دراسة نظرية في الالتصاق الكيميائي الجزيئي على سطوح الصلب:I . حساب عدد الاشغال

جنان مجيد المخ و موسى كاظم شامر

قسم الفيزياء/ كلية التربية /جامعة البصرة/ البصرة/ العراق

ISSN –1817–2695

(الاستلام 2008/2/26، القبول 2008/6/18)

الملخص:

قدّمت في هذا العمل دراسة نظرية للالتصاق الكيميائي الجزيئي لجزيئة ثنائية الذرةعلى سطوح المعادن . إذ اعتمد نموذج أندرسون للالتصاق الكيميائي الذري حيث اعتبرنا الجزيئة كذرتين متفاعلتين فيما بينهما ومع السطح . وبالاستفادة من ادخال تأثير درجة حـــرارة السطح, تم اشتقاق صيغ تحليلية خاصة باعداد الاشغال للمستويات الذرية الخيالية,علماً أن التفاعلات المباشرة وغير المباشـــرة وكـــذلك التأثيرات الصورية وتأثيرات التبادل أخذت جميعها بنظر الاعتبار .

لقد تم تطبيق معالجتنا للنظام تفاعل جزئية الهيدروجين ثنائية الذرة على سطح المعدن الانتقالي التنكستن H_2 / W حيث حُسبت اعداد الاشغال وكل دوال الالتصاق الكيميائي المتعلقة كدالة للمسافة العمودية بين الجزيئة والسطح وكذلك المسافة بين الذرتين . واوضحت هذه النتائج المظاهر العامة الفيزيائية المعروفة للنظام .

الكلمات المفتاحية : نموذج اندرسون , الالتصاق الكيميائي الجزيئي , تفاعل ذرة ملتصقة – ذرة ملتصقة , شائبة اندرسون المغناطيسية

1- المقدمة Introduction

ان الباحث في موضوع الالتصاق الكيميائي الجزيئي **[1]** يستنتج بما لايقبل الشك ان هناك طريقين رئيسين لدراسة الالتصاق الكيميائي الجزيئي نظرياً . يتضمن الاول تفاعل جزيئة مع السطح حيث يتم دراسة تبادل الشحنة بين الاوربيتالات الجزيئية ومستويات حزمة الطاقة للسطح . بينما يتضمن الثاني تفاعل ذرتين (متفاعلتين) مع السطح حيث يتم دراسة تبادل الشحنة بين المستويات الذرية للذرتين ومستويات حزمة الطاقة للسطح **[2]** . ولايخفى على الباحث في هذا المجال صعوبة وضع نموذج حسابي متكامل وذلك لكثرة العمليات التي يمكن ان تحدث عند تفاعل جزيئة (او ذرة) مع السطح .في دراستنا للالتصاق الكيميائي لجزيئة على السطح استفيد كلياً من افكار الالتصاق الكيميائي لذرة على السطح **[3]** باعتبار الجزيئة ذرتين متماثلتين آخذين التفاعل بينهما بنظر الاعتبـــــار **[4]** (انظر الشكل **(1a)**) , المسافة التي تفصل بين الذرتين diatomic distance تساوي **X** بينما المسافة بين كل منهما والسطح تساوي **Z** بحيث تكون الزاوية المحصورة بين **X** و **Z** مساوية الى $\frac{\pi}{2}$ ، بمعنى اخر ان تأثير التدوير **[5]** لم يؤخذ بنظر الاعتبار كذلك اهُمل تغير المسافة **X** مع **Z [6]** . يوضح الشكل **(1b)** المستويات الذرية للـــــــــذرتين $E_i^{\pm\sigma}$ **(i=1, 2)** بعيداً عن السطح وكذلك قريباً من السطح موضحين اعداد اشـــــــغالهما $n_i^{\pm\sigma}$ في الحالتين علماً بان V_i تمثل جهد او طاقة التأين لذرة الهيدروجين وهو مساو الى **13.6eV** بينما يمثل V_A طاقة الالفة وهو مساوياً لـ **0.74 eV [7]** .

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