

# Elektroi azkarren elkarrekintza materiarekin

A. Rivacoba

## Abstract

*In the frame of the classical dielectric formalism the problem of the energy loss experienced by a fast electron moving close to a target is studied. The spatial resolution of STEM experiments and The dependence of the Energy Loss Spectra on the impact parameter is also studied in order to understand the spatial resolution of this experiments.*

## Sarrera

Karga eta materiaren arteko elkarrekintza interes handiko bidea izan da materiaren estruktura ezagutzeko. Rutherford-ek atomo-estruktura  $\alpha$  partikula erabiliz finkatu zuen<sup>(1)</sup>, N. Bohr<sup>(2)</sup>, partikula batek materiarekiko elkarrekintzetan galdutako energiaz arduratu zen, eta haren ereduak —erdiklasikoa bazen ere— ondo samar deskribatzen du energi galera, karga astiro higitzen bada (atomoko elektroiaren abiadurarekin konparatuz). Geroago Bethe-k<sup>(3)</sup> aztertu zuen karga eta sistema atomikoaren arteko energi transferentzia, eta baita kantitate hau talka-parametroaren arabera dela ere.

Fermi-k materiaren elektroi arteko korrelazio-efektua aztertu zuen<sup>(4)</sup>. Horretarako, materia deskribatzekotan, elektroi guztien efektu orokorra —hauxe da medio horren funtzio dielektrikoa— proposatu zuen, elektroia isolaturik kontsideratu ordez. Horrela balentzi

elektroien eszitazioak —plasmoiak— azter daitezke.

Bi medio ezberdinen arteko gainazal-efektua. R. H. Ritchie-k aztertu zuen, gainazal-plasmoi kontzeptua erabiliz<sup>(5)</sup>. Kontzeptu berri hau guztiz garrantzitsua izan zen, mikroskopia elektronikoa agertzen ziren energi galerak aztertzeko balio zuen eta. Ritchie-ren lehen lanak inguru semiinfinituen arteko gainazalei buruzkoak izan ziren. Geroztik, mikroskopia elektronikoa aurrera joan ahala, kontzeptu hau garatu eta erabili izan da EELS (Electron Energy Loss Spectroscopy) aztertzeko.

Mikroskopia elektronikoa gaur egungo garapen-mailak EELS analisia oso interesgarri bihurtzen du materiaren zati txiki bat aztertzeko. Mikroskopioko sorta oso estua (~0.5 nm-koa) da. Horregatik talka-parametro kontzeptuak benetako funtzio garrantzitsua du sorta eta luginaren arteko elkarrekintza deskribatzeko. Gure taldearen azterketa-hel-

burua hauxe da: partikula txikien —esferan— eta sorta elektrikoen arteko elkarrekintza eta EELS-ek sorta/partikula geometriarekiko daukan menpekotasuna aztertzea.

**Talka-parametroa EELS-en**

Talka-parametroaren garrantzia ikusteko, ondoko problema sinplea aztertuko dugu: mikroskopia elektronikoan elektroio bat b distantziara pasatzen da materia-zati txiki bate-tik. Problema honek, sinpleegia bada ere, argi dezake parametro honen eginkizuna.

dV bolumen txiki bat da, eta b da hain zuzen ibilbide hori bereizten duen pa-parametroa (talka-parametroa). Elektroio eta labin-zati horren arteko distantzia handia baldin bada (edo dV oso txikia) **E** eremu elektrikoa —eta **P** polarizazioa— une bakoitzean konstantea izango da materia-zati horren puntu guztietan. Horregatik dV horretan zurgatzen den potentziaren dentsitatea, elektrodinamika klasikoaren bidez kalkula dezakegu:

$$\frac{dW}{dt dV} = \mathbf{E}(t) \cdot \frac{d\mathbf{P}}{dt} \quad (1)$$

Ingurune material batean gaude eta (hau da, sistemaren erantzunak frekuentziarekiko menpekotasuna daukanez), hobe da frekuentziaren esparruan aritzea. Horregatik

$$\mathbf{E}(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \mathbf{E}(\omega) \quad (2)$$

$$\mathbf{E}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \mathbf{E}(t)$$

Sistemaren erantzuna lineala dela kontsideratuz,  $\mathbf{P}(\omega) = \gamma(\omega) \mathbf{E}(\omega)$ ,  $\gamma(\omega)$  erantzun-funtzio bat delarik:

$$\mathbf{P}(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \gamma(\omega) \mathbf{E}(\omega) \quad (3)$$

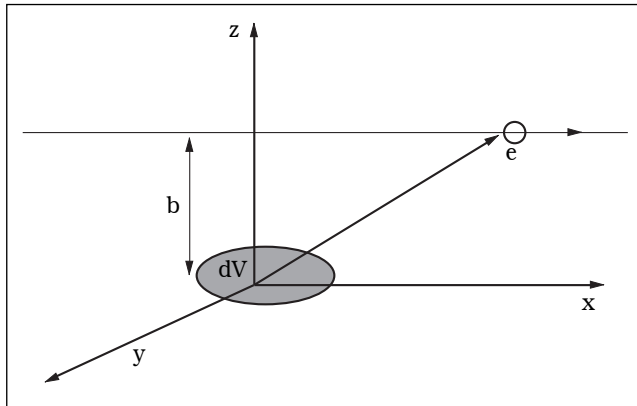
$\gamma(\omega)$  zehatz kalkulatzeko sistema horretan Laplace-ren ekuazioa ebatzi beharko genuke, baina guk nahi dugunerako  $\gamma(\omega)$  sistema osoaren ezaugarri bat dela jakitea nahikoa da. Orain elektroioaren ibilbide osoa kontsideratzen badugu, galdutako energia osoa, aldiuneko galera (1) integratuz lortzen da:

$$\frac{dW}{dV} = \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{dW}{dt dV} = \quad (4)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \gamma(\omega) e^{i(\omega + \omega')t} \mathbf{E}(\omega) \cdot \mathbf{E}(\omega')$$

eta  $\delta(x)$  funtzioaren definizioa erabiliz bi integral ken ditzakegu. Orain elektrodinamikaren bi emaitza kontuan edukiko ditugu

$$\mathbf{E}(-\omega) = \mathbf{E}(\omega)^* \quad \text{eta} \quad \gamma(-\omega) = \gamma(\omega)^* \quad (5)$$



Hemen  $z^*$ -k  $z$ -ren konplexu konjokatua adierazten du. Horrela integrazio-tartea laburtu egin dezakegu,  $[0, \infty]$  gera dadin. Horrela, azkenik, ondoko adierazpena lortuko dugu:

$$\frac{dW}{dV} = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega \alpha \operatorname{Im} \gamma(\omega) |\mathbf{E}(\omega)|^2 \quad (6)$$

non  $\operatorname{Im}(z)$ -k  $z$  konplexuaren alde irudikaria adierazten baitu. Gure kasu honetan  $\mathbf{E}(\omega)$  ezaguna da, elektroiak sortua da eta. Kasu orokorrean  $\mathbf{E}(\omega)$  eta elektroi horri hutsunean higituta legokiokeen eremu coulombdarra,  $\mathbf{E}_c(\omega)$ , proportzionalak dira:  $\mathbf{E}(\omega) = \alpha(\omega) \mathbf{E}_c(\omega)$ ,  $\alpha(\omega)$  erantzun-funtzio bat delarik (esate baterako, ingurunea homogenoa izango balitz,  $\alpha(\omega) = \varepsilon(\omega)^{-1}$ ).  $\mathbf{E}_c(\omega)$  erraz kalkulatzeko da,  $\mathbf{E}_c(t)$  ezaguna da eta:

$$\begin{aligned} E_x(t) &= e \frac{b}{(b^2 + v^2 t^2)^{3/2}} \\ E_y(t) &= 0 \\ E_z(t) &= e \frac{vt}{(b^2 + v^2 t^2)^{3/2}} \end{aligned} \quad (7)$$

Hemendik (2) adierazpenen bitartez, Fourier-en  $\mathbf{E}(\omega)$  osagaiak atera ditzakegu:

$$\begin{aligned} E_x(\omega) &= \frac{2e}{bv} \alpha(\omega) \frac{\omega b}{v} K_1\left(\frac{\omega b}{v}\right) \\ E_z(\omega) &= -i \frac{2e}{bv} \alpha(\omega) \frac{\omega b}{v} K_0\left(\frac{\omega b}{v}\right) \end{aligned} \quad (8)$$

$K_0$  eta  $K_1$  Bessel-en funtzio aldatuak dira. (6) adierazpena energi kopuru berezi bat galtzeko probabilitate-kontzeptuaren bitartez interpreta dezakegu. Energi galera orokorra  $\omega$  frekuentziako zenbait eszitazio edo kitzikapen elementalen ondorioa da. Eremu elektromagnetikoak eragiten ditu horrelako eszitazioak. Mekanika kuantikoak

finkatzen duenez eszitazio horren energia  $\omega$  da, (unitate atomikoak ibiltzen baditugu:  $e = 1$ ,  $\hbar = 1$ , elektroia masa  $m_e = 1$ ). Horregatik  $dV$  horretan horrelako prozesu elemental bat eszitzatzeko probabilitatea (6) adierazpenetik aterako dugu:

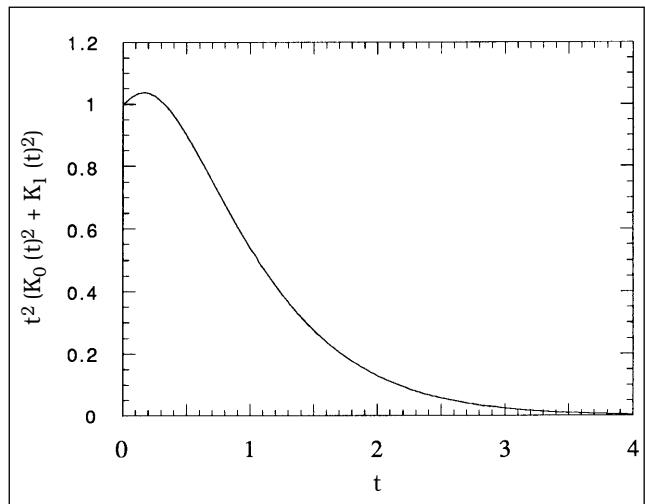
$$\frac{dW}{dV} = \int_0^\infty d\omega \omega \frac{dP(\omega)}{dV} \quad (9)$$

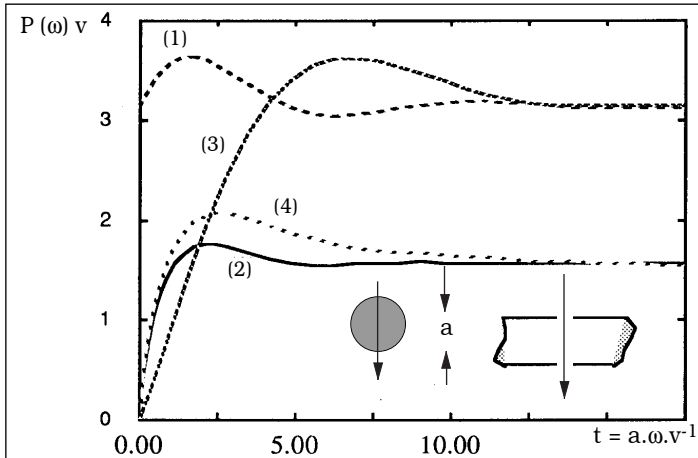
eta azkenean, apur bat operatu ondoren:

$$\begin{aligned} \frac{dP(\omega)}{dV} &\propto \xi(\omega) \frac{1}{v^2 b^2} t^2 [K_0^2(t) + K_1^2(t)] \\ t &= \frac{\omega b}{v} \end{aligned} \quad (10)$$

$\xi(\omega)$  funtzioak sistema osoaren erantzuna deskribatzen du, sistema horren eszitazio bereziak determinatuz. Ikusten dugunez, (10) adierazpenean  $v^{-2}$  faktorea agertzen da; menpekotasun hori tipikoa da honelako prozesuetan, kargaren abiadura handia bada ( $v \gg 1$ , unitate atomikoetan). Talka-parametroarekiko menpekotasuna aztertzearen, adierazpen honetako  $t$  dimentsiogabeko aldagaien funtzioak irudikatzen dugu.

Grafiko honetan nabaritzen denez, funtzio hau oso azkar jausten da zerorantz  $t > 1$  denean. Beherapen hori esponentziala da,






Bessel-en funtzio modifikatuen propietate-gatik. Horregatik talka-parametroarekiko menpekotasuna aztertzean funtzio hau, adierazpen bereko  $b^{-2}$  faktorea baino askoz garrantzitsuagoa da. Honek, puntu batean energi galerak gerta daitezten, puntu horren talka-parametroa eta sistema horren eszitazio bereziko luzera karakteristikoa  $\omega v^{-1}$ -ren antzekoak izan behar dutela (edo "a fortiori"  $b < \omega v^{-1}$ ) esan nahi du. Hori oso garrantzitsua izan daiteke, zenbait emaitza esperimental aztertzeko.

Adibide modura, hurrengo irudian, metal bereko lamina bati eta esfera bati dagozkien galeren probabilitateak adierazi ditugu. Kasu honetan metalaren funtzio dielektrikoa Drude-renaren modukoa da, eta eredu honetan bi eszitazio-mota eragin ditzakegu: bolumeneko eta gainazalekoa. Bolumen-galerak, (2) kurbak —laminari dagokionak— eta (4) kurbak —esferari dagokionak— emanak dira, eta gainazaleko galerei berriz, lehen (lamina) eta hiru-

garren (esfera) kurbak dagozkie. Elektroien ibilbidea irudiko beheko aldean adierazi da.

Irudi honetan ikusten denez, bi geometriak zeharo ezberdinak badira ere, bolumen-galeraren probabilitatea, antzerakoa da bi kasuetan. Gainazal-galeren kasuan bien arteko desberdintasuna handiagoa da, eta honen errua  $t$  oso txikia denean lamina infinitua izateak (horregatik karga irudiaz kargatu egiten da) eta hori esferaren kasuan (hor temino dipolarrak zerora jo du eta) ez gertatzeak dute. Bestela esanda: esfera txikietan  $t$  parametroak ez ditu distantziak norabide egokian neurtzen. Gainazalaren gainean beharko luke, hau da, eszitazio horiek agertzen diren alde berean. Konklusio modura honakoa esan genezake: laginaren geometria urrunak ( $\omega v^{-1}$  baino urrunagoa dagoenak) ez du garrantzi handirik, beste fenomeno berezi bat agertzen ez bada (karga askea edo kargarik eza, esate baterako). 

## BIBLIOGRAFIA

- (1) Rutherford, E. Phil. Mag. **21**, 669 (1911).
- (2) Bohr, N. Philos Mag. **25**, 16 (1913); **26**, 1 (1913).
- (3) Bethe, H. A. Ann. Phys. **5**, 325 (1930).
- (4) Fermi, E. Phys. Rev. **57**, 485 (1940).
- (5) Ritchie, R. H. Phys. Rev. **106**, 874 (1957).

J. D. Jackson-en liburuko hamahirugarren kapitulua gai honetarako sarrera ederra da. Guk egin dugun garapena eta 13.4 atalean agertzen dena, antzerakoak dira.