

Energi galeren azterketa, ekorketa eta transmisioko mikroskopia elektronikoan

N. Zabala

Elektrika eta Elektronika Saila,
Zientzi Fakultatea, E.H.U.

Abstract

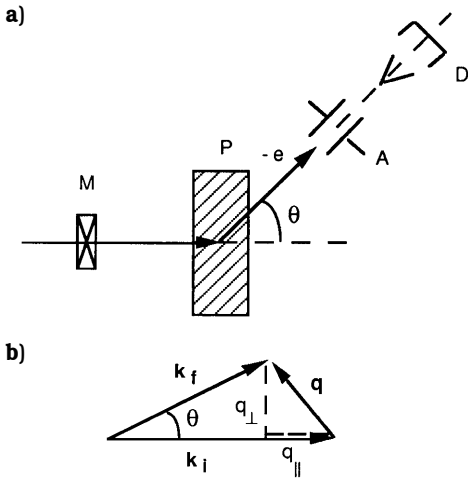
In the last years STEM (Scanning Transmission Electron Microscopy) and specially EELS (Electron Energy Loss Spectroscopy) has attracted increase interest in different fields of Science as Metallurgy, Medicine and Biology. The analysis of the energy loss experienced by electrons that travel close to interfaces of different shapes allows the study of processes as catalysis or hole drilling with the STEM microscope in some materials. In this work, energy loss experiments will be described, first and then the basis of the dielectric theory used to interpret those experiments will be outlined.

Azken urteotan Ekorketa eta Transmisioko Mikroskopia Elektronikoak (STEM, Scanning Transmission Elektron Mikroskopia) eta bereziki Elektroienergi Galera-Espektroskopiak (EELS, Electron Energy Loss Spectroscopy) interes handia sortu du zientziaren zenbait arlotan, hala nola metalurgia, medikuntza eta biologian. Itxura desberdineko gainazalek gertu iragaten diren elektroienergi galera aztertzearen bidez, zenbait prozesuren azterketa burutzen da; zenbait materialetan katalisia edo zulatze-prozesuak STEM mikroskopiorekin, adibidez.

Lan honetan, lehenik, energi galera-esperimentuak deskribatuko dira, ondoren esperimentu horiek interpretatzeko erabili ohi den teoria dielektrikoaren oinarria aztertuko delarik.

Energi galera-espektroskopia

Elektroi-sorta batek material bat zeharkatzen duenean, edo gertu iragaten denean, 10^{23} partikula ingururekin elkarrekiten du Coulomb-en indarren bidez, ondorioz elektroienergi hasierako momentua eta energia alda daitezkeelarik. Gaur egun, transmisioko mikroskopia elektronikoetan elektroi-sortek 100 keV-eko energia eta $\sim 5\text{\AA}$ -eko diametroa edukitzen dute. Lagina zeharkatu ondoren, transmitituriko elektroi-sorta bereizmen handiko elektroienergi galera-espektrometro batera zuzentzen da. Bertan elektroiak energiaren arabera bananduz (1. irudia), energi kantitate bat galdu duen elektroi-kopurua, galduriko energiaren funtzioan adieraz daiteke. Horrela lorturiko energi galera-espektroetan energi leihoa 1 eV mailakoa



1. irudia.

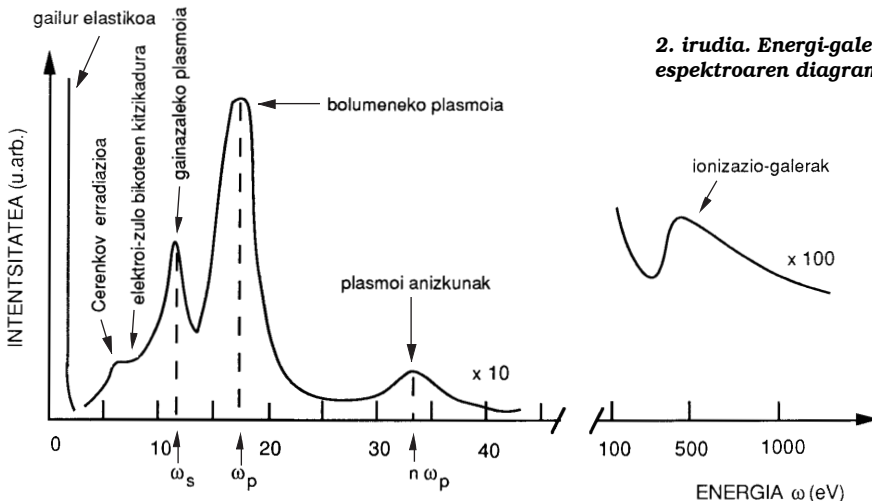
a) STEM mikroskopiaren energi galera-espektrometroa, P solidoan sakabanaturiko elektroiek sorturiko q momentuko kitzikadurak aztertzeko. θ angeluaz desbideraturiko elektroien ω energi galera, (A) energi analitzaileaz eta (D) detektargailuaz neurtua. M monokromatorea da.

b) Elektroierasotzaileen momentu-kontserbazioaren eskema (k_j). k_f sakabanaturiko elektroien momentua da eta q sorturiko kitzikaduraren momentua.

izaten da. Teknika honen beste aukera bat, energi kantitate konkretua galduriko elektroiekin laginaren eskualde lokalizatu baten irudia (hots, filtraturiko energi irudia) lortzen da.

2. irudian, energi galera-espektrua azaldu da eskematikoki. Gailur elastikoa, edo zero galerakoa, elektroierasotzaileen eta nukleo atomikoen arteko elkarrekintzari dagokio. Sarearen bibrazioen kitzikadurak, fonoiak, gailur honen barruan daude.

Sakabanaketa inelastikoaren kausa, ingurunearen eta sortaren elektroien arteko elkarrekintza da. Inguruneko elektroiek maila sakonetakoak direnean, Fermi mailatik oso beherakoak, ionizazio-prozesuak gertatzen dira, eta beraiekin batera, X izpien edo Auger elektroien igorpena. Erdieroale eta isolatzaileetan balentziako elektroiek banden arteko trantsizioak jasaten dituzten debekatutako energi tartean zehar. Atomoaren elektroierasotzaileen arteko kitzikadura elektronikoko kolektiboak gerta daitezke, hots, luzerako uhinen eran hedatzen diren balentziako elektroierasotzaileen oszilazioak. Kuantikoki hitz eginez, oszilazio hauek plasmoi izena duen ω_p energiako pseudopartikulari loturik daude. Plasmoien energia, balentziako



2. irudia. Energi-galera espektroaren diagrama.

gertaera bakoitzaren probabilitatea, elektroi gasaren kitzikadura indibidualaz gain, kitzikadura kolektiboak edo plasmoiak kontutan hartzen ditu, $\epsilon(\mathbf{k}, \omega) \cong 0$ eta elkarraldaturiko momentua txikia direnean.

Metal baten erantzun dielektrikoaren eredurik sinpleena Drude-ren funtzio dielektrikoa dugu:

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)} \quad (5)$$

non

$$\omega_p = \sqrt{4\pi n_0}$$

plasmaren maiztasuna n_0 elektroi-gasaren dentsitatea eta γ indargetze-konstantea diren. Elektroi askeen kasu idealean, $\gamma = 0$ litzateke, oszilazio kolektiboek amaierarik ez luketelarik.

Funtzio dielektriko hori, luzera-unitateko energi galeraren adierazpenean ordezkatzu eta Q_c momentu maximoa kontsideratuz, elektroiarren $v \gg \omega_p/Q_c$ abiadura handien limitean:

$$\frac{dW}{dy} = \frac{\omega_p^2}{v^2} \ln\left(\frac{Q_c v}{\omega_p}\right) \quad (6)$$

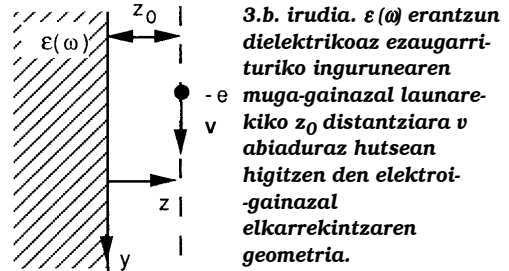
lortzen da, non Q_c momentua $2v$ balioaz ordezkatzu, Bethe-k 1930. urtean (3) lorturiko emaitza lortzen den.

$\epsilon(\omega) = \epsilon(\mathbf{k}, \omega)$ funtzio dielektriko konplexuaren informazioa, neurketa optikoen bidez lor daiteke. STEM teknika berak ere, funtzio dielektrikoaren datu esperimentalak lortzeko erabili ohi da. Bigarren kasu horretan $\text{Im}(-1/\epsilon(\omega))$ galera-funtzioa energi tarte batean neurtzen da eta hortik Kramers-Kronig erlazioak erabiliz, funtzio dielektrikoaren alde erreala eta irudikaria lor daitezke.

Gainazal batez mugaturiko ingurunea kontsideratzen denean, energi galera-espektroan ingurune infinituko bolumeneko plasmoei dagokien ω_p baino energia baxuagoan erresonantzia bat azaltzen da. Gainazal launaren kasuan erresonantzia hori $\omega_p/\sqrt{2}$ energian gertatzen da, Ritchie-k (4) aurrean

zuenez eta geroago Powell eta Swan-ek (5) aluminio eta magnesioko xafletan ikusi zuten.

Gainazal launaz mugaturiko ingurune erdiinfinituen kasuan (ikus 3.b. irudia), teoria dielektrikoak ondoko adierazpena ematen du energi galerarentzat:



3.b. irudia. $\epsilon(\omega)$ erantzun dielektrikoaz ezaugarrituriko ingurunearen muga-gainazal launarekiko z_0 distantziara v abiaduraz hutsean higitzen den elektroigainazal elkarrekintzaren geometria.

$$\frac{dW}{dy} = \int_0^\infty d\omega \omega P(\omega) \quad (7)$$

non

$$P(\omega) = \frac{2}{\pi v^2} K_0\left(2\omega \frac{z_0}{v}\right) \text{Im}\left[\frac{\epsilon-1}{\epsilon+1}\right] \quad (8)$$

den, $z_0 > 0$ denean, hau da, elektroia inguruntetik kanpo joaten denean eta

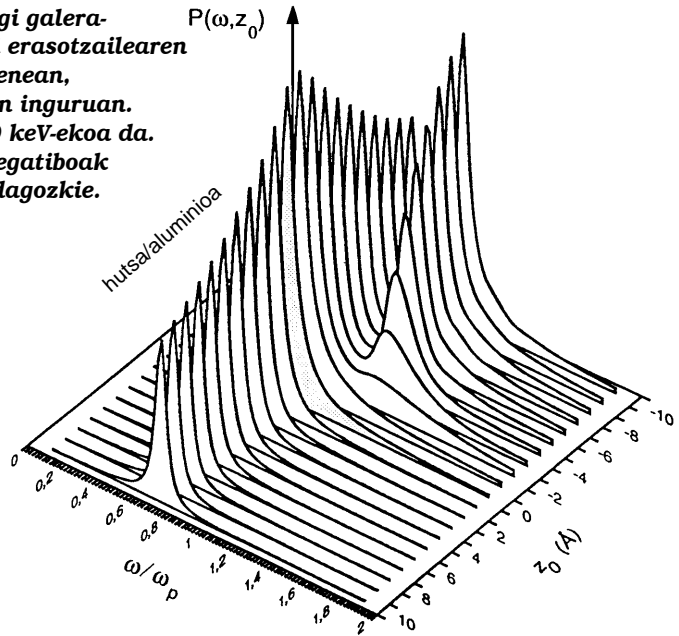
$$P(\omega) = \frac{2}{\pi v^2} \left\{ \text{Im}\left(\frac{-1}{\epsilon}\right) \ln\left(\frac{k_c v}{\omega}\right) + \left[\text{Im}\left(\frac{\epsilon-1}{\epsilon+1}\right) - \text{Im}\left(\frac{-1}{\epsilon}\right) \right] K_0\left(\frac{2\omega z_0}{v}\right) \right\} \quad (9)$$

elektroia materialen barnetik joaten denean, hots, $z_0 < 0$ denean. Aurreko adierazpenetan erantzun dielektrikoa energiaren funtzio da, hau da,

$$\epsilon = \epsilon(\omega) \text{ eta } K_0\left(2\omega \frac{z_0}{v}\right)$$


zero mailako aldaturiko Bessel-en funtzioa da. Bigarren adierazpenak hiru gai ditu: bata, gainazaleko energi galerari dagokiona eta elektroia hutsetik, $z_0 > 0$, joaten denekoaren

4. irudia. Kalkulaturiko energi galera-espektroen aldaketa elektroi erasotzailearen talka-parametroa aldatzen denean, aluminioa/hutsa gainazalaren inguruan. Elektroi-sortaren energia 100 keV-ekoa da. Talka-parametroaren balio negatiboak metalean barneko ibilbideei dagozkie.



berdina dena, eta beste biak, bolumeneko energi galera adierazten dutenak dira. Logaritmoaz biderkatutako lehen gaia, ϵ erantzun dielektrikodun ingurune infinituari dagokion energi galera dugu, bertan, k_c ebakidura-momentua kontuan eduki delarik. Bolumeneko energi galerak kontutan hartu dituen beste gaia, Bessel-en funtzioaz biderkatutako dago eta gainazalaren presentziak bolumeneko galeren gaineko eraginaren adierazle da. Beraz, gainazal mugaturiko ingurunean sorturiko eragina bikoitza da: alde batetik, $\text{Im} [(e-1)/(e+1)]$ funtzioaz adierazirik gainazaleko modoa ageri da, eta bestetik, bolumeneko modoen kitzikadura-probabilitatea txikiagotu egiten da elektroiak ingurunea zeharkatzean. 4. irudian kalkulaturiko energi galera-espektroak adierazi dira, elektroi erasotzailea aluminioa/hutsa gainazalarekiko paraleloki higitzen denean, talka-parametroaren balio desberdinetarako. Ikus daitekeenez, elektroiaren ibilbidea kanpotikoa denean ($z_0 > 0$) espektroak gailur bat adierazten du; gainazaleko plasmoiari dagokiona. Aluminioan barneko ibilbideen kasuan ($z_0 < 0$), berriz bi

gailur agertzen dira: bata gainazaleko plasmoiari dagokiona, eta bestea, ω_p -ren inguruan, bolumeneko plasmoiarena. Kalkulu horietan Mermin-en $\epsilon(\mathbf{k}, \omega)$ funtzio dielektrikoa erabili da. Beraz, energi galera kalkulatzeko ez dira (8) eta (9) adierazpenak erabili; formula konplexuagoak baizik.

Ondorioz, eredu dielektrikoaren erabilgarritasuna STEM mikroskopiaren energi galera-esperimentuak azaltzeko azpimarratu behar da. Lan honetan, geometrikoki, kasurik sinpleenak kontsideratu diren arren, partikula esferikoaren kasuan edo beste sistema konplexuagoetan ere erabili izan da eredu hau, esperimentuak esplikatzen arrakasta handia lortuz. 

BIBLIOGRAFIA

- (1) Fermi, E. Phys. Rev. **57** (1940) 485.
- (2) Lindhard, J. Kgl. Dawks. Vid. Scls. Mat Fys. Medd. **28** No 8 (1954).
- (3) Bethe, H. A. Ann. Phys. (Leipzig) **5** (1930) 325.
- (4) Ritchie, R. H. Phys. Rev. **106** (1957) 874.
- (5) Powell, C. P. and Swan, J. B., Phys. Rev. **115** (1959) 869; Phys. Rev. **116** (1959) 816.