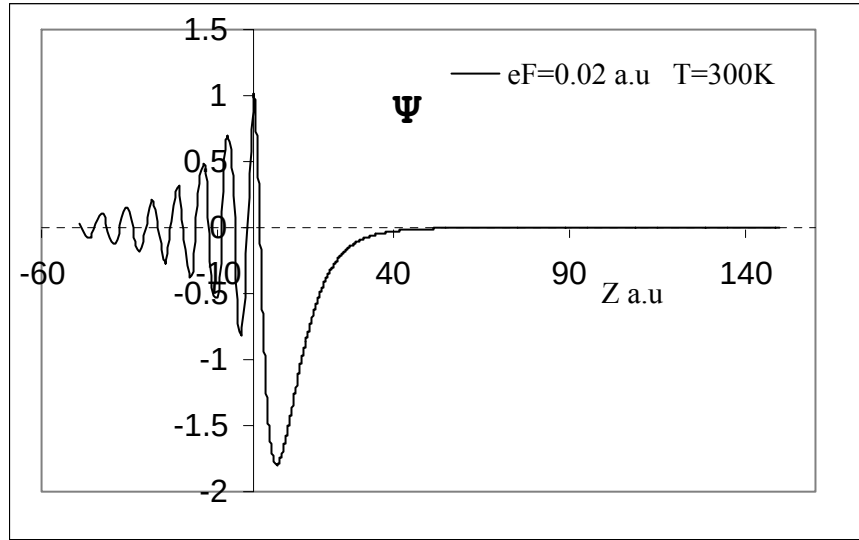
الشكل (2) يوضح تأثير المجال الكهربائي على الدالة الموجية للحالة S ودرجة 500 K



الشكل (3) يوضح تأثير المجال الكهربائي على الدالة الموجية للحالة P ودرجة K 500



الشكل (4) يوضح مقارنة للدالة الموجية للحالتين S و P لمجال كهربائي ضعيف ودرجة حرارة 500K



الشكل (5) يوضح استقرارية الدالة الموجية لحالة الصورة S1 بتأثير مجال كهربائي قوي

المصادر

1. Kittel in introduction to Solid State Physics sixth edition p 529 (1986)
2. Jabbar M.Khalef. Thesis , Basrah , Iraq, 2000 .(Calculating the surface and image electronic states binding energy)
3. L. Jurczyszyn and M. Steslicka, Sur. Sci. 266, 141 (1991). (Barrier – resonance states in an external electric field).
4. M. N. Read, and A.S. Christopoulos, Surf. Sci. 73, 116 (1993). (Surface Barrier states and Resonance of Metals).
5. V. Dose, U. Kolac, G. Borstel, and G. Thorner Phys. Rev. B29, 7030 (1984). (Two- photoemission Via image-potential states) .
6. G. Thomer and G. Borstel, Solid State Commun. 49 , 997 (1984). (Image potential states seen Via Two – photon photoemission)
7. B. Lord, R. Courths, and H. Wern, Phys. Rev. B31, 1164 (1985).(The resonance image states at Cu (111) surface)

8. U. Kolac, Th. Fauster, V. Dose, and W. Altmann, Solid State Commun, 54, 791 (1985). (The resonance image states at the (111) surface of fcc metal)
9. T. C. Shich, T. Miller, and T.C. Chicing, Phys. Rev. Lett. 55, 2483 (1985). (Image potential surface states).
10. N. Garcia, B. Reihl, and A. R. Williams, Phys. Rev. Lett. 54, 591 (1985). (Image states ; Binding energy ; Effective Masses, and surface corrugation
11. L. Jurczyszyn, M. Steslicka, and L. Dobrzynsk; Surf. Sci. 276, 360 (1992). (High energy resonance electronic states inside a W – Pd (111) tunnel junction)
12. S.A.Lindgren and L.Wallden,Phys.Rev.B40, 11546 (1989). (Theoretical investigation of image states of the Hydrogen coverd Cu (100) .
13. S.Papadia , M.Parson and L-A . Salmi , Phys . Rev . b 41, 10237 (1990). (Dispersion of empty surface states on Ni (110) .
14. A. Modinos, In Field Thermionic, and secondary Electron Emission Spectroscopy plenum press. New York (1985).
15. P. M. Echenique and J. B. Pendry, J. Phys. 11, 2065 (1978). (Image potential states on metal surface: Binding energies and wave function).