الملخص

يعد موضوع التصاق الذرات على السطح وتأثير ذلك على عمليات تبادل الشحنة عند نهج الطاقات فوق الحرارية من الموضوعات المهمة في فيزياء السطوح وبالأخص عند دراسة تأثير اقتران إلكترون-فونون . ولغرض دراسة تأثير اقتران إلكترون-فونون بسبب ارتداد الذرات الملتصقة خلال استطارة ذرة عن سطح مغطى بتغطية واطئة , أستخدم المؤثر الهاملتوني لأندرسون الذي تضمن تفاعل الذرة المستطيرة مع الذرة الملتصقة وكذلك تفاعل الذرة الملتصقة مع ذرات السطح . بحيث تستطير الذرة من الذرة الملتصقة وتم تبادل الشحنة بينهما عن طريق عملية تبادل الشحنة الرنيني وشبه الرنيني . تضمن الهاملتونين كذلك تفاعل اقتران إلكترون-فونون . وقد عُولج نظام المعادلات الخاص بذرة مستطيرة-ذرة ملتصقة/ سطح باستخدام تقريب الحزمة العريضة . وقد حُلَّ نظام المعادلات عددياً باستخدام طريقة رانج كوتا من الدرجة السادسة والتأكد من الدقة عند كل زمن. طبقت المعالجة لنظام حقيقي هو Li – K/W , إذ حُسِبتْ احتمالية التأين للذرة المستطيرة وعدد الإشغال للذرة الملتصقة وعدد الفونونات المتولدة عليها دالّة لكل المتغيرات المتعلقة بالمعالجة كالطاقة الابتدائية للذرة المستطيرة .وفُحِص تأثير أخذ مركبة السرعة الموازية وتفاعل ذرة ملتصقة-ذرة ملتصقة بنظر الاعتبار عندما تكون متماثلة وغير متماثلة ووجد أن عدم التماثل يعزز عملية التأين. حسبت احتمالية التأين وعدد الفونونات دالّة لتغير قوى الاقتران. وقد حُسِب أكبر عدد ممكن من الفونونات التي تتولد بسبب الارتداد بوصفها دالّةً للطاقة الابتدائية للذرة المستطيرة ووجد أن حساباتنا لم تتجاوز هذا العدد. وأخيراً تضمنت الدراسة مناقشة موسعة حول ديناميكيتي انتقال الشحنة والطاقة والعوامل المتعلقة بهما.