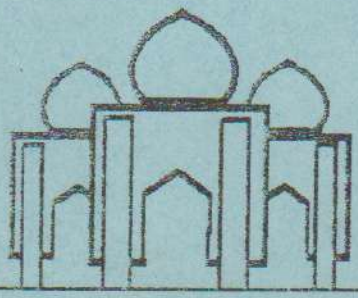
ISSN 1817 - 2695

منشورات

كلية التربية/جامعة البصرة



مجلة ابحاث البصرة

(العلميات)

العدد: ٩ ج
الجزء: ج
142

مجلة ابحاث البصرة (العلميات) العدد٩/الجزء٢/ 2003: 142 J.Bas.Res.(Sci.) V.29/ No.2 /2003

استخراج مجال القلع من حساب طاقة الربط

د.جنـــان مجيد المخ و حيدر قاسم العـــيداني
قسم الفيزياء – كلية التربية – جامعة البصرة

الملخص:

لقد تم دراسة تأثيرات المسافة ودرجة الحرارة على الشحنة المؤثرة للـــذرة الملتـــصقة وفقـــاً لنموذج اندرسون Anderson – Newns المعتمد علـــى الـــزمن مـــن خـــلال نظريـــة الالتـــصاق الكيميائي،حيث تم إيجاد صيغة تحليلية تمثل الشحنة المؤثرة للذرة الملتصقة اخذين الاعتبار التنافر بين الإلكترونات المتعاكسة البرم في الذرة الملتصقة والمتمثل بطاقة الترابط correlation energy.

تم أيضا إيجاد صيغة تحليلية للجزء المعدني من طاقة الالتصاق الكيميائي بينما حسب الجـــزء الايوني عددياً. إن طاقات الالتصاق الكيميائي حسبت كدالة لنوع الذرة القلوية والوجه المستخدم. أمـــا مجال القلع فقد استخرج من حسابات طاقة الربط وذلك بالاستفادة من نموذج التحدب الصوري للقلـــع. هذه الحسابات أظهرت تقارباً جيداً مع النتائج العملية مما يشير إلى صحة التقريب المستخدم.

المقدمة:

يعد موضوع مجال القلع من الموضوعات المهمة في علم فيزياء السطوح لارتباطه المباشـــر بموضوع الالتصاق الذي يعتبر عمليه عكسية للقلع،ولأن الدراسات العملية للظواهر التي تحدث علـــى السطح تركز بالدرجة الأساس على طاقة الـــربط Binding energy واعتمـــاد الجهـــد Potential energy على المسافة [1] سنركز في هذا البحث على التفاعـــل بـــين الـــذرة الملتـــصقة Adatom والسطح.

لقد قدم الباحثون العديد من الدراسات النظرية حول موضوع الالتصاق الكيميائي ولعل أهمهـــا الدراسة التي قدمها كل من Rassar,Remy[2] لتوضيح اعتماد عملية تبادل الشحنة بين ذرات مبتعدة من السطح على المسافة وعلى درجة الحرارة وذلك بتعميم نظرية الالتصاق الكيميائي إلـــى مـــسافات بعيدة حيث أدخلت درجة الحرارة في صيغ أعداد الأشغال (أو ما يسمى بالشحنات المؤثرة Effective charges) للذرة الملتصقة كما اخذوا بنظر الاعتبار التأثيرات الصورية Image effects وتـــأثيرات الترابط Correlation effects .كما قدم Gadzuke واخرون [3] نظرية للالتصاق الكيميائي تخص التصاق الذرات القلوية على سطوح المعادن حيث افترضوا أن طاقة الالتصاق الكيميائي تتكـــون مـــن جزأين :الجزء المعدني و الجزء الايوني إذ تعتبر الاصرة الايونية هي الاصرة الـــسائدة فـــي حالـــة الالتصاق الكيميائي للذرات القلوية على سطوح المعادن الانتقالية.

ان حساب طاقة الالتصاق الكيميائي كدالة للمسافة يعني إيجاد سـطوح الجهـد potential energy surfaces (PES)التي تعد خطوه مهمة جداً في حسابات الالتصاق الكيميائي بل من أهم نتائجها حيث تعطي حالة الشحنة على السطح أثناء الالتصاق .

قدم Gomer[4] معالجة نظرية لمجال القلع و اعتبر ان عملية القلع بواسطة المجـال Field Desorption هي تعميما لعملية التأين بواسطة المجال Field Ionization .إن القياسـات العمليـة لمجال القلع FD لا تكون صحيحة 100% وذلك بسبب اللادقة المصاحبة لدرجة تأين الذرة الملتصقة بعد القلع.ولصعوبة تحضير سطح نظيف جداً يتم حساب مجال القلع لتغطية عالية ثم تعالج هذه النتائج باستخدام الاستكمال الرياضي الخارجي Extrapolationإلى غاية قريبة جداً من الصفر near zero coverage .

أما فيما يخص قلع الذرات وهي متاينة من الدرجة الثانية فقد قام Ernst واخرون [5] بقياس الجهد كدالة للمسافة عند درجات حرارة منخفضة واستنتجوا ان النتائج مطابقة للنتائج النظرية لنموذج التحدب الصوري Image hump model لحساب مجال القلع .كما اقترحوا صيغة لحساب الجهد عند قيمة التحدب في منحنيات الجهد والتي تحدث بسبب تأثير المجال.

في هذا البحث ،سيتم حساب مجال القلع لذرة الصوديوم من سطح التنكستن وذلك من خـلال نظرية الالتصاق الكيميائي بالاعتماد على نموذج AGN[6]. حيث سيتم تقديم نموذج حسابي لأعـداد الإشعال وطاقة الربط لحساب طاقة الالتصاق الكيميائي للنظام Na/W ومن ثم الاستفادة من هذه الطاقة لحساب مجال القلع باستخدام نموذج التحدب الصوري (ولمزيد من التفاصيل انظر المصدر [1]).

النظرية:

تعطى أعداد الأشغال لمستويي التكافؤ(ذو البرمσ) والالفه(ذو البرم σ−)الذريين $n_a^{\pm\sigma}$ (عند أي درجـة حرارة) بالعلاقة :

$$n_a^{\pm\sigma} = \int_{u_0}^{\phi} \rho_a^{\pm\sigma}(E) f(E,T) dE \qquad \text{----------(1)}$$

حيث $f(E,T)$تمثل دالة توزيع فيرمي ، ϕ دالة الشغل للسطح بينما تحدد u_0 قعر حزمة الطاقة للمعدن وتمثل $\rho_a^{\pm\sigma}(E)$ كثافة الحالات للذرة الملتصقة وبنصف عرض مساو إلى $\Gamma(S)$:

$$\rho_a^{\pm\sigma}(E) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma(S)}{(E - E_a^{\pm\sigma})^2 + \Gamma^2(S)} \qquad \text{----------(2)}$$

وتمثل $E_a^{\pm\sigma}$ مستويات الطاقة المقابلة لأعداد الإشعال $n_a^{\pm\sigma}$ وهي تعطى بالعلاقه الاتيه :

$$E_a^{\pm\sigma} = \phi - V_i + \Delta E + U_{eff} n_a^{\mp\sigma} \qquad \text{----------(3)}$$

والتي تأخذ بنظر الاعتبار تأثير الازاحه الصورية ΔE [8] وتأثيرات الترابط Ueff [8] وهي تعطى بالعلاقات الاتيه :

$$\Delta E(S) = \frac{e^2}{4\sqrt{S^2 + S_o^2}} \qquad \text{----------(4)}$$

$$U_{eff}(S) = V_i - V_A - 2\Delta E(S) \qquad \text{----------(5)}$$

ولان الحسابات العددية للمعادلة (1) تكون غير دقيقه سوف نستبدل صيغة دالة فيرمي $f(E,T)$ بصيغة متعددة حدود تصح لأي درجة حرارة T من افضل تطابق لمتعدد حدود حصلنا عليه وكآلاتي :

$$f(E) = a_0 + a_1 E + a_2 E^2 + a_3 E^3 \qquad \text{----------(6)}$$

وان:

$$a_0 = 0.5$$
$$a_1 = -0.249523$$
$$a_2 = -2.07718 \times 10^{-8}$$
$$a_3 = 0.0186342$$

لذلك يمكن كتابة المعادلة (1) بالشكل التالي :

$$n_a^\sigma = \int_{u_0}^{-k_B T} \rho_a^\sigma(E)dE + \int_{-k_B T}^{+k_B T} \rho_a^\sigma(E)(a_0 + a_2 E^2)dE \qquad \text{----------(7)}$$

وبحل المعادلة (7) تحليليا نحصل على :

$$\pi n_a^\sigma = 2a_2 k_B T\Gamma - \tan^{-1}\left(\frac{u_0 - E_a^\sigma}{\Gamma}\right) + a_2\Gamma E_a^\sigma \ln\frac{(k_B T - E_a^\sigma)^2 + \Gamma^2}{(k_B T + E_a^\sigma)^2 + \Gamma^2}$$
$$+ B_1^\sigma \tan^{-1}\left(\frac{-k_B T - E_a^\sigma}{\Gamma}\right) + B_2^\sigma \tan^{-1}\left(\frac{k_B T - E_a^\sigma}{\Gamma}\right)$$

----------(8)

حيث إن :

$$B_1^\sigma + B_2^\sigma = 1$$
$$B_2^\sigma = a_0 + a_2(E_a^\sigma)^2 + a_2\Gamma^2$$

المعادلة (8) تمثل الشحنات المؤثرة $n_a^{+\sigma}$ و $n_a^{-\sigma}$ للذرة الملتصقة والتي تأخذ بنظر الاعتبار المسافة والحرارة والتأثيرات الصورية وتأثيرات الترابط ،والتي تدخل كذلك في حساب الجزء المعدني من طاقة الالتصاق الكيميائي وكما يلي:

$$E_M(S)=\sum_{\sigma}\int_{u_0}^{\phi}Ef(E,T)\rho_a^{\sigma}dE-U_{eff}n_a^{\sigma}n_a^{-\sigma} \qquad \text{----------(9)}$$

وبعد تعويض العلاقة (6) في العلاقة أعلاه نحصل على :

$$E_M(S)=\frac{1}{\pi}\sum_{\sigma}\sum_{i=1}^{5}C_i^{\sigma}g_i^{\sigma}-U_{eff}n_a^{\sigma}n_a^{-\sigma} \qquad \text{----------(10)}$$

حيث إن الدوال C_i^{σ} و g_i^{σ} أدرجت في الجدول (1) .

الجدول (1) يوضح صيغ الدوال C_i^{σ} و g_i^{σ} لكل قيم i.

i	C_i^{σ}	g_i^{σ}
1	E_I^{σ}	$\tan^{-1}\frac{-k_BT-E_a^{\varpi}}{\Gamma^{\sigma}}-\tan^{-1}\frac{u_o-E_a^{\varpi}}{\Gamma^{\sigma}}$
2	$a_1(E_a^{\sigma 2}+\Gamma^{\sigma 2})+a_3(E_a^{\sigma 4}+\Gamma^{\sigma 4})+6a_3\Gamma^{\sigma 2}E_a^{\sigma 2}$	$\tan^{-1}\frac{k_BT-E_a^{\varpi}}{\Gamma^{\sigma}}-\tan^{-1}\frac{-k_BT-E_a^{\varpi}}{\Gamma^{\sigma}}$
3	$\frac{1}{2}\Gamma^{\sigma}$	$\ln\frac{(-k_BT-E_a^{\sigma})^2+(\Gamma^{\sigma})^2}{(u_o-E_a^{\sigma})^2+(\Gamma^{\sigma})^2}$
4	$a_1E_a^{\sigma}\Gamma^{\sigma}+2a_3(\Gamma^{\sigma}E_a^{\sigma 3}+\Gamma^{\sigma 3}E_a^{\sigma})$	$\ln\frac{(k_BT-E_a^{\sigma})^2+(\Gamma^{\sigma})^2}{(-k_BT-E_a^{\sigma})^2+(\Gamma^{\sigma})^2}$
5	$\Gamma^{\sigma}+2a_3k_BT\Gamma^{\sigma 3}-4a_3k_BT\Gamma^{\sigma}E_a^{\sigma 2}$ $^2_BT^2\Gamma^{\sigma}E_a^{\sigma}-\frac{3}{2}a_3\Gamma^{\sigma}E_a^{\sigma 3}$	1

أما طاقة الجزء الايوني فتعطى بالعلاقة[3]:

$$E_I(S)=-e^2\int_S^{\infty}\frac{Z_{eff}^2(S')dS'}{4(S'+k_S^{-1})^2} \qquad \text{----------(11)}$$

حيث إن kS-1 يمثل طول الحجب screening length و Zeff(S) هي الشحنة المؤثرة المتمركـزة على الذرة الملتصقة والتي تساوي $Z_{eff}(S)=1-n_a^{+\sigma}(S)-n_a^{-\sigma}(S)$

واعتماداً على ما سبق فان الطاقة الكلية للالتصاق الكيميائي تعطى بما يلي:

$$E_{CH}(S)=E_M(S)+E_I(S) \qquad \text{----------(12)}$$

أما طاقة الربط فتحسب مما يلي :

$$E_B=E_{CH}(S=0)-E_{CH}(S=\infty) \qquad \text{----------(13)}$$

عند تسليط مجال كهربائي خارجي شدته F على نظام ذرة ملتصقة-سطح فان تأثيره يضاف إلى السطح على شكل إزاحة للمستوي الذري الملتصق بمقدار eFSo[7] لذلك فان موقع المستوي الذري يصبح:

$$E_a^{\pm\sigma} = \phi - V_i + \Delta E + U_{eff} n_a^{\mp\sigma} + |e|FS_o \quad \text{----------(14)}$$

So تمثل طول الحجب. وتعطى طاقة الالتصاق الكيميائي للحالة الغير مغناطيسية كدالة للمسافة والمجال المؤثر كآلاتي[10] :

$$E_{CH}(S,F) = E_M(S,F) + E_I(S,F) + E_{IF}(S,F) - \frac{1}{2}\alpha_i F^2 \quad \text{----------(15)}$$

حيث تحسب EM وEI وفقاً للعلاقات (10)و(11) عند تأثير المجال .الحد الثالث من المعادلة (15) يمثل مقدار الطاقة المصاحبة لجلب الشحنة المؤثرة $|e|Z_{eff}(S,F)$ من S=0 الى نقطة تقع في منطقة المجال وعلى بعد S من السطح :

$$E_{IF}(S,F) = eF\int_{S+S_o}^{0} Z_{eff}(S',F)dS' \quad \text{----------(16)}$$

الحد الرابع من المعادلة (15) يمثل طاقة استقطاب الأيون و α_i هي معامل استقطابية ثنائي القطب الكهربائي للأيون.وتعطى طاقة الالتصاق الكيميائي للحالة المغناطيسية وكدالة للمسافة والمجال المؤثر بصيغة مشابهة للعلاقة(15) ولكن بتغيير α_i إلى α_A (وهي معامل استقطابية ثنائي القطب الكهربائي للذرة).

ان علاقة طاقة الربط الذرية EB بمجال القلع FD حسب نموذج التحدب للأيونات المقلوعة وهي متباينة من الدرجة الأولى تعطى بالعلاقة :

للحالة $\phi_o < V_i$:

$$Q(F) = E_B + |\phi_o - V_i| + \frac{1}{2}\alpha_A F^2 - E_{hump}(F) \quad \text{----------(17)}$$

وللحالة $\phi_o > V_i$:

$$Q(F) = E_B - |\phi_o - V_i| + \frac{1}{2}\alpha_A F^2 - E_{hump}(F) \quad \text{----------(18)}$$

لمعرفة تفاصيل اكثر راجع المصدر[1] .

النتائج والمناقشة:

لقد تم حساب أعداد الاشغال $n_a^{\pm\sigma}$ ومستويات الطاقة الذرية $E_a^{\pm\sigma}$ المقابلة لها للنظام Na/W(100) لطول حجب ثابت So=3.6 Ao ولدرجتي حرارة مختلفة 300 oK و2000 oK لغرض التأكد من التصرف العام لها كدالة للمسافة ودرجة الحرارة وكما موضح في الأشكال (1)و(2) التي منها نستنتج ما يلي :

1.عند المسافات البعيدة تظهر الحلـول المغناطيـسية $(n_a^{\sigma} \neq n_a^{-\sigma})$ بينمـا تظهـر الحلـول الغيـر مغناطيسية $(n_a^{\sigma} = n_a^{-\sigma})$ بالقرب من السطح .

2.زيادة أعداد الإشعال لكل قيم المسافة مع زيادة درجة الحرارة.

3.توضح النقطة SCH المنطقة التي تتحول فيها الحلول من الحالة المغناطيسية الـى الحالـة الغيـر مغناطيسية،حيث إن SCH تتغير مع تغير درجة الحرارة.ويبين الجدول (2) هذه الحسابات ولوجـوه مختلفة لسطح التنكستن ولاطوال حجب مختلفة.

كما تم حساب طاقة الالتصاق الكيميائي للحلين المغناطيسي وغير المغناطيسي للنظام Na/W كدالـة لدرجة الحرارة والمسافة ودالة الشغل للسطح حيث استخدمت نتائج حسابات أعداد الاشغال كمـدخلات لحساب طاقة الالتصاق وكما موضح في الشكل (3) الذي يبين ان :

للحالات $\phi_o < V_i$ تظهر الحالتين الايونية(الخط المتقطع)والمتعادلة(الخط المتصل) واللتان تتقاطعان عند **النقطة** SC ،هذه النقطة لها أهمية في موضوع القلع لأنها تؤكد ان حالة G.S للنظام عندما تكون الذرة **بعيدة عن** السطح تكون حالة متعادلة (EM>EI) بينما تكون حالة ايونية (EM<EI) عند عبـور SC **بالاقتراب** نحو السطح.

ولحالة $\phi_o > V_i$ يظهر الحل الايوني فقط حيث ان SC تبتعد عن السطح بزيادة ϕ_o.

نتائج هذه الحسابات مبينة في الجدول (3) الذي منه نستنتج ان المساهمة الايونية في طاقة الربط هـي **السائدة** لكل الوجوه وتزداد هذه المساهمة بزيادة ϕ_o على عكس المساهمة المعدنية.

ولدراسة تأثير درجة الحرارة تم حساب PES للنظام Na/W(100) كدالة لدرجة الحرارة كما **في الشكل** (4) الذي يؤكد ان الحالة الغير مغناطيسية لا تتغير تبعاً لتغير درجة الحرارة إلا بالقرب من **السطح** على عكس الحالة المغناطيسية.

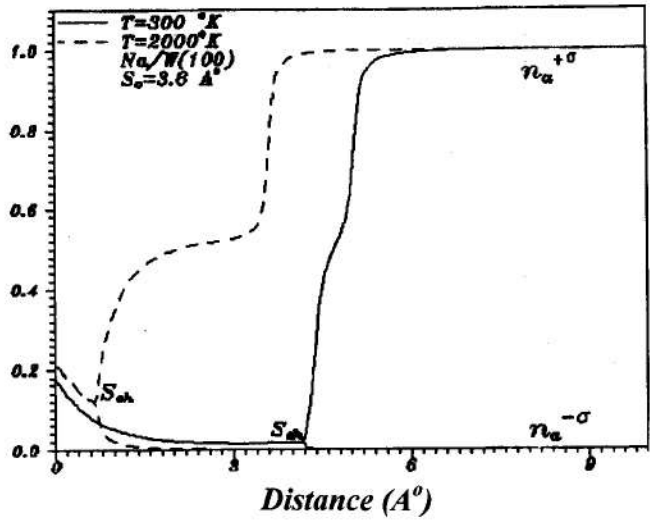
اما عند تسليط مجال كهربائي خارجي على النظام فان كل دوال الالتصاق تتغير تبعاً لتغيـر **المجال** وخاصةً على السطح (S=0) بحيث ان زيادة المجال تعني زيادة ازاحة موقع المستوي الـذري $E_a^{\pm\sigma}$ أعلى مستوي فيرمي ومن ثم زيادة التعريض Γ الحاصل في المستوي و بالتالي نقصان الشحنة **الإلكترونية** $n_a^{\pm\sigma}$ المتموقعة بالقرب من الذرة الملتصقة (أي ان تأثير المجال معـاكس لتـأثير درجـة **الحرارة**).

كما استخدمت نتائج حسابات دوال الالتصاق الكيميائي بوجود المجال كمدخلات لحساب PES **كدالة** للمجال ايضاً للنظام Na/W وكما موضح في الجداول (4)و(5) على التوالي،بحيث يبين الشكل (5) تغير هيئة PES مع المجال الخارجي المؤثر و للحلين المغناطيسي و غير المغناطيـسي (الخـط **المتقطع**)مقارنة مع الحالة F=0 (الخط المتصل)،ولوحظ ان الحل المغناطيسي تحت تأثير المجال يزاح

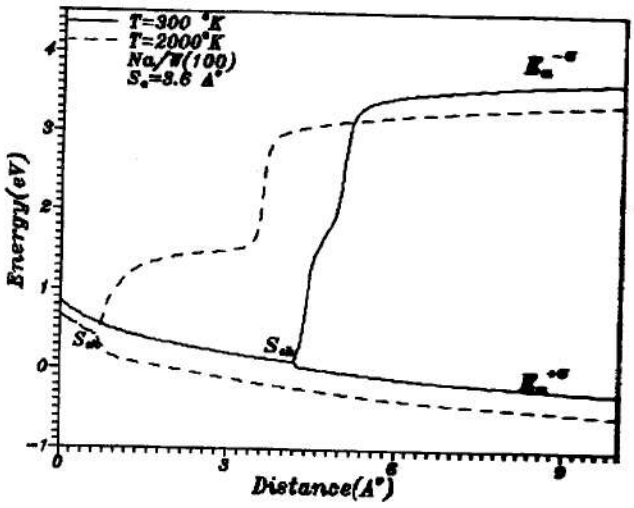
بمقدار $\frac{1}{2}\alpha_A F^2$ عن حالة F=0 بينما الحل الغير مغناطيسي يحصل له انحناءً يتناسب مع شدة المجال.ويعتمد تقاطع المنحنيات على شدة المجال ايضاً والواضح من الشكل (C-5) الذي يوضح ميكانيكية القلع حيث تنقلع الذرة الملتصقة بهيئة أيون موجب عبر الحالة الارضيه للنظام والتي هي حالة ايونية .

وعليه،فلحساب مجال القلع كان لابد اولاً حساب PES ومن ثم حساب طاقة التنشيط للقلع Q وللحالتين $\phi_o > V_i$ و $\phi_o < V_i$ كدالة للمجال ولكل الوجوه للنظام Na/W بحيث يتحقق الشرط Q(F)=min وكما في الشكل (6) .

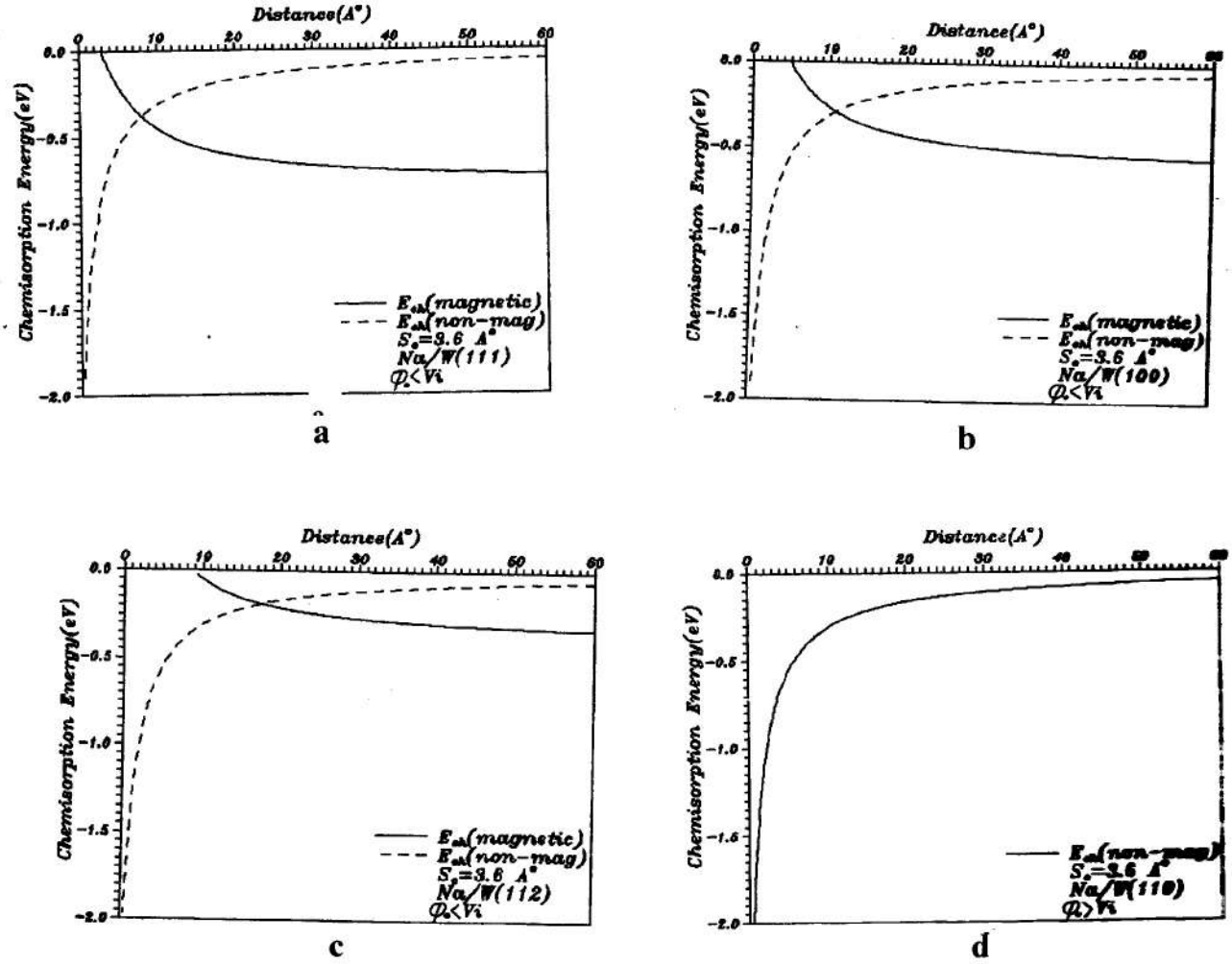
نتائج حسابات مجال القلع يستعرضها الجدول (6) والتي تظهر تطابقاً جيداً مع القيم العملية للنظام Na/W وبشكل خاص للحالة $\phi_o < V_i$.



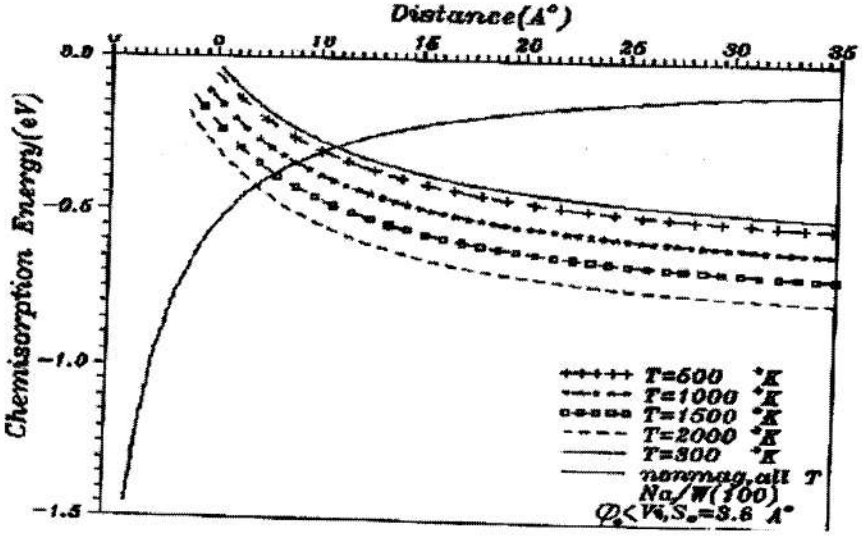
الشكل(1):اعداد الاشغال كدالة للمسافة ولدرجتي حرارة مختلفة



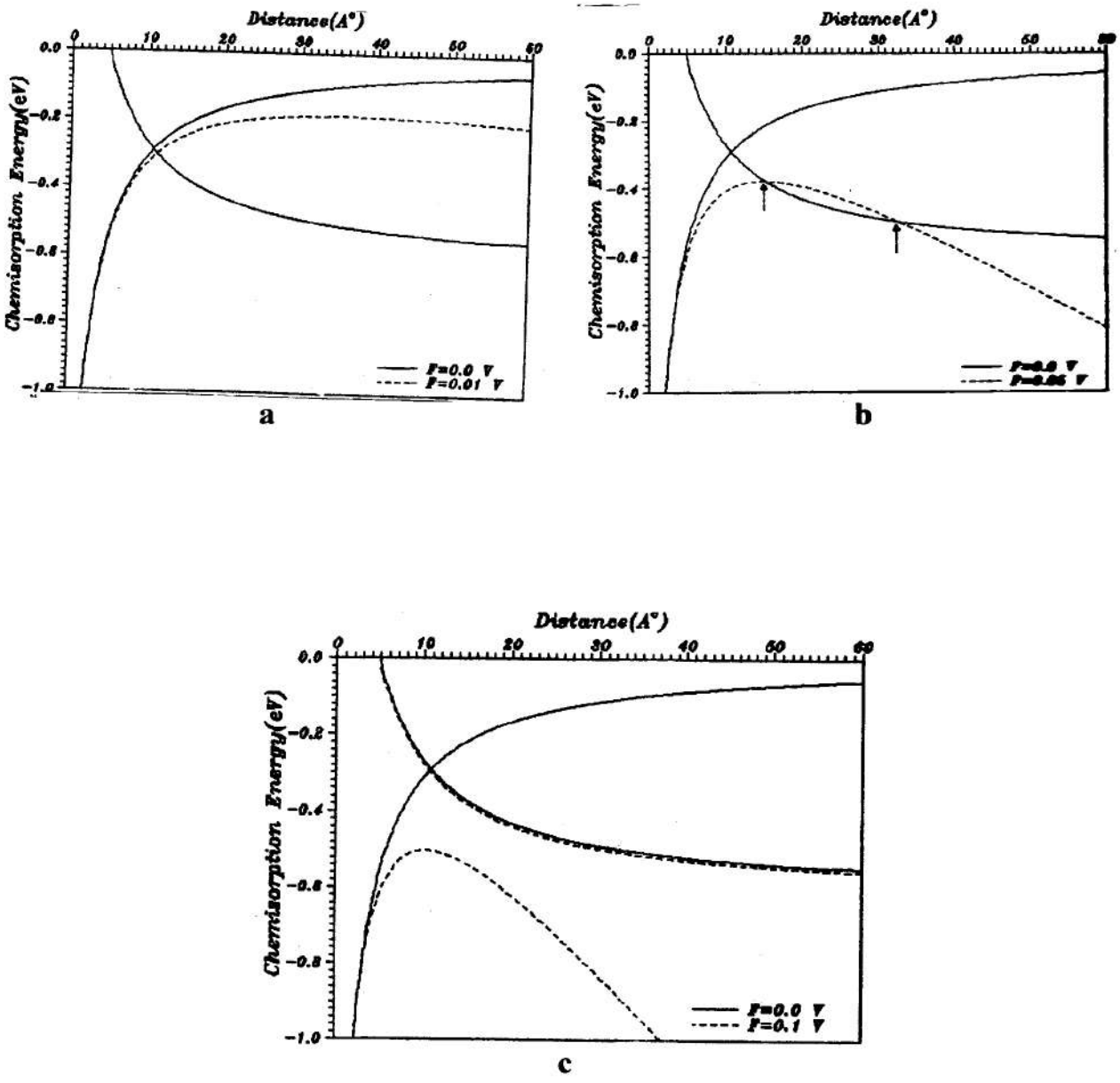
لشكل(2)يوضح مستويات الطاقة الذرية المقابلة لاعداد الاشغال المحسوبة في الشكل(1).



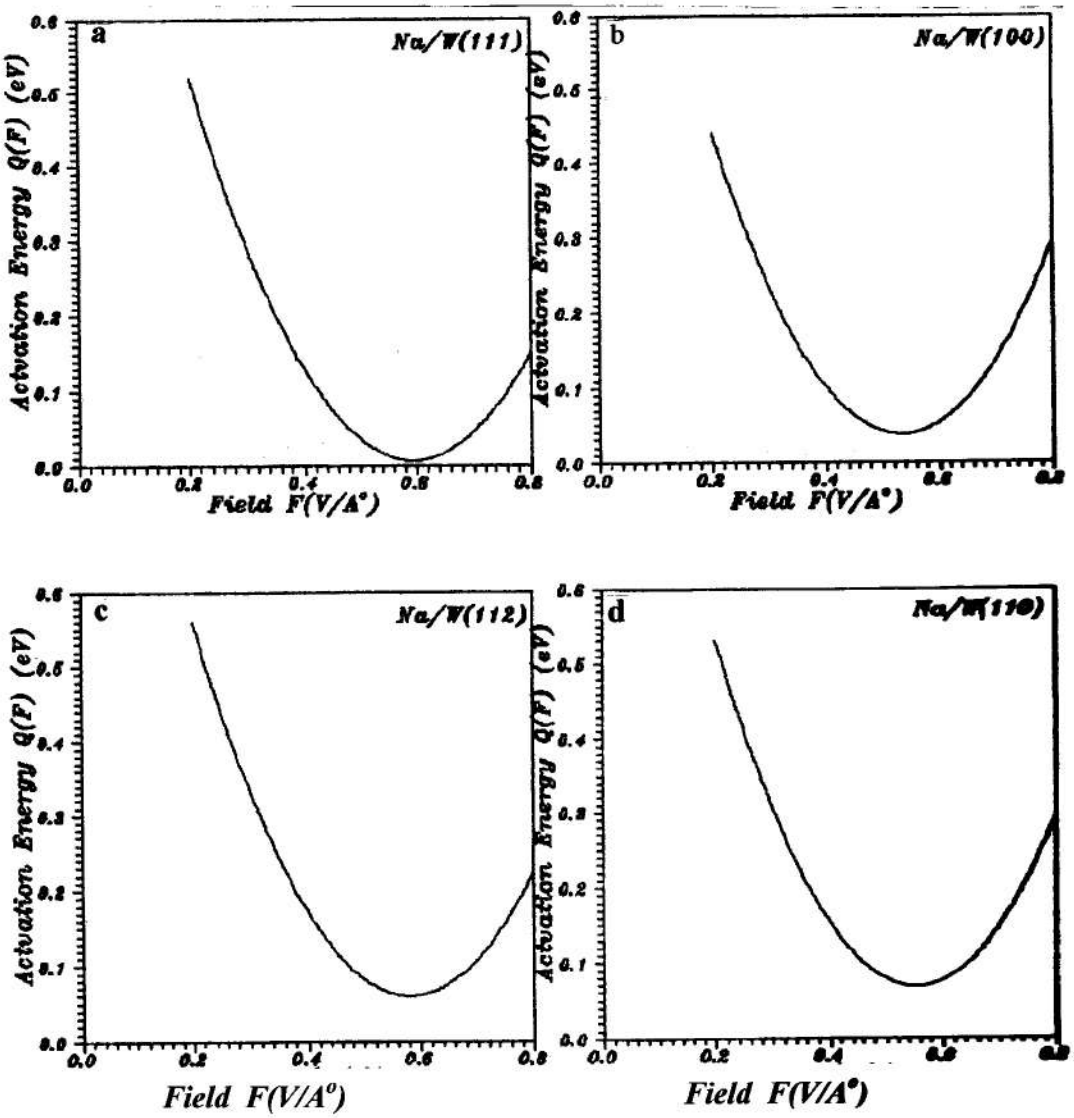
الشكل(3):يوضح PES للنظام Na/W ولـ $S_o=3.6\ A^o$.



الشكل(4):يوضح PES مع درجة الحرارة للنظام Na/W(100).



الشكل(5):يوضح PES للنظام Na/W(100) وللمجالات:
(a)0.01 V/A° (b)0.05 V/A° (c)0.1 V/A°



الشكل(6):يوضح Q مع F للأنظمة:

(a)Na/W(111) (b)Na/W(100) (c)Na/W(112) ***(d)Na/W(110)***

الجدول(2):قيم دوال الالتصاق الكيميائي للنظام Na/W كدالة لـــ φ_o ولقيمتين للـــ S_o عند درجة حرارة $300\ ^oK$.

Na/W , V_i=5.14 eV , V_A=0.54 eV , r_i=0.97 A^o , T=300 ^oK										
Face	φ_o(eV)	φ_o-V_i(eV)	S_o=2.4 A^o , U_{eff}=1.6 eV				S_o=3.6 A^o , U_{eff}=2.6 eV			
			n_a	E_a(eV)	1(eV)	S_{ch}(A^o)	n_a	E_a(eV)	1(eV)	S_{ch}(A^o)
111	4.4	-0.74	0.16488	0.97416	0.66850	3.60	0.20212	0.73548	0.64169	2.35
100	4.58	-0.56	0.14673	1.12530	0.68503	5.05	0.18044	0.85934	0.65571	4.20
112	4.8	-0.34	0.12836	1.31610	0.70539	8.20	0.15771	1.0205	0.6736	7.70
110	5.3	0.16	0.09765	1.76730	0.75123	-	0.11856	1.4191	0.71614	-

الجدول(3):قيم طاقة الربط وطاقة الالتصاق الكيميائي ومساهماتها كدالة لـــ φ_o للنظام Na/W ولـــ S_o=3.6 A^o

Na/W , V_i=5.14 eV , V_A=0.54 eV , r_i=0.97 A^o , S_o=3.6 A^o , T=300 ^oK									
Face	Q_o(eV)	Q_o-V_i(eV)	E_I(S=0) (eV)	E_M(S=0) (eV)	E_{CH}(S=0) (eV)	E_B(eV)	S_C (A^o)	E_{exp}(eV)	E_{The} (eV)
111	4.4	-0.74	1.8396	0.66321	2.5029	1.763	8.0	2.35[10] 1.75±0.03[11]	-
100	4.58	-0.56	1.9308	0.60257	2.5334	1.973	11.1	2.4[10] 2.55[12]	2.76[13]
112	4.8	-0.34	2.0370	0.53899	2.5760	2.236	17.1	2.01±0.04[11]	1.73[3]
110	5.3	0.16	2.1881	0.43240	2.6183	2.778	-	2.93[10] 2.61±0.03[11] 2.5±0.05[12]	-

الجدول(4):يوضح قيم دوال الالتصاق الكيميائي *للنظام Na/W كدالة لـ F*

المجال F(V/A^0)	الوجه 111			الوجه 100			الوجه 112			الوجه 110		
	n_a	E_a	Γ	n_a	E_a	Γ	n_a	E_a	Γ	n_a	E_a	Γ
0.0	0.20212	0.73548	0.64169	0.18044	0.85934	0.65571	0.15771	1.0205	0.67360	0.11857	1.4191	0.71614
0.1	0.18372	0.84223	0.65379	0.16458	0.97174	0.66823	0.14456	1.1388	0.68648	0.10998	1.54681	0.72923
0.3	0.15347	1.06868	0.67888	0.12488	1.36955	0.71098	0.12298	1.38457	0.71255	0.09568	1.80733	0.75513
0.5	0.12998	1.31269	0.70502	0.11837	1.45890	0.72024	0.10611	1.64257	0.73888	0.08422	2.07524	0.78061
0.7	0.11170	1.57024	0.73161	0.10254	1.72138	0.74671	0.09275	1.90969	0.76501	0.07490	2.34869	0.80537
0.9	0.09730	1.83789	0.75810	0.08995	1.99231	0.77285	0.08200	2.18361	0.79057	0.06719	2.62634	0.82918
1.2	0.08087	2.25281	0.79683	0.07541	2.40998	0.81074	0.06939	2.6036	0.82729	0.05785	3.04862	0.86277

الجدول(5):يوضح قيم طاقة الالتصاق الكيميائي ومساهماتها *للنظام Na/W كدالة لـ F .*

المجال F(V/A^0)	الوجه 111			الوجه 100			الوجه 112			الوجه 110		
	E_I	E_M	E_{CH}	E_I	E_M	E_{CH}	E_I	E_M	E_{CH}	E_I	E_M	E_{CH}
0.0	1.8396	0.66321	2.5029	1.9308	0.60257	2.5334	2.0370	0.53899	2.5760	2.1881	0.43024	2.6183
0.1	1.90808	0.61849	2.46627	1.99068	0.56484	2.49950	2.08491	0.50867	2.52467	2.21067	0.41349	2.54855
0.3	2.03572	0.54605	2.38053	2.13396	0.47376	2.29570	2.15013	046068	2.39183	2.24574	0.38988	2.40075
0.5	2.11111	0.49218	2.24560	2.15131	0.46004	2.24239	2.19347	0.42740	2.24003	2.27176	0.37894	2.2486
0.7	2.15913	0.45394	2.08815	2.19034	0.43029	2.08327	2.22458	0.40751	2.08143	2.29177	0.38062	2.09749
0.9	2.19292	0.42964	1.92330	2.21872	0.41387	1.92059	2.24792	0.40055	1.9226	2.30762	0.39541	1.95128
1.2	2.22814	0.41807	1.6775	2.24914	0.41392	1.68162	2.27367	0.41497	1.69320	2.32509	0.44402	1.7477

الجدول(6):يوضح قيم F_D المستحصلة حسب نموذج التحدب.

System	$F_D(V/A^o)$	$F_{Dexp}(V/A^o)$
Na/W(111)	0.580	0.597±0.006
Na/W(100)	0.575	
Na/W(112)	0.560	**0.569±0.011**
Na/W(110)	0.540	**0.603±0.006**

References:

1- H.Q.AL-Edany, Msc.thesis, Basrah, Iraq, 2002.
2- B.Rasser and M.Remy, Surface Science, P.223-239, 1980.
3- J.W.Gadzuk, J.K.Hartman and T.N.Rhodin, phys. Rev., Vol.4,No.2, 1971.
4- R.Gomer, J.Chem.phy., Vol.31, No.2, 1959, "Field emission and Field ionization'', 1961.
5- N.Ernst, G.Bozdech and J.H.Block, Surface Science, Vol.80, P.645-655, 1979.
6- P.W.Anderson, Phy.Rev., Vol.124, P.41, 1961.
7- J.M.Al-Mukh and S.I.Essa, Basrah J.Science, C,Vol.18,No.2,P.145-158, 2000.
8- T.T.Tsong, Reports on progress in physics, Vol.51, part2,1988.
9- J.M.Al-Mukh, Ph.D thesis, Basrah, Iraq,1997.
10- M.D.Scheer and J.Fine, J.Chem.Phys.,Vol.37,P.107,1962.
11- C.J.Todd and T.N.Rhodin, Surface Science, Vol.42,P.109-138,1974.
12- A.Hurkmans, E.G.Overbosch and J.Los, Surface Science,Vol.59,P.488,1976.
13- H.Gollisch and L.Fritsche, Surface Science,Vol.92,P.325-335,1980.