الملخص

الدراسة الحالية هي بحث نظري عن التركيب الالكتروني للمركزين (Fs و Fs^{+}) على السطحين (001) و(110) في البلورات الأيونية ذات التركيب البلوري NaCl ، حيث تركز اهتمامنا على طاقات الانتقال (F-band) و(K-band) . استعملنا في هذا البحث نموذج BSG المعدل من قبل Matthew وGreen والذي يتضمن إضافة إلى الجهد النقطي، تأثير حجم الايونات. الجهد في داخل الحجم وعلى السطحين (001) و(110) تم فكه بدلالة التوافقيات المكعبة, والتي تمتلك في نظرية المجاميع, التمثيل Oh, C4v و C2v على التوالي . معادلة شرويدنكر تم فصلها إلى الجزء القطري و الزاوي، في الأول تم حل معادلات شرويدنكر القطرية بالطرق العددية، أما نظرية الاضطراب فقد اشتملت على حدود الجهد غير المتناظرة كرويا.

في داخل الكيان البلوري، طاقات المرتبة الصفرية للمستويات الأرضي والمثارة تم الحصول عليها من خلال الجهد المتناظر للنموذجين PI وMBSG أما تصحيح الطاقات من المرتبة الأولى والثانية للمستويات المثارة والأرضي على التوالي فقد تم إيجادها في هذا البحث باستعمال الجهد اللامتناظر كرويا . نتائج طاقة الانتقال F band كانت مطابقة للنتائج العملية، أما بالنسبة لطاقة الانتقال K band فلم نحصل على قيم سابقة (نظرية و عملية) ماعدا KCl من اجل المقارنة معها. نموذج (Jost cavity) تم اختبارها عن طريق إدخال تأثيرات الاستقطاب الى داخل الكيان البلوري.

على السطح (001) المثالي، المزاح والمتموج فقد تم بحثها من خلال إزاحة الطبقة العليا نحو الداخل أو الخارج في السطح المزاح وتمت معالجتها إضافة إلى التموج الحاصل في الطبقة العليا من السطح المتموج نتيجة لإزاحة الايونات السالبة نحو الأعلى والايونات الموجبة نحو الأسفل، مقدار هذه الإزاحات تم حسابه بالاستعانة (Welton-Cook and Prutton model). من الانشطار في المستويات المثارة (2p) و (3p)،والتي هي ثلاثية الانحلال،نحصل على مستويين،الأولA1 غير منحل (مستقطب عموديا على السطح((001) والأخرE ثنائي الانحلال (مستقطب موازي على السطح ((001) , حيث تم إيجادها للتصحيح الأول من خلال إدخال حدود الجهد اللامتناظر كرويا في النموذجين (PI , PI+IS). أما المستويات المثارة العليا3d فان الانشطار يكون فيها خماسي الانحلال، وبأربعة مستويات ، ثلاثة منها غير منحلة هي E3d(B1 ، (E3d(A1) و (E3d(B2، والأخير ثنائي الانحلال وهو (E3d(E) . طاقات الانتقال لإلكترون المركزين (Fs و Fs^{+}) ، (ΔE3p(A1 ، ΔE2p(E) ، (ΔE2p(A1) و (ΔE2p(E) تم حسابها في هذا البحث.إما تأثير الاستقطاب على السطح (001)فقد تمت ملاحظته من خلال انخفاض قيم طاقات الانتقال F band وK band لإلكترون المركزين (Fs و Fs^{+}).

بالنسبة للسطح (110) ، فان التناظر يكون من نوع C2v مقارنة مع C4v للسطح (001).
طاقة الانتقال F band للسطح (001) تكون اقل من نظيرتها في السطح (110) ، بينما طاقة الانتقال K band تكون معاكسة للحالة السابقة. نتائج هذه الطاقات تم تحسينها من خلال إدخال تأثيرات التشويه والاستقطاب.